

# 解析サービスと ソフトウェア開発 受託サービスのご案内



〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング 17 階西  
TEL: 03-6826-3971 E-mail: office@advancesoft.jp

# アドバンスソフト株式会社の 解析事例集



<http://case.advancesoft.jp/>

メニューの  
技術情報 > 解析事例集からどうぞ



## ◆産業分野別

当社が所有するソフトウェアは、流体、構造、電磁場、第一原理計算、量子化学計算、原子力、自動車、宇宙航空など、多くの産業分野において適用実績があります。

## ◆解析分野別

産業界には、流れ、温度、変形、応力、音響、振動等が相互に関連しているような現象の課題を解決するために、多くの連成問題が研究されており、また数多くの設計課題の取り組みが開始されています。

## ◆パッケージソフトウェア別

当社のパッケージソフトウェアは、産学官連携プロジェクト等を経て開発された、日本の国産製品です。当社は、ソースコードを改良する権利を有しているため、お客様のご要望にお応えしたカスタマイズが可能です。また、開発に従事した技術者等によるサポートを提供していますので、国内での迅速な対応が可能です。



## 目次

1. はじめに .....	vii
(1) 会社設立の目的（2002 年創業） .....	vii
(2) 解析サービス .....	viii
(3) ソフトウェア開発受託サービス .....	ix

2. 解析事例 .....	1
---------------	---

※タイトル [パッケージソフトウェア名の略号] v ページの表 1 が略号の対照表です



### 【自動車・運輸】

ターボファンの流体騒音解析 [A/FFred] .....	2
自動車用圧縮水素容器の急速充填シミュレーション [A/FFred] .....	3
ボルトプリテンション解析 [A/FSTR] .....	5
マフラーの性能解析（内部問題） [A/FNoise] .....	7
移動ポーラスモデルを使ったトンネル突入時の圧力波解析 [A/FNet/Γ] .....	8
汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP_PrePost を用いた FrontSTR 熱伝導解析 [A/REVOCAP] .....	9
FrontNoise によるマフラーの解析の手順 [A/REVOCAP] .....	12
4 気筒エンジンモデルの評価 [Advance/JIANT] .....	16
OpenModelica を用いた PID 制御パラメータ決定 [A/JIANT] .....	91
Advance/JIANT を用いた回路の最適設計 [A/JIANT] .....	109
モータ制御デバイス解析 [A/TCAD] .....	118



### 【材料・化学】

第一原理計算による電子状態・結晶性質の解析 [A/PHASE] .....	18
第一原理計算による STM 像のシミュレーション [A/PHASE] .....	19
第一原理計算による XPS スペクトルのシミュレーション [A/PHASE] .....	20
理論と実験が一致! 合金の偏析効果による仕事関数制御 [A/PHASE] .....	21
分子性結晶の第一原理シミュレーションの高速化 [A/PHASE] .....	23
強磁性半導体 $\text{Ga}_{30}\text{V}_2\text{N}_{32}$ の第一原理解析 [A/PHASE] .....	24
酸化物のボリン有効電荷・格子誘電率の計算 [A/PHASE] .....	25
炭素材料や $\text{MgO}$ の EELS/XAFS の第一原理計算 [A/PHASE] .....	26

FIRE 法によるリチウム拡散経路の NEB 計算 [A/PHASE] .....	27
白金(111)表面における一酸化炭素分子の吸着構造の密度汎関数理論による計算 [A/NanoLabo]....	28
NEB 法による Al アドアトムの拡散経路の解析 [A/NanoLabo].....	30
分子動力学シミュレーションによる Ni 単結晶のヤング率の異方性の計算 [A/NanoLabo] .....	33
汎用グラフニューラルネットワークカ場 M3GNet を用いた $\text{Li}_3\text{OCl}_{1-x}\text{Br}_x$ の室温における イオン伝導率の計算 [A/NanoLabo] .....	36
汎用ニューラルネットワークカ場による Ti-6Al-4V の体積弾性率の計算 [A/NanoLabo] .....	39
マルチ GPU 対応の汎用 GNN カ場 SevenNet による分子動力学計算ベンチマーク [A/NanoLabo]..	41
$\Delta$ -NNP 法によるリチウムイオン伝導体 LGPS の伝導率計算 [A/NeuralMD].....	43
自己学習ハイブリッドモンテカルロ法による酸化物系リチウムイオン伝導体 LLZO の 伝導率計算 [A/NeuralMD] .....	47
32GPU 搭載クラウドにおけるベンチマーク[A/NeuralMD] .....	50
分子動力学シミュレーションを用いた水素添加時における鉄の劣化解析 [A/NeuralMD].....	52
衝突噴流による沸騰冷却の検証解析 [A/FMP] .....	69
曲がり管内の固気液三相流解析 [A/FMP] .....	70
水と油の混合解析 [A/FMP] .....	71
流動層の高濃度固気二相流解析 [A/FMP] .....	73
プール沸騰の検証解析 [A/FMP].....	76
表面反応の解析事例 [A/FFred] .....	123
中性子残留応力解析 [A/iMacle].....	135
ウォーターカーテンによる吸収を伴う漏洩ガスの拡散解析 [A/FMP].....	163



## 【産業機械】

ボルトブリテンション解析 [A/FSTR] .....	5
汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP_PrePost を用いた FrontSTR 熱伝導解析[A/REVOCAP] .....	9
膜要素を使用したバルーンの膨らみ解析 [A/FSTR] .....	55
微細構造モデリングツールで作成した複合材料モデルの熱伝導解析 [A/REVOCAP].....	57
VOF 法を用いたタンクからの放水解析 [A/FFred].....	58
VOF 法の解析事例 [A/FFred] .....	59
鉄道車両内の空調解析 [A/FOCUS-i].....	60
空調機コンプレッサーの室内騒音評価 [A/FNoise] .....	61
エッジトーンの流体音響弱連成解析 [A/FNoise].....	64
スロットダイ塗布解析 [A/FMP].....	67
レーザー溶接の解析 [A/FMP].....	68



衝突噴流による沸騰冷却の検証解析 [A/FMP] .....	69
曲がり管内の気液三相流解析 [A/FMP] .....	70
水と油の混合解析 [A/FMP] .....	71
流動層の高濃度気相二相流解析 [A/FMP] .....	73
サブチャンネル内の気泡合体解析 [A/FMP] .....	74
プール沸騰の検証解析 [A/FMP] .....	76
LNG 輸送システムの緊急遮断弁閉鎖時の水撃解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	77
ポンプ機能喪失・回復時の液柱分離・再結合解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	78
ポンプトリップ解析（低い位置の空気弁考慮） [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	79
ポンプトリップ解析（高い位置の空気弁考慮） [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	80
圧力制御弁 PID 値検討解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	82
エアチャンバー（空気室）を考慮した場合のポンプトリップ解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	83
ポンプ完全特性を考慮した夜間揚水発電ポンプのトリップ解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	84
バルブ遮断時の圧力波伝播解析 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	86
コークス炉におけるブロワトリップ時のガスホルダー影響検討 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	87
ローラミルによる分級のシミュレーション [A/DEPTH] .....	89
OREX 周りの極超音速流 [A/FOCUS-i] .....	99
Rouse-McNown の実験に係る検証計算 [A/FOCUS-i] .....	100
気液二相流（キャビテーション流）の解析例 [A/FOCUS-i] .....	101
移動重合格子による球の水面への突入解析（超高速、 $V=1000\text{m/s}$ で斜め入射） [A/FOCUS-i] ...	103
座屈解析機能 [A/FSTR] .....	107
水素漏洩拡散シミュレーション [A/FOCUS-i] .....	154
超高压と超低压が混在する管路系流体解析 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	160
ウォーターカーテンによる吸収を伴う漏洩ガスの拡散解析 [A/FMP] .....	163



## 【航空宇宙】

OpenModelica を用いた PID 制御パラメータ決定 [A/JIANT] .....	91
燃焼解析 [A/FFred] .....	93
密閉施設内の爆轟遷移予測のシミュレーション [A/FOCUS-i] .....	94
回転デトネーションのシミュレーション [A/FOCUS-i] .....	96
Euler 計算に関する他コードとの予測性能比較 [A/FOCUS-i] .....	97
OREX 周りの極超音速流 [A/FOCUS-i] .....	99
Rouse-McNown の実験に係る検証計算 [A/FOCUS-i] .....	100
気液二相流（キャビテーション流）の解析例 [A/FOCUS-i] .....	101
移動重合格子による球の水面への突入解析（超高速、 $V=1000\text{m/s}$ で斜め入射） [A/FOCUS-i] ...	103

URANS(k- $\omega$ SST)と SST-DDES による円柱周りのレイノルズ数効果の検証解析 [A/FOCUS-i] ...	105
Advance/JIANT を用いた回路の最適設計[A/JIANT] .....	109
水素漏洩拡散シミュレーション [A/FOCUS-i] .....	154



## 【半導体・エレクトロニクス】

5 段 CMOS リングオシレータの過渡解析 [A/TCAD] .....	111
DRAM ソフトエラーのデバイスシミュレーション [A/TCAD] .....	113
SRAM ソフトエラーの 3 次元デバイスシミュレーション [A/TCAD] .....	115
イオン注入計算事例 [A/TCAD] .....	117
モータ制御デバイス解析 [A/TCAD] .....	118
回折格子とプラズモン増強 [A/ParallelWave] .....	119
薄型太陽電池 [A/ParallelWave] .....	120
垂直色分離型センサー [A/ParallelWave] .....	121
マイクロレンズ付き受光素子 [A/ParallelWave] .....	122
表面反応の解析事例 [A/FFred] .....	123
超高圧と超低圧が混在する管路系流体解析 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	160



## 【建築土木】

移動ポーラスモデルを使ったトンネル突入時の圧力波解析[A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	8
FrontNoise によるマフラーの解析の手順[A/REVOCAP] .....	12
膜要素を使用したバルーンの膨らみ解析 [A/FSTR] .....	55
空調機コンプレッサーの室内騒音評価 [A/FNoise] .....	61
ポンプ機能喪失・回復時の液柱分離・再結合解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	78
ポンプトリップ解析（低い位置の空気弁考慮） [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	79
ポンプトリップ解析（高い位置の空気弁考慮） [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	80
エアチャンバー（空気室）を考慮した場合のポンプトリップ解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	83
ポンプ完全特性を考慮した夜間揚水発電ポンプのトリップ解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	84
ローラミルによる分級のシミュレーション[A/DEPTH] .....	89
座屈解析機能 [A/FSTR] .....	107
多孔性媒質を考慮した流れ場の評価 [A/FFred] .....	125
長大トラス橋の地震応答解析事例 [A/FSTR] .....	129
梵鐘の構造音響弱連成解析 [A/FNoise] .....	131
中性子残留応力解析 [A/iMacle] .....	135



地震時の冷却配管系の加振応答解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	157
水－空気置換管路系流体解析 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	161



## 【原子力】

衝突噴流による沸騰冷却の検証解析 [A/FMP] .....	69
サブチャンネル内の気泡合体解析 [A/FMP] .....	74
プール沸騰の検証解析 [A/FMP] .....	76
Advance/FOCUS-i による実建屋モデルを利用した爆燃・爆轟解析 [A/FOCUS-i] .....	137
過酷事故時の原子炉格納容器・原子炉建屋内の水素分布解析 [A/BAROC] .....	140
過酷事故時の原子炉格納容器・原子炉建屋内のセシウムの挙動解析 [A/BAROC] .....	142
ISP-47 ThAI 試験国際標準問題に対する検証解析 [A/BAROC] .....	144
ブローアウトパネル作動時の原子炉建屋内水素濃度分布解析 [A/BAROC] .....	146
過酷事故時の原子炉建屋内におけるセシウムエアロゾル挙動解析 [A/BAROC] .....	148
NSPP エアロゾル試験の検証解析 [A/BAROC] .....	150
原子炉建屋内での水素爆燃・爆轟領域の可視化 [A/BAROC] .....	152
ウォーターカーテンによる吸収を伴う漏洩ガスの拡散解析 [A/FMP] .....	163



## 【エネルギー】

LNG 輸送システムの緊急遮断弁閉鎖時の水撃解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	77
ポンプ機能喪失・回復時の液柱分離・再結合解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	78
ポンプトリップ解析（低い位置の空気弁考慮） [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	79
ポンプトリップ解析（高い位置の空気弁考慮） [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	80
圧力制御弁 PID 値検討解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	82
エアチャンバー（空気室）を考慮した場合のポンプトリップ解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	83
ポンプ完全特性を考慮した夜間揚水発電ポンプのトリップ解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	84
バルブ遮断時の圧力波伝播解析 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	86
コークス炉におけるブロワトリップ時のガスホルダー影響検討 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	87
液体管路系過渡解析 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	138
地震時の冷却配管系の加振応答解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	157
都市ガス管路網地震時の供給停止に伴う圧力振動過渡解析 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	158
ガスパージ解析の実測値との比較 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	159
水－空気置換管路系流体解析 [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	161
熱量変動解析（実機比較） [A/FNet/ $\Gamma$ ] .....	162



【農業土木、環境・防災】

ローラミルによる分級のシミュレーション[A/DEPTH] .....	89
地震による地盤の変動を解析するプログラム [A/FSTR] .....	127
長大トラス橋の地震応答解析事例 [A/FSTR].....	129
可動堰のあるパイプラインの過渡解析 [A/FNet/ $\Omega$ ] .....	156
河川氾濫解析・洪水リスク評価 [A/RiverFlow] .....	165
花粉飛散量の評価 [A/Emerg] .....	167
【広告】 .....	168

表 1 対照表（解析に使用しているパッケージソフトウェア名の略号）

分野	略号	パッケージソフトウェア名
ナノ・バイオ系	[A/PHASE]	第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE
	[A/NanoLabo]	ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo
	[A/NeuralMD]	ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD
	[A/TCAD]	3次元 TCAD システム Advance/TCAD
	[A/ParallelWave]	電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave
流体・構造系	[A/FFred]	流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red
	[A/FOCUS-i]	高速流解析ソフトウェア Advance/FOCUS-i
	[A/FSTR]	構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR
	[A/FNoise]	音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise
	[A/FMP]	気液二相流解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP
	[A/FNet/ $\Omega$ ]	管路系液体過渡解析ソフトウェア Advance/FrontNet/ $\Omega$
	[A/FNet/ $\Gamma$ ]	管路系流体過渡解析ソフトウェア Advance/FrontNet/ $\Gamma$
	[A/REVOCAP]	汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP
AI	[A/iMacle]	深層学習用ツール Advance/iMacle
防災、原子力、 その他	[A/RiverFlow]	河川氾濫シミュレーションシステム Advance/RiverFlow
	[A/Emerg]	大気拡散影響予測システム Advance/Emerg
	[A/BAROC]	過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC
	[A/DEPTH]	離散要素法による粒子シミュレーションソフト Advance/DEPTH
	[A/JIANT]	品質工学ツール Advance/JIANT



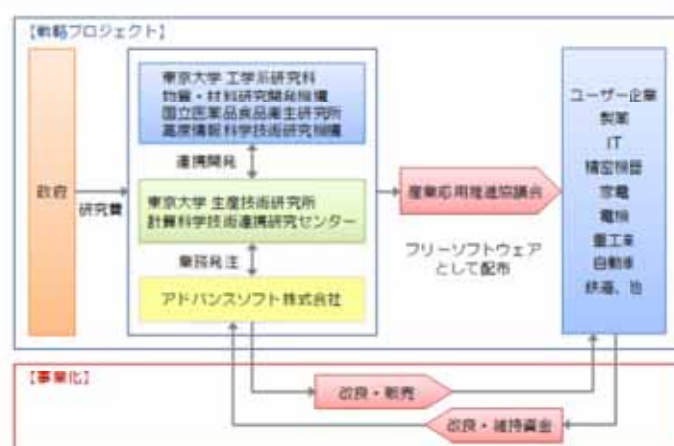
## 1. はじめに

### (1) 会社設立の目的（2002年創業）

計算科学技術は科学技術、産業技術の基盤技術ですが、2000年当時、わが国の計算科学技術用の産業応用ソフトウェアは欧米のソフトウェアにほぼ独占されている状況にありました。この状況を打破すべく、計算科学技術用の産業応用ソフトウェアの研究開発から実用化までを目指す、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プロジェクト」が実施されました。アドバンスソフト株式会社は、東京大学生産技術研究所とともにこのプロジェクトに参加し、ソフトウェア開発の中核を担うとともに、開発されたソフトウェアの実用化、事業化することを目的として、設立されました。

アドバンスソフト株式会社が、20年間に開発し販売する、産業応用ソフトウェアは20本近くになります。アドバンスソフト株式会社はこれらの販売、ソフトウェアを活用した解析サービス、ソフトウェア開発受託サービスを行っています。

## 国家プロジェクトとアドバンスソフトの設立



文部科学省はわが国の計算科学技術の振興目的として戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクトと革新的シミュレーション・ソフトウェア開発プロジェクトを2002年～2007年の6年間実施しました。このプロジェクトは、総額約70億円のわが国最大のソフトウェア開発プロジェクトであり、東京大学生産技術研究所を中核とした「学」と「産」のアドバンスソフト(株)の強力な産学官連携により推進されました。

### 研究開発成果の事業化



- このプロジェクトの目的は
- ①複雑・大規模な世界水準の戦略的基盤ソフトウェアを開発し公開する
  - ②戦略ソフトを開発できるトップレベルの人材を世界最先端のソフトウェア開発を通じて育成する
  - ③戦略的基盤ソフトウェア開発の大学と企業の連携による研究拠点の構築をする
  - ④アドバンスソフトによる開発したソフトウェアの事業化と持続的な改良をする

アドバンスソフト(株)はこのプロジェクトを推進し、世界最高水準のソフトウェアを開発するとともに、その成果を事業化することを目的として設立されました。

## (2) 解析サービス

アドバンスソフト株式会社は設立 20 周年を迎えました(2022 年 4 月現在)。この間多くのソフトウェアを開発し販売してきました。世界的レベルのソフトウェアに限っても 20 種類を超えます。またこれらのソフトウェアの開発に携わった技術者も 70 名を超え、わが国最大の計算科学技術用ソフトウェアの開発集団です。

アドバンスソフト株式会社は、これらのソフトウェアを活用した解析サービスを 20 年にわたって提供してきました。多くの解析経験を有し、計算科学技術分野において、あらゆる解析の要望に応えられます。計算科学技術分野の解析をご検討の際は、ぜひともアドバンスソフト株式会社にお問い合わせください。

表 2 アドバンスソフト株式会社の開発・販売する主なソフトウェア

流体解析ソフトウェア	Advance/FrontFlow/red
気液二相流解析ソフトウェア	Advance/FrontFlow/MP
高速流解析ソフトウェア	Advance/FOCUS-i
構造解析ソフトウェア	Advance/FrontSTR
汎用プリポストプロセッサ	Advance/REVOCAP
管路系液体過渡解析ソフトウェア	Advance/FrontNet/ $\Omega$
管路系流体過渡解析ソフトウェア	Advance/FrontNet/ $\Gamma$
音響解析ソフトウェア	Advance/FrontNoise
河川氾濫シミュレーションシステム	Advance/RiverFlow
大気拡散影響予測システム	Advance/Emerg
第一原理計算ソフトウェア	Advance/PHASE
ナノ材料解析統合 GUI	Advance/NanoLabo
ニューラルネットワーク分子動力学システム	Advance/NeuralMD
3 次元 TCAD システム	Advance/TCAD
電磁波解析ソフトウェア	Advance/ParallelWave
過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード	Advance/BAROC
深層学習用ツール	Advance/iMacle
離散要素法による粒子シミュレーションソフト	Advance/DEPTH
品質工学ツール	Advance/JIANT

アドバンスソフト株式会社の開発・委販売する主なソフトウェアの総合カタログは web ページからダウンロードしてください。

[https://www.advancesoft.jp/product/pdf/general\\_catalog.pdf](https://www.advancesoft.jp/product/pdf/general_catalog.pdf)





### (3) ソフトウェア開発受託サービス

アドバンスソフト株式会社は表 2 に示すように多数の世界的レベルのソフトウェアを開発しています。また多くの国家プロジェクトにおいても、ソフトウェアの開発を担当してきました(表 3)。

アドバンスソフトは計算科学技術分野のソフトウェア開発に関して、わが国最大の技術者集団です。ソフトウェアの開発技術者は約 70 名で、その半数以上が理学博士です。

計算科学技術分野のソフトウェアの開発をご検討の際は、ぜひともアドバンスソフト株式会社にお問い合わせください。

表 3 アドバンスソフト株式会社がソフトウェア開発を担当した主な国家プロジェクト

文部科学省の「戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト」	
実施期間	2002～2004 年度
プロジェクト概要	わが国の総力を結集し、世界レベルのシミュレーションソフトウェアを開発し、わが国のシミュレーションソフトウェア開発の基盤を構築すると共に、研究開発成果を事業化します。
目的	文部科学省 IT プログラムの一環として 2002 年度からスタートしたものであり、わが国の科学技術重点分野である、バイオ・ナノ分野やエネルギー・環境分野における、世界水準の実用ソフトウェアの開発を目的としております。
成果概要	本プロジェクトは、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が開発拠点となり、東京大学大学院工学系研究科、国立医薬品食品衛生研究所、独立行政法人物質・材料研究機構、財団法人高度情報科学技術研究機構、アドバンスソフト株式会社などとの産学官連携により、ソフトウェアの実証開発を進めております。アドバンスソフト株式会社では、「バイオ」「ナノ」「環境」「防災」など、実用レベルの解析シミュレーション・ソフトウェアの開発や事業化に取り組んでいます。

文部科学省の「革新的シミュレーションソフトウェア開発プロジェクト」	
実施期間	2005～2007 年度
プロジェクト概要	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」は、2002 年度より開始された文部科学省 IT プログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」の成果をさらに発展させると共に新しいテーマを追加して、2005 年度に開始されました。 アドバンスソフト株式会社は、これらプログラムの趣旨に沿って、ソフトウェアの改良・開発を継続的に行う役割を担っています。
成果概要	この経緯から、アドバンスソフト株式会社は「バイオ」「ナノ」「環境」「防災」「エンジニアリング」などわが国の科学技術重点分野において次世代の基盤技術となる実用レベルの解析シミュレーション・ソフトウェアの開発や事業化に取り組んでいます。

科学技術振興機構(JST) 研究成果展開事業 研究成果最適展開支援プログラム(A-STEP)  
「半導体デバイス 3 次元 TCAD システム」

実施期間	2011～2015 年度
プロジェクト概要	科学技術振興機構 (JST) は平成 23 年度研究成果最適展開支援プログラム (A-STEP) 本格研究開発ステージ 実用化挑戦タイプにおいてアドバンスソフト株式会社が提案した「半導体デバイス 3 次元 TCAD システム」を採択しました。これに伴い、アドバンスソフト株式会社は本格的な TCAD の開発に着手しました。開発期間は平成 23 年度から平成 27 年度で、開発担当者はアドバンスソフト株式会社です。このプロジェクトの目的は、世界レベルの本格的「半導体デバイス 3 次元 TCAD システム」を開発し、事業化することです。
目的	最先端の微細素子およびパワーデバイスの 3 次元シミュレーションが可能な世界的レベルの「次世代 3 次元 TCAD システム」を開発し、半導体産業のイノベーションの基盤技術を提供します。さらにこのソフトウェアを事業化し、海外製品の独占状態を打破します。
成果概要	開発する「次世代 3 次元 TCAD システム」は、微細素子とパワーデバイスを主対象としています。プロセスシミュレーションからデバイスシミュレーションまで一貫したシミュレーションが可能な統合ソフトウェアで、ユーザーフレンドリーな統合プラットフォームを使った 3 次元シミュレーションを実現します。

文部科学省「原子力システム研究開発事業（ボトルネック課題解決型）」  
AI 技術を活用した確率論的リスク評価手法の高度化研究

実施期間	2022～2024 年度
プロジェクト概要	日本原子力研究開発機構殿と共に、原子力発電所の確率論的リスク評価（PRA）に関する解析作業の負担軽減と等質化を目指し、AI やデジタル化技術を活用したツール開発を実施しています。本研究の内、アドバンスソフトは「信頼性データベース構築のための自動故障判定手法の開発」を委託にて担当しています。ここでは、NUCIA ( <a href="http://www.nucia.jp/">http://www.nucia.jp/</a> ) 掲載のトラブル情報等の報告書テキストから、故障判定および故障機器や故障原因等の抽出を実施し、データベース化するためのツールを研究開発します。生成 AI を活用することで、トラブル情報等の分析を実施させわかりやすく構造化して可視化させることが可能です。これにより、分析者による個別性を排除した等質化や分析作業の負担軽減を実現できます。

## 参考文献

技術情報誌 アドバンスシミュレーション Vol.11 「Made in Japan の計算科学技術ソフトウェアの開発」 2012 年 4 月 27 日  
技術情報誌 アドバンスシミュレーション Vol.31 「計算科学の裾野を広げる」 2024 年 7 月 5 日

【問い合わせ先】アドバンスソフト株式会社 営業部  
〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目 3 番地 新お茶の水ビルディング 17 階西  
TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580 URL: <http://www.advancesoft.jp/>  
E-mail: [office@advancesoft.jp](mailto:office@advancesoft.jp)



## 2. 解析事例

※タイトル [パッケージソフトウェア名の略号] vi ページの表 1 が略号の対照表です

## 【自動車・運輸】ターボファンの流体騒音解析 [A/FFred]

### 1. 解析対象

空調用のターボファン 空調用のターボファン

### 2. 使用ソフトウェア

流体解析ソフトウェア Advance/Flow/red

### 3. 協力

共同研究・事例提供：東プレ株式会社

### 4. 解析モデル

ターボファンによる流体騒音を LES(Large Eddy Simulation)を基礎とした Lighthill 音響アナログによる分離解法を使用して評価しました。モデルには、空調用のターボファンを製造する国内トップメーカーの東プレ株式会社様にご協力頂き、約 400rpm で半径 230mm の遠心ファン製品モデルを使用しています。

### 5. 解析結果

流れ場の乱れによって誘起される流体音は低マッハ数の流れ場では 2 重極音が支配的となり、4 重極音は無視できます。そこで Lighthill 方程式を移動・回転系に拡張して解いたポテンシャル解の一つである Ffowcs Williams and Hawkings 式により流体音源を評価し、遠方場の波動解を直接実測値と比較しました。

計算コードには回転系と静止系の干渉問題を取り扱うためスライディング・メッシュ・テクニックを採用しており、圧力不連続によるノイズの影響が陽解法による解析に耐えうるレベルにまで低減することに成功しています。

計算に使用したのは約 200 万要素の四面体格子であり、一般的なクラスタ型の並列 PC を使用して設計開発現場における実用範囲内で解を得ることができています。今後は、さらにケーシングを考慮した音響解析手法の導入や、シロッコファンなどへの応用などの取り組みを行っています。

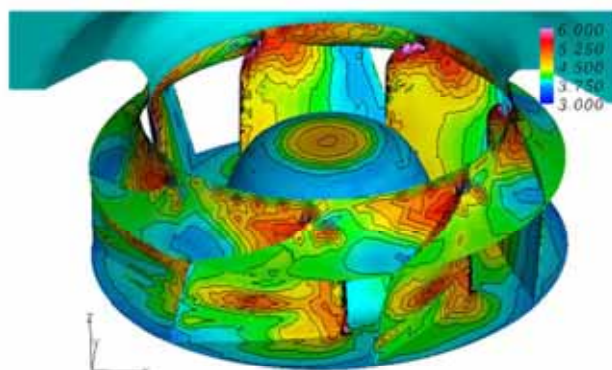


図 1



# 【自動車・運輸】自動車用圧縮水素容器の急速充填シミュレーション [A/FFred]

## 1. 使用ソフトウェア

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red

## 2. 背景

次世代自動車用燃料として水素が注目されており、燃料電池車、水素燃料自動車等の開発が鋭意進められています。これらの自動車の普及にあたっては、水素の供給が課題になっており、水素ステーションの整備とともに、車載容器への水素の急速充填が課題となっています \*1)。

\*1) 木枝，田村，三石，渡辺，"自動車用圧縮水素容器の急速充填シミュレーション"，自動車研究，vol.30-no.6，pp.287-290（2008）

アドバンスソフト株式会社では、財団法人 日本自動車研究所のご協力のもとにアドバンス版 流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red (AFFr) を用いて「自動車用圧縮水素容器の急速充填」に関する非定常数値シミュレーションを行いました（図1）。

本シミュレーションでは、容器外壁の複数固体間の伝熱を考慮し、実在気体モデルを用いて急速充填時（図2）における容器内の流れ場、温度場の非定常特性を明らかにしました。

容器内の代表点における温度について実験値と比較した結果、本シミュレーションは比較的良好に実験値を再現していることが明らかにされ（図3）、圧縮水素容器の急速充填に関する本ソフトウェアと計算方法の実用性が確認されました。本ソフトウェアおよび計算方法は、水素容器への急速充填に関する最適な利用方法の検討に対して有用なツールになるものです。

## 3. 解析条件

表1

CFD コード	Advance/FrontFlow/red ver. 4.0
乱流モデル	LES, 標準 Smagorinsky モデル
数値スキーム 「計算事例」	2次中心差分（数値安定のため5%の1次風上差分付加）
計算条件	流入質量流量: $8.3 \times 10^{-3} (\text{kg/s})$ , 格子数 約 12.7 万要素（6面体）, $dt=1.0 \times 10^{-3}$ 実在気体の状態方程式： Soave-Redlich-Kwong

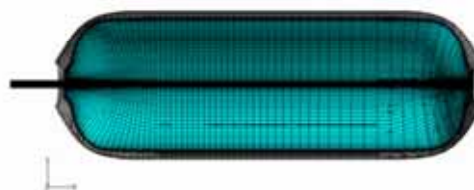


図1 容器モデル形状

## 4. 解析結果

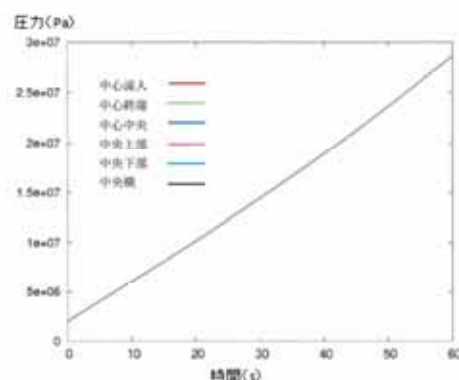


図2 圧力の時間発展（実在気体）

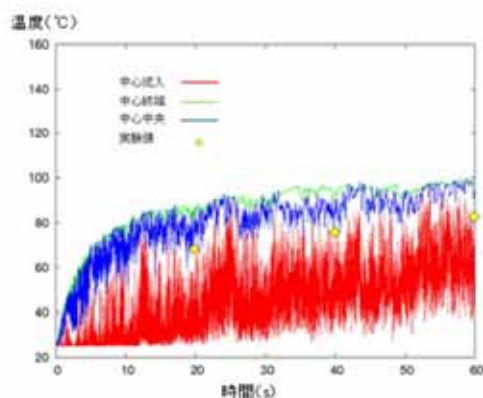


図3 温度の時間発展（実在気体）  
（実験値：中心中央値）

## 5. 謝辞

本事例は、独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の「水素社会構築共通基盤整備事業」の一環として財団法人 日本自動車研究所（JARI）より受託した解析結果の一部です。

アドバンスソフト株式会社は、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「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プロジェクト」並びに「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プロジェクト」に参加し、ソフトウェア FrontFlow/red の開発を担当しました。その成果を独自に改良して商用パッケージソフトウェア AFFr とし、販売保守を行っています。



## 【自動車・運輸、産業機械】ボルトプリテンション解析 [A/FSTR]

## 1. 解析対象

ボルトの締め付けを考慮した静荷重解析を、ボルトのモデリング方法および解析手順と共に紹介します。(参考文献<sup>1)</sup>)

## 2. 使用ソフトウェア

構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR

## 3. 解析モデル

はじめにボルトの締め付け力を模擬する解析を実施し、締め付け後の変形および応力状態を解析します。続いて締付の変形応力状態を模擬したモデルを作成し、外荷重による解析を実施します。

## 3.1. 解析手順

- (1) 荷重ステップ 1: ボルト締め付け力による初期応力状態を解析
- (2) 締付状態を模擬するモデル作成
- (3) 荷重ステップ 2: プリテンションが負荷された状態で外部荷重による変形・応力解析を実施

2 枚の板材をボルトで結合したモデルを考えます。ボルトとナットは一体構造のメッシュとしますが、締め付けを模擬するためにボルト軸部で分割し、ボルトヘッド側とナット側で別のモデルとします。ボルトヘッド・ナットと板材の間には接触条件を定義します。

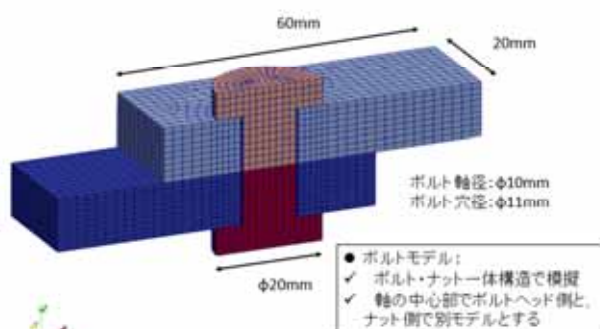


図 1 解析モデル

## 3.2. 材料特性

項目	値
ヤング率	206 [GPa]
ポアソン比	0.29

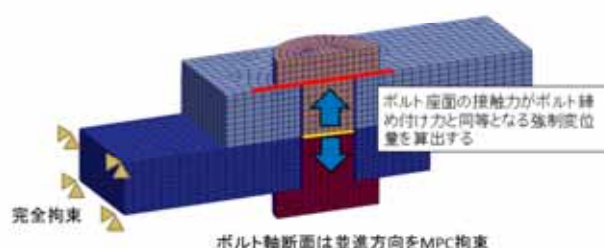
## 4. 解析結果

## 4.1. 荷重ステップ

## 4.1.1. ボルトプリテンション

ボルトの軸断面に強制変位を負荷して生じた接触力の合計値がボルト締付荷重と一致する強制変位量を算出します。

- ・ボルト締付荷重：1500 [N]
- ・締め付け荷重と同等の強制変位量の算出結果：0.0038[mm]

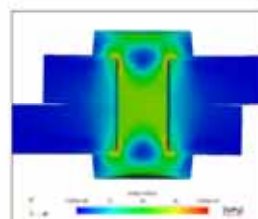


荷重ステップ 1 解析条件図

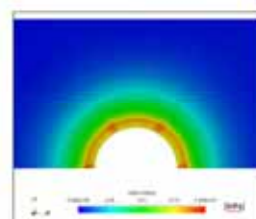
<sup>1</sup> Jeong Kim, Joo-Cheol Yoon, Beom-Soo Kang. 「Finite element analysis and modeling of structure with bolted joints」

ボルトプリテンション荷重による変形および応力分布図を示します。ボルトの締め付け力が模擬されている事が確認できます。

変形図とVonMises等価応力分布



座面の応力分布



荷重ステップ 1 解析結果図

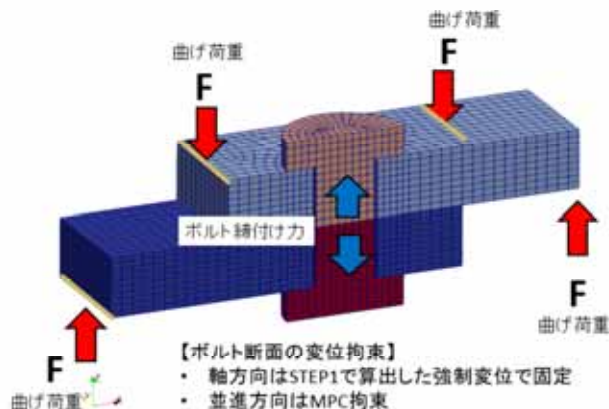
## 4.2. 荷重ステップ

### 4.2.1. 曲げ荷重による解析

ボルトの締付荷重を負荷した状態で、板に曲げ荷重を加えます。

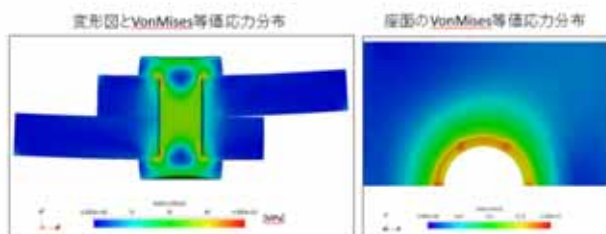
を変形後に修正

- ・ボルト軸部の切断面は MPC 拘束を付加する
- ・荷重ステップ 1 のひずみ値を、荷重ステップ 2 の初期ひずみとして与える



荷重ステップ 2 解析条件図

板に曲げ荷重を負荷した際の変形図および応力分布を示します。座面の応力分布は参考文献 1 の Fig.8(a)に示された Solid bolt model の応力分布にも近似し、ボルトの締付荷重が考慮された曲げ解析が実施されている事が確認できます。



荷重ステップ 2 解析結果図

### 4.3. ボルト締め付けを模擬したモデルについて

今回の解析では、荷重ステップ 2 でもボルト軸部の締付荷重をボルト軸部の強制変位で模擬して解析を行いました。この方法は荷重ステップ 2 で生じるボルト部の変形が大きい場合には、実現象との乖離が大きくなる可能性があります。今回ご紹介した方法以外に、締付状態を模擬するモデルを以下のような手順で作成する方法も考えられます。

- ・荷重ステップ 1 の変位量からメッシュの座標値



## 【自動車・運輸】マフラーの性能解析 (内部問題) [A/FNoise]

## 1. 使用ソフトウェア

音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise

## 2. 概要

透過損失は、サイレンサー等の消音性能を検討するために欠かせない量です。単純拡張管モデルを用いて、管内に流れのない場合と流れのある場合について、透過損失を計算しました。高周波数領域の性能評価では、30 m/s 程度の流れが存在する場合には、流れ場の影響を考慮することが重要となるケースがあることが分かりました。

## 3. 計算結果

単純拡張管内に流れの無いケースについて、数値実験により得られた透過損失、1次元解析解による透過損失、実機を用いた実験結果より得られた透過損失を図1に示します。点曲線が数値実験結果、曲線が1次元理論値、振動している曲線が実機を用いた実験結果を示しています。横軸は周波数 [Hz]、縦軸は透過損失 [dB] です。透過損失は、値が大きい程その周波数における消音性能が高いことを示します。

図1では、1000 Hz 辺りまで、数値実験、1次元理論値、実機実験は概ね一致していますが、それ以上の周波数ではずれが大きくなっています。理由は、実機実験においては周波数が高くなるにつれて正確な測定が困難となってくること、1次元理論値においては周波数が高くなる程音波の波面が平面では表せなくなるといったことが考えられます。

次に、単純拡張管内に空気の流れがある場合についての透過損失と、流れが無い場合の透過損失の比較を行います。流れがある場合は、最初に単純拡張管内の速度場を流体計算により求め、その速度場を音響解析に取り込み、数値実験を行いました。流体計算により得られた単純拡張管内の速度場を図2に示します。入力速度を 30 m/s として定常状態になるまで計算しています。図2では、単純拡張管内に複雑な流れが発生していること

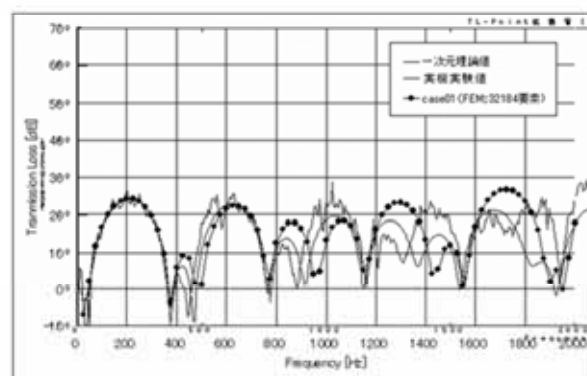


図1

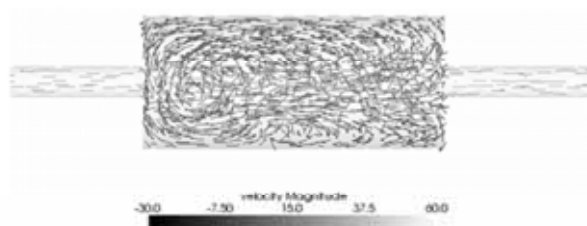


図2

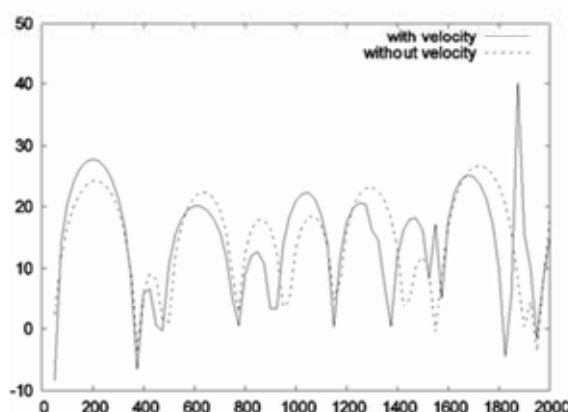


図3

が良く分かります。また細管軸付近ほど流れが速くなる構造があることが分かります。

この流れを取り込み、数値実験を行い得られた結果と、流れ無しの場合の結果を比較したものを図3に示します。実線は速度場ありの結果、破線は速度場なしの結果を示しています。速度場があると透過損失値が高くなり、高周波数領域ほど、消音性能の上がる周波数が異なることが分かります。高周波数領域の性能評価では、30 m/s 程度の流れが存在する場合には、流れ場の影響を考慮することが重要となるケースがあることが分かりました。

## 【自動車・運輸、建築/土木】移動ポーラスモデルを使った トンネル突入時の圧力波解析[A/FNet/Γ]

### 4. 解析モデル

#### 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/  
Γ

#### 2. 解析モデルと条件

図1に示すように4kmのトンネルがあり、その両端に緩衝工のある流路を計算対象とします。西側から図1に示した形状分布の列車が500km/hでトンネルに突入し、減速しながら東側から退出します。Advance/FrontNet/Γのポーラスモデルでは、物体の移動が扱えるようにしています。そこでポーラスモデルを使って列車の突入退出時の圧力波の計算を行いました。計算条件の不明なところは推定して計算を実施しました。

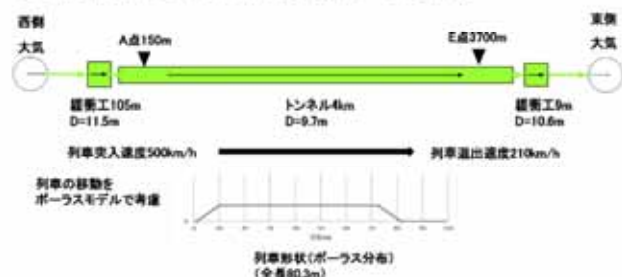


図1 解析モデルと解析条件

#### 3. 解析結果

解析結果を図2に示します。縦軸は圧力を大気圧  $P_0$  で割った値を示しています。測定値は文献1のデータを目視で読み取ったものです。点AとEの位置の圧力値は、測定値と計算値では傾向がよく一致していることが分かります。

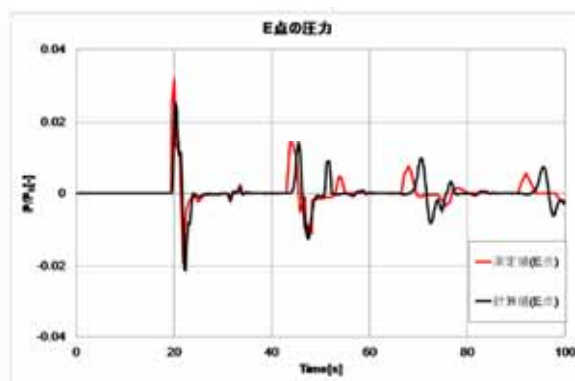
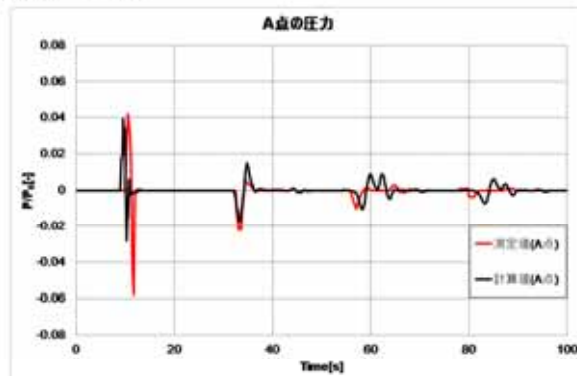


図2 計算結果(圧力の時系列変化)

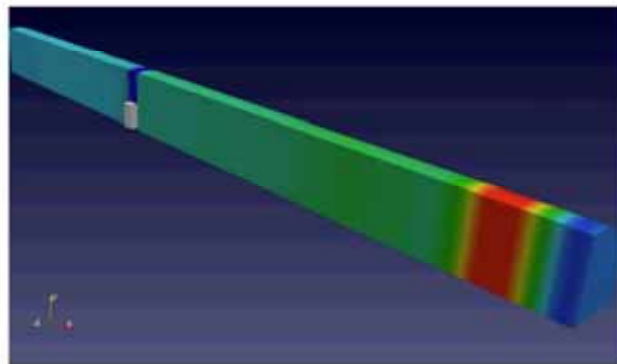


図3 計算結果

### 5. 参考

文献1:山崎ら「超高速鉄道トンネル内に生じる圧力変動評価」、土木学会論文集 No. 788/i-64、171-189、2003.7

文献2:斎藤実俊「高速鉄道におけるトンネル内圧力変動と微気圧波に関する研究」、大阪大学大学院 博士論文 2015

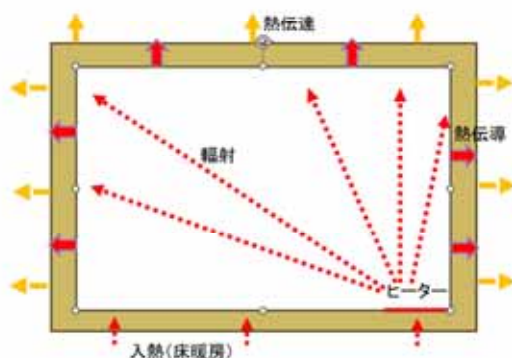


## 【自動車・運輸、産業機械】汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP\_PrePostを用いたFrontSTR熱伝導解析[A/REVOCAP]

### 1. 使用ソフトウェア

汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP

### 2. 熱解析モデルの概要



### 3. 解析条件

1. 熱伝達(外壁)熱伝達係数: $4.5[W/(m^2 \cdot K)]$ 、  
雰囲気温度: $0[^\circ C]$
2. 熱流束(室内の床上面)床面に対して分布  
熱流束: $62.5[W/m^2]$
3. 輻射 ヒーターから内壁に熱を放射します。  
放射率:1.0 とします。

#### 3.1. 熱伝導の設定

固体の熱伝導解析を行う方法

1. 解析の種類で「熱解析」を選択します。
2. 定常 (STEADY) または非定常 (TRANSIENT)  
を選びます。
3. 初期時間増分、計算時間を与えます。



#### 3.2. 熱解析用材料物性値の設定

熱解析用物性値の設定を行う方法

材料物性値を選択 材料モデルで「熱解析」を選択  
比熱、熱伝導率、質量密度の値を設定します。



#### 3.3. 材料物性値の割り当て設定

物性値をソリッドに割り当てる方法

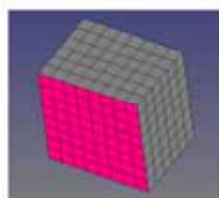
1. 計算格子の中の割り当てる領域 (セクション)  
を選択します。
2. 「材料物性値の選択」の材料名に割り当てる  
物性値を設定します。



#### 3.4. 熱流束の設定

熱流束境界条件の設定を行う方法

1. 3D 画面で熱流束を与える面を選択します。
2. 境界条件のDFLUX(分布熱流束)を選択します。
3. 熱流束値を与えます。



### 3.5. 熱伝達の設定

熱伝達境界条件の設定を行う方法

1. 3D 画面で熱伝達境界条件を与える面を選択します。
  2. 境界条件の FILM（熱伝達）を選択します。
- 熱伝達係数、雰囲気温度を与えます。



### 3.6. 輻射の設定

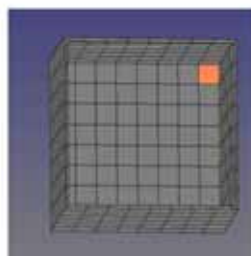
輻射境界条件をでは、放射率、形態係数、雰囲気温度を与えます。放射率は0以上1以下の無次元量、形態係数は0以上1以下の無次元量になります。FrontSTR の解析制御ファイルに与える値は放射率、形態係数から PrePost が自動的に計算して与えます。

形態係数を明示的に数値で与えることもできますが、メッシュの形状から自動的に計算することもできます。



形態係数を自動的に計算する場合

1. 3D 画面で熱源となる面グループを選択します。
2. 自動計算を選択して、熱源ボタンを押します。
3. 3D 画面の熱源の面グループの色が変わります。
4. 輻射を受ける面を選択します。



輻射境界条件の追加ボタンを押すと、形態係数を自動的に計算します。

### 3.7. 初期条件

初期条件ですべての節点に 15℃ を与える設定を行います。

1. 初期条件を選択します。
2. 全節点のチェックを有効にします。
3. 温度 15℃を与えます。



### 3.8. 絶対零度の設定

輻射の計算は絶対温度で行われるので、絶対零度の値を設定します。

1. 物理定数の設定画面を選択します。
2. 絶対零度の値を設定します。(セ氏で入力する場合は -273.15)





### 3.9. ステップ解析

熱解析で「熱解析ステップ」を追加し、上記で作成した境界条件をそのステップで有効にします。

BOTTOM 底面の熱流束  
 TOP\_OUT 上面の熱伝達  
 SIDE\_OUT 側面の熱伝達  
 TOP\_IN 上面の輻射  
 SIDE\_IN 側面の輻射



### 3.10. 解析モデルの出力

ファイルメニューからモデル保存を選択して、解析モデルを出力します。

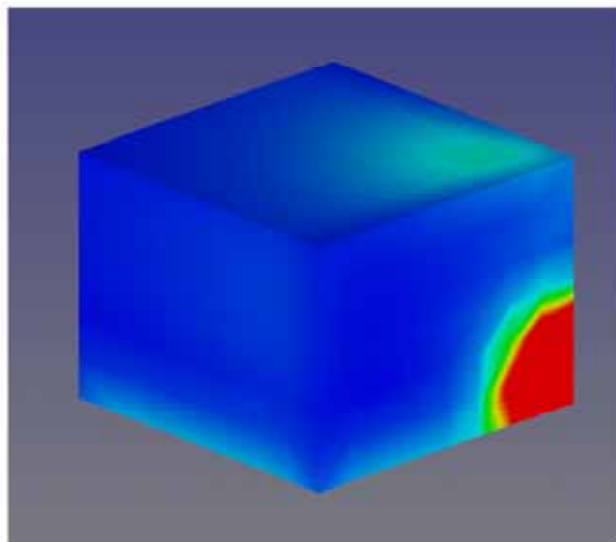


### 3.11. 解析の実行

Advance/FrontSTR を使って解析を実行します。

## 4. 解析結果の表示

1. ファイルメニューから結果読み込みを選択して、計算結果ファイルを読み込みます。
2. カラーコンターを選択します。
3. 物理量の名前を「TEMPERATURE」を選択して、最大最小値を設定します。



上記のように温度分布を可視化することができます。

## 【自動車・運輸、建築土木】FrontNoiseによるマフラーの解析の手順 [A/REVOCAP]

### 1. 使用ソフトウェア

汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP

### 2. 四面体メッシュの作成

形状データ (IGES、STEP、STL) を取り込んで、自動メッシュ生成機能を使って四面体要素を作成します。

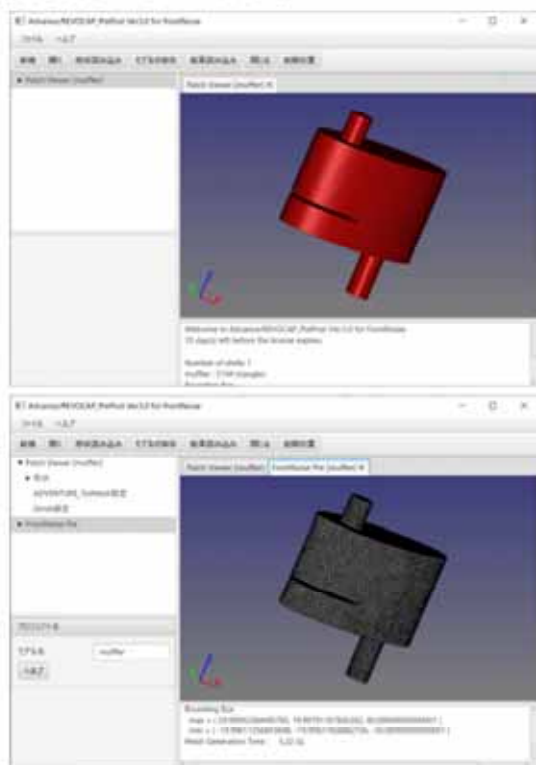
形状データを作成する機能はありませんので、CAD ソフトなどを使って作成してください。

2 から 3 分程度で 100 万要素のメッシュを生成することができます。

すでに FEM 計算用の以下の形式のメッシュがある場合はそれを読み込むことができます。

- ・ FrontNoise 形式
- ・ Nastran Bulk Data Format
- ・ ADVENTURE\_TetMesh

ここでは STEP 形式のマフラー形状からメッシュを作成することにします。



### 3. 材料物性値の設定

#### 3.1. 音響媒体物性値（周波数特性）

媒体について以下の物性値を与えます。空気と水の標準的な物性値はあらかじめ設定済みです。

- ・ 音速
- ・ 密度

今回のマフラーの解析では空気とします。

#### 3.2. 構造物物性値（構造音響強連成）

以下の弾性体の物性値を与えることができます。

- ・ ヤング率
- ・ ポアソン比



今回のマフラーの解析では使用しません。

### 4. 境界条件の設定

メッシュの境界面に音響解析のための境界条件を設定します。以下の中から選択します。

- ・ 音圧
- ・ 変位
- ・ 速度
- ・ 加速度
- ・ インピーダンス
- ・ 完全吸収 ( $\rho c$ )
- ・ 無限要素 (球の中心と半径を与える)

なにも設定しない場合 (デフォルトの条件) は完全反射になります。支配方程式における係数  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $f$  の値で与えることもできます。

今回のマフラーの解析では入り口を音圧境界、出口を完全吸収境界とします。

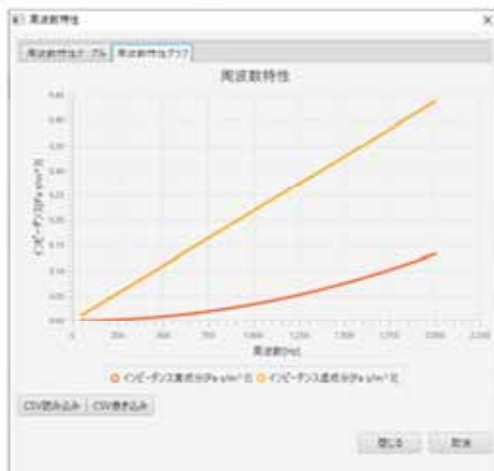




## 5. 周波数特性の編集

境界条件で周波数ごとに設定する場合は、CSV ファイルから与えることもできます。テーブルで数値、もしくはグラフで確認します。

周波数[Hz]	インピーダンス	インピーダンス
50.0	6.216-5	0.0193
75.0	1.895-4	0.0194
100.0	2.35-4	0.0118
125.0	5.168-4	0.0273
150.0	7.416-4	0.0327
175.0	0.00101	0.0382
200.0	0.00132	0.0436
225.0	0.00167	0.0491
250.0	0.00206	0.0545
275.0	0.0025	0.06
300.0	0.00297	0.0654
325.0	0.00349	0.0709
350.0	0.00404	0.0763
375.0	0.00464	0.0818
400.0	0.00529	0.0872
425.0	0.00596	0.0927



今回のマフラーの解析では周波数特性は与えずに計算することにします。

## 6. 音源

### 6.1. 点音源

点音源は座標で与えると、最も近い節点の番号を検索します。音源の周波数特性を編集します。



今回のマフラーの解析では面音源を境界条件として与えるので点音源の設定は不要です。

### 6.2. 二重極音源、四重極音源

流体音響連成解析の場合は二重極音源、四重極音源を別途連成解析ツールで作成することができます。この場合は GUI で設定する必要はありません。今回のマフラーの解析では使用しません。

## 7. 媒体の設定

### 7.1. 速度

以下の設定が可能です。

- ・速度なし
- ・一定速度
- ・速度場

今回のマフラーの解析では速度なしとします。

### 7.2. 温度

標準温度との比の分布を与えます。

今回のマフラーの解析では使用しません。

### 7.3. 多孔質

以下のパラメータを与えることができます。

- ・複素音速
- ・実行密度

今回のマフラーの解析では使用しません。



## 8. 線形ソルバの設定

### 8.1. 解法

有限要素法の方程式を解くための反復法の設定をします。小さいモデルでは直接法、大規模並列計算を行う場合は反復法を選択します。

- ・反復法
- ・直接法

反復法を選択した場合は、以下の必要なパラメータもあわせて設定します。

- ・前処理
- ・最大反復回数
- ・収束判定値
- ・GMRES リスタート数



今回の解析では反復法 GMRES と Schwarz 前処理

を使用します。

## 9. 解析範囲の設定

### 9.1. 周波数範囲

解析を行う周波数範囲を与えます。

- ・開始周波数
- ・終了周波数
- ・周波数間隔、オクターブバンド

今回の解析では 100Hz から 1000Hz まで、25Hz 刻みで計算することになります。



### 9.2. 後処理用の出力

結果を特定の点で評価したい場合の座標を入力します。



## 10. Advance/FrontNoise の実行

Advance/REVOCAP\_PrcPost から解析モデルを保存します。

(必要に応じて) 計算サーバに転送します。  
計算を実行します。

```
$ mpirun -n 16 fnfem < muffler.dat
```

共有の計算機環境の場合は、スケジューラにジョブを投入します。

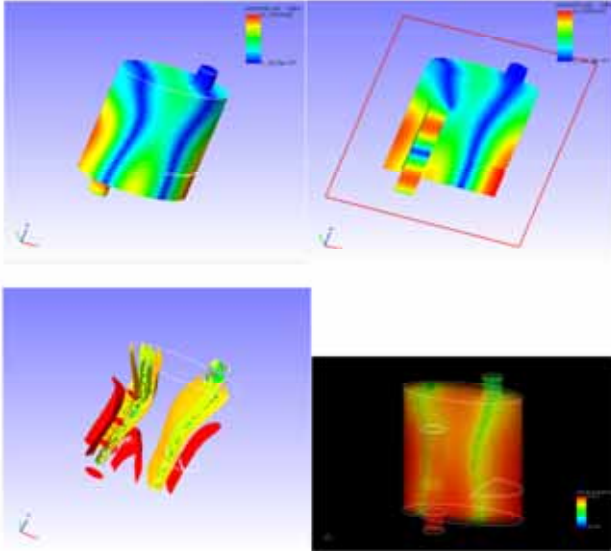
計算結果から可視化用のファイルを作成します。



```
$ rsl2inp muffler <result> <result_inp>
```

## 11. Advance/REVOCAP\_PrePost による結果の可視化

可視化用に作成したファイルを Advance/REVOCAP\_PrePost で読み込みます。



音圧などの分布や、等値面、ボリュームレンダリングなどを行うことができます。

## 【自動車・運輸】4気筒エンジンモデルの評価 [Advance/JIANT]

## 1. 解析対象

4気筒エンジンモデル

## 2. 使用ソフトウェア

品質工学ツール Advance/JIANT

## 3. 背景

Advance/JIANT を用いて、MBD 推進センターから公開されている 4 気筒エンジンモデルの評価を行いました。評価するパラメータは、以下の 4 つです。

平均トルク：出力トルクの計測時間中の平均値

平均 IMEP：4 気筒すべての計測期間中の図示平均有効圧力

平均 PMEP：4 気筒すべての計測期間中のポンプ損失平均有効圧

平均 NMEP：4 気筒すべての計測期間中の正味図示平均有効圧力

このように分けることで、設計パラメータの運用要因による応答を確認し、ロバストな設計範囲を求めることができます。

## 4.3. 入力パラメータ

## 4.3.1. 製品パラメータの一覧と水準設定

製品パラメータは、11 パラメータを選び L27(3<sup>11</sup>)直行表に割り振りしました。

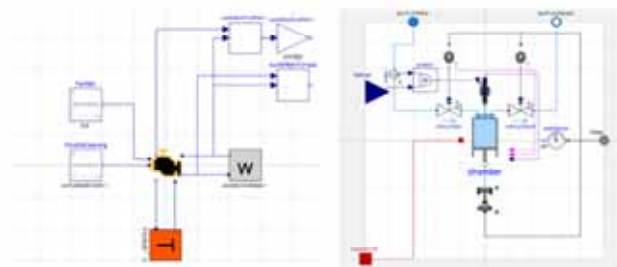
## 4.3.2. 運用パラメータの一覧と水準設定

L27 と L18 の直行表の総当たりの組み合わせ計算を行うので、486 ケースの計算を実行することになります。実際に使用しているパラメータは 3 水準のものが 18、2 水準のものが 1 つなので、総当たりした場合約 8 億通りの組み合わせになります。このように、直行表を使用することで各水準の頻出度を平等にしつつ、試行回数を 1/160 万と大幅に圧縮することができました。

## 4. 解析モデル

## 4.1. 対象モデル概要

MBD 推進センター JAMBE では、下記に示す 4 気筒エンジンモデルを公開されています。本モデルを利用して 4 つの量の評価を行いました。



## 4.2. 設計基準

JIANT を使った解析では、シミュレーションの条件を決める入力パラメータと、計算結果から求める評価対象の出力パラメータをそれぞれ複数設定できます。また、入力パラメータのうち設計者がコントロール可能なパラメータを設計直行表、環境や運用方法などコントロールできないパラメータを運用直行表に振り分けます。

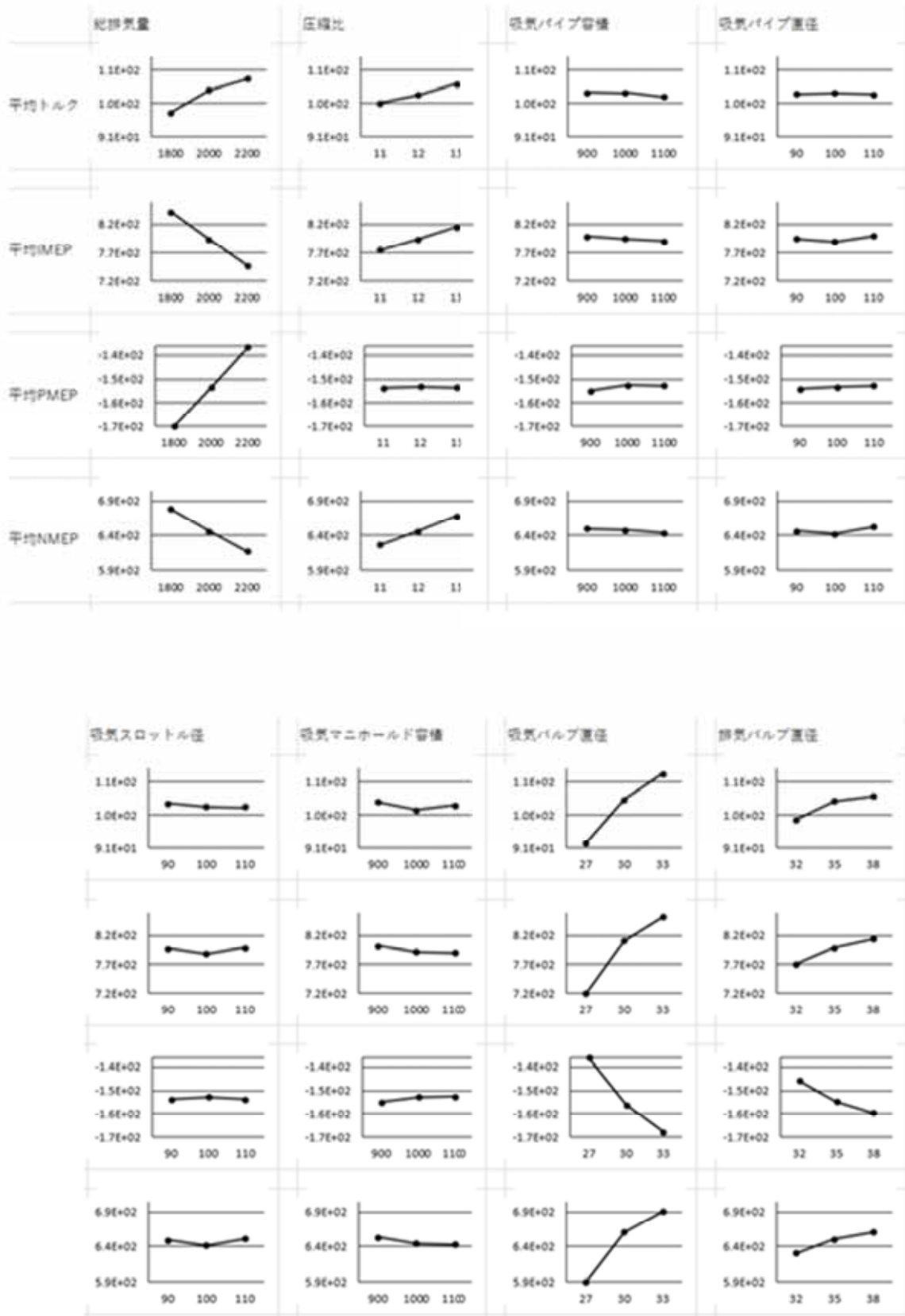
## 4.4. 評価パラメータ

評価パラメータについては、OpenModelica の計算結果として直接出力されるものではないので、計算結果のファイルから自動で積分計算を行う python スクリプトを作成しています。

## 5. 評価結果

JIANT を動かすことで、各入力パラメータに対する各出力パラメータについての応答（要因効果図）を図のように得ることができました。これにより、目的とする出力パラメータを得るためには入力パラメータをどの程度の範囲の値に絞り込めばよいかを推定することができます。





## 【材料・化学】第一原理計算による電子状態・結晶性質の解析 [A/PHASE]

## 1. 解析対象

結晶・ナノ材料

## 2. 使用ソフトウェア

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

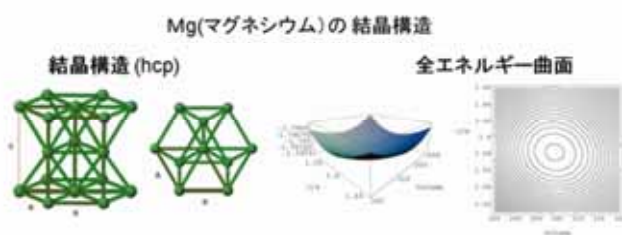
## 3. 背景

結晶・ナノ材料の電子状態密度・バンド構造や格子定数、凝縮エネルギー、体積弾性率などの基本的な物理量などは、Advance/PHASE を利用することによって簡単に得ることができます。以下にいくつかの結晶の計算例を、実験値とともにご紹介します。

## 4. 解析モデルと解析結果

## 4.1. 金属の例：マグネシウム(Mg)結晶

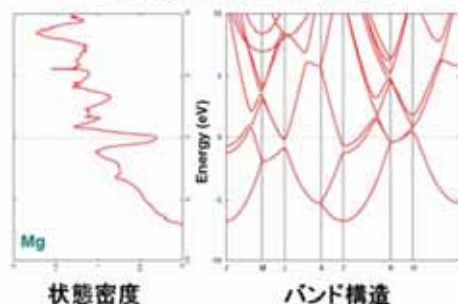
六方最密充填構造 (hcp)をとるマグネシウム(Mg)結晶の計算事例をご紹介します。全エネルギー曲面計算より結晶構造の格子定数を求めました。さらに、凝集エネルギーEと体積弾性率Bを計算し、状態密度とバンド構造を解析しました。Advance/PHASE による計算値は、シリコン(Si)結晶の同様、実験値と大変よく一致しています。



格子定数 (a, c), 凝集エネルギー (E), 体積弾性率 (B)

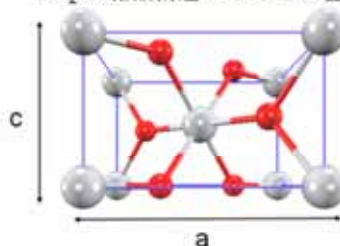
	PHASE	実測値	誤差 (%)
a (Å)	3.205	3.21	-0.1
c (Å)	5.068	5.21	-2.7
c/a	1.581	1.62	-2.4
E (eV/atom)	1.449	1.51	-0.4
B (GPa)	38.48	35.4	8.7

Mgの状態密度とバンド構造

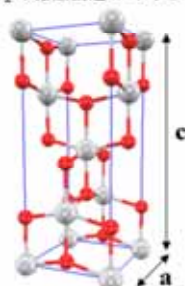
4.2. 触媒の例：酸化チタン TiO<sub>2</sub>

光触媒として注目されている酸化チタン(TiO<sub>2</sub>)は、温度・圧力など状態の違いにより、異なった結晶構造をとることが知られています。ここでは、酸化チタン(TiO<sub>2</sub>)の異なった2つの結晶構造：(I)ルチール型(正方晶高温型)と(II)アナターゼ型(正方晶低温型)の例をご紹介します。

Advance/PHASE で構造最適化計算を行うと、酸化チタン TiO<sub>2</sub> のどちらのタイプの結晶においても、格子定数の計算値と実験値は大変よく一致した結果が得られました。Advance/PHASE の第一原理計算は、異なった結晶構造を取りうる物質材料においても、その構造を高精度に予測することができます。

TiO<sub>2</sub>の結晶構造Ⅰ：ルチール型

格子定数	PHASE	実験値	誤差(%)
a (Å)	4.562	4.593	-0.7
c/a	0.640	0.644	-0.6

TiO<sub>2</sub>の結晶構造Ⅱ：アナターゼ型

格子定数	PHASE	実験値	誤差(%)
a (Å)	3.756	3.784	-0.7
c/a	2.510	2.512	-0.2

## 【材料・化学】第一原理計算によるSTM像のシミュレーション [A/PHASE]

## 1. 解析対象

結晶表面

## 2. 使用ソフトウェア

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

## 3. 背景

STM (Scanning Tunneling Microscope : 走査型トンネル顕微鏡)で得られる画像は、物質の表面から滲み出した電子の波動関数を可視化したものであり、必ずしも表面の凹凸を再現するものではありません。従って、STM 像の正確な理解のためには、対象物の電子状態を知ることが不可欠です。可視化の対象となる電子のエネルギーは、探針に印加するバイアス電圧により決定されます。

## 4. 解析モデルと解析結果

第一原理バンド計算ソフトウェア Advance/PHASE を利用すると、電荷密度（波動関数の絶対値の二乗）を求めることができます。あるエネルギー範囲に含まれる電子の電荷密度（部分電荷密度と呼びます）を得ることが可能ですので、これを表面近傍で可視化することにより、STM 像をシミュレートすることができます。

また、電流は電子状態密度に比例しているため、部分電荷密度から等値面を解析して、その等値面の  $z$  座標を描画すれば、定電流モードの STM 像が得られます。

例として Si(100) p(2×2)表面の STM 像のシミュレーション結果を下図に示します。

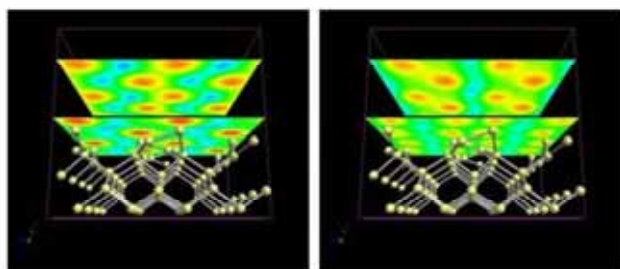


図1 Si(100) p(2×2)表面の STM 像のシミュレーション結果

左が占有状態、右が非占有状態であり、表面からそれぞれ 1 Å、5 Å 離れた面での像を示しています。バイアス電圧の符号を反転させると、明るく見える位置が変化することが分かります。

また、Si(100) p(2x1)表面の定電流モードでの STM 像を下図に示します。

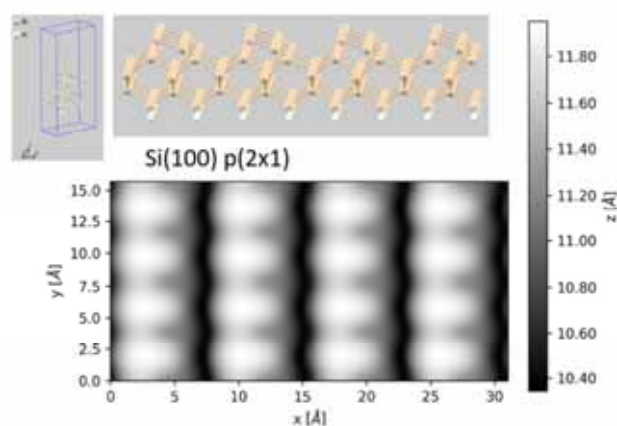


図2 Si(100) p(2x1)表面の定電流モードでの STM 像



## 【材料・化学】第一原理計算によるXPSスペクトルのシミュレーション [A/PHASE]

### 1. 解析対象

結晶表面

### 2. 使用ソフトウェア

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

### 3. 背景

XPS (X-ray Photoelectron Spectroscopy : X 線光電子分光) は、X 線を物質に照射し、放出される光電子のエネルギーを測定することにより、物質表面の元素の種類およびその電子状態を知るための強力な実験手段です。

測定結果を精度良く解釈するためには、内核電子まで含めた物質の電子状態を知ることが重要です。

### 4. 解析モデル

第一原理バンド計算ソフトウェア Advance/PHASE は擬ポテンシャル法を採用していますので、内核電子の状態を知ることはできません。しかしながら、Advance/PHASE に「内核の電子を除去した擬ポテンシャル」を用いると、原子の XPS エネルギーを計算 [1]することができます。

Advance/PHASE による Si(001)表面の XPS の解析事例を紹介します。図は Si(001)表面スラブモデルを示しています。表面再構成が起こり、バックリングしたダイマーが  $p(2 \times 2)$  構造を形成しています。X線を Si 結晶（表面）に照射すると、 $2p$  軌道の電子が光電子として飛び出し、XPS スペクトルが観測されます。

「 $2p$  軌道の電子を除去した Si の擬ポテンシャル」を用いて Advance/PHASE で計算した結果と実験値を表に示します。最表面の Si 原子に注目すると、真空側に飛び出た原子（ $1u$ ）とバルク側に沈み込んでいる原子（ $1d$ ）があり、XPS エネルギーが大きく異なることが期待されます。Advance/PHASE で計算した値は実験値とよく一致しています。

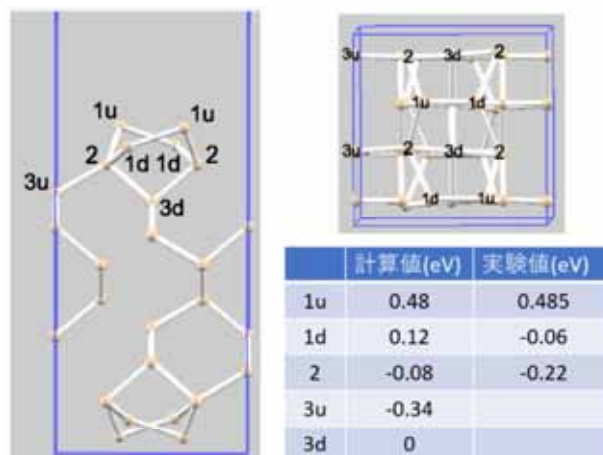


図1 Si(001)表面構造、および Advance/PHASE による XPS エネルギーの計算値と実測値 [2]  
(3d 位置の Si 原子をエネルギー基準)

### 5. 参考文献

- [1] “Evidence for site-sensitive screening of core holes at the Si and Ge (001) surface”, E. Pehlke and M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. 71, 2338 (1993).
- [2] “Core-level spectroscopy of the clean Si(001) surface: Charge transfer within asymmetric dimers of the  $2 \times 1$  and  $c(4 \times 2)$  reconstructions”, E. Landemark, C.J. Karlsson, Y.-C. Chao, and R.I.G. Uhrberg, Phys. Rev. Lett. 69, 1588 (1992).

## 【材料・化学】理論と実験が一致! 合金の偏析効果による仕事関数制御 [A/PHASE]

### 1. 解析対象

合金

### 2. 使用ソフトウェア

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

### 3. 背景

金属の仕事関数は半導体との界面におけるショットキー・バリヤの高さを決定する点において、電子デバイス設計上重要な物理量です。

通常、仕事関数を制御するには、異種金属元素を表面に吸着させますが、異種元素を金属母体に混入した合金を熱処理することによって異種原子を表面に偏析させる方法も考えられます。一見、手の込んだ方法のようですが、熱平衡化でのプロセスであるため、蒸着法に比べ非常に安定な表面修飾層が得られる、という利点があります。

本研究は Cu と Al (9%) からなる合金の (111) 表面に偏析した Al の構造と、その仕事関数への影響を実験、理論両面から明らかにしたものです\*1)。

### 4. 解析モデル

解析条件として、波動関数、電荷のカットオフ・エネルギーは、それぞれ 25、225 リドベリとしています。また、Cu のポテンシャルは超軟擬ポテンシャル、Al のポテンシャルはノルム保存型の擬ポテンシャルを用いています。

図 1 に低速電子線回折 (LEED) の解析から得られた合金の (111) 表面構造を示します。黒丸は表面の Cu 原子、赤丸は表面に偏析した Al 原子です。特徴的な点は、表面 Cu 原子の 1/3 が Al 原子で置換され、しかも、Al 原子が規則的に配置されることです。蒸着によって、このように規則的な Al 1/3 被覆層を作ることはできません。熱平衡化でのプロセスによって初めて可能な構造です。

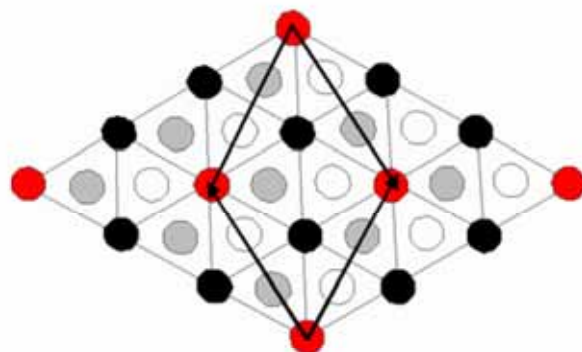
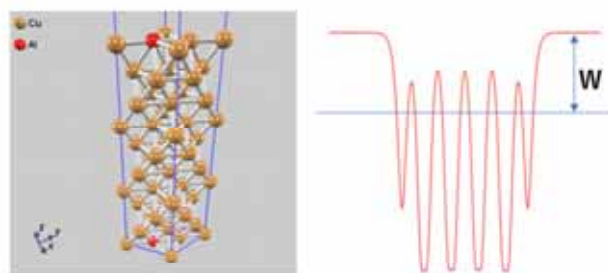


図 1 実験によって得られた表面構造 (赤丸：表面 Al 原子、黒丸：表面 Cu 原子、灰色と白丸は、それぞれ、第 2 層、第 3 層の Cu 原子)



さらに、実験結果の詳細な解析は、Al 原子が表面から 0.13Å 外側に突き出していることを示唆しました。PHASE による計算はこの変位が 0.14Å であることを明らかにしました (図 2 の左)。このように、実験と理論は 0.01Å の精度で一致しました。

仕事関数は、表面の計算を行い、得られた局所ポテンシャルの面内平均の、表面から充分離れた場所での値とフェルミエネルギーの差から求めます (図 2 の右)。周期境界条件では、厚い真空層と大きなカットオフエネルギーを必要としており、計算コストは大きいです。Advance/PHASE では、有効遮蔽体媒質 (ESM)法が実装されており、効率的に仕事関数を求めることが可能です。これは ESM 法で非周期境界条件を適用しているため、ユニットセル内の真空層は少量でよく、Laue 表示にてポテンシャルを取り扱うためカットオフエネルギーは小さくてよいという利点によるものです。

表 1 に仕事関数の実験値と PHASE による計算値を示します。比較のために、Cu (111)、Al (111) の仕事関数も記載しています。また、計算値には Al が 1/3 被覆率で表面にアドアトム吸着した場合の仕事関数も含んでいます。

表 1 異なる表面の仕事関数：単位 (eV)

	実験値	計算値
Cu(111)	5.04	4.75 (94.3)
Al(111)	4.24 *2)	3.83 (90.3)
Cu-9Al(111)置換偏析	4.39	4.45 (101.3)
Cu-9Al(111)アドアトム吸着	—	4.15
( )内は実験値に対する計算値の比 (%)を示しています。		

## 5. 解析結果

Cu (111)、Al (111) の仕事関数の計算値は 0.3 ~ 0.4 eV 過小評価されていますが、仕事関数の大きさが Cu (111) > Cu-9Al (111) 置換偏析 > Al (111) の順であることを再現しています。さらに Cu-9Al (111) アドアトム吸着表面の計算値は置換偏析表面より ~ 0.3 eV 小さく、実験に用いられた試料表面が置換偏析型か、アドアトム吸着型かの区別が可能であることを示唆しています。このように、実験的、理論的手法を併用した仕事関数の解析は、表面構造とその仕事関数への影響を明らかにする上で、強力な手段であることが分かりました。

### 参考文献

\*1) M. Yoshitake, I. Karas, J. Houfek, S. Madeswaran, W. Song, and V. Matolin, J. Vac. Sci. Technol. A 28, 152 (2010).

\*2) J. Holzl and F. K. Schulte, Solid Surface Physics, Springer Tracts in Modern Physics 85 (Springer, Berlin, 1979).



## 【材料・化学】分子性結晶の第一原理シミュレーションの高速化 [A/PHASE]

### 1. 解析対象

分子性結晶（有機半導体・有機伝導体・クラスター結晶）

### 2. 使用ソフトウェア

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

### 3. 背景

分子性結晶では、分子内の力が強く、分子間の力が弱いです。結晶系を対象にする第一原理計算ソフトにとって、通常の計算手順では分子性結晶の計算が難しいであることが知られています。第一原理シミュレーション手法による分子性結晶の構造探索を効率的に行うためには、計算上の工夫が必要です。

Advance/PHASE には、所定の方法で指定された原子の組を剛体とみなし、そのトルクと重心に働く力を利用して緩和計算/分子動力学シミュレーションを行う機能があります。この機能を活用することによって、通常の緩和計算の場合時間のかかる、分子性結晶の緩和や表面への分子の吸着計算などを高速に行うことが可能となります。

### 4. 解析モデルと解析結果

Advance/PHASE の GUI では、分子性結晶に対して各原子の分子属性の自動判定が可能です。この機能を用いて各原子がどの分子に属するかを自動的に判別します。そして、原子の「剛体への割り当て」を行い、剛体のシミュレーションを実施します。

図 1 は、分子性結晶である白燐の構造最適化を実施した例を示しています。このような時間スケールの異なる、分子内と分子間モードが混在する系の場合、計算の途中で剛体ダイナミクスを活用することによって総計算時間を大幅に短縮することが可能です。

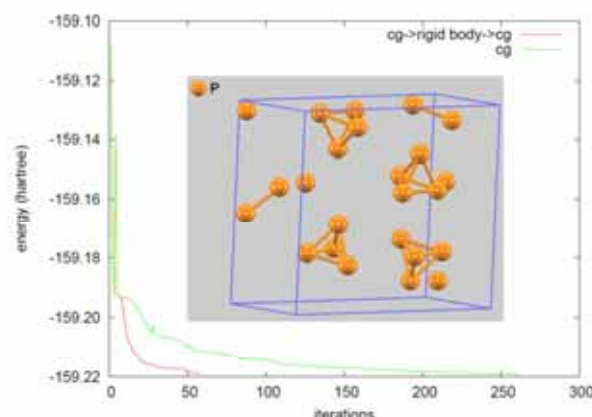


図 1 白燐の構造最適化におけるエネルギーの履歴。赤線：途中で剛体ダイナミクスを利用した場合、緑線：最初から最後までCG法を利用した場合

有機伝導体への応用事例として、(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> の計算結果を紹介します。安定構造を求めた後にバンド計算を行いフェルミ面より上の部分領域に対応する電荷密度を求めると、図 2 で示したように、結晶の縦軸方向に電荷密度が上がり、横軸方向にはつながっていない電荷密度が得られました。これは、軸方向は伝導的、横軸方向は非伝導的であることを示しており、実際の物性を正しく再現しています。

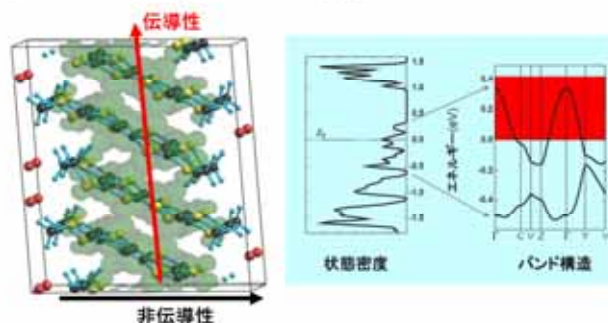


図 2 (BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> の電荷密度分布、状態密度、およびバンド構造

## 【材料・化学】強磁性半導体 $\text{Ga}_{30}\text{V}_2\text{N}_{32}$ の第一原理解析 [A/PHASE]

### 1. 解析対象

磁性材料

スピン分極密度とエネルギーの計算結果を示しています。

### 2. 使用ソフトウェア

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

### 3. 解析モデルと解析結果

図1は、 $\text{Ga}_{30}\text{V}_2\text{N}_{32}$  の構造モデルを示しています。Wurtzite 構造を持つ GaN のスーパーセルに2個のV原子（磁性原子）を導入しています。

そして、さまざまなスピン配置で第一原理計算を行い、得られたスピン状態の中に強磁性の  $\text{Ga}_{30}\text{V}_2\text{N}_{32}$  がエネルギー的に一番安定であることが分かります。図2は、強磁性と反強磁性での

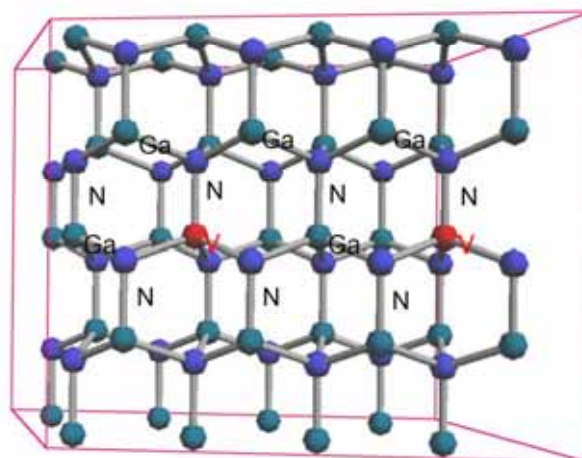
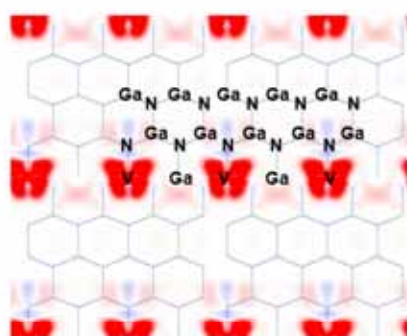
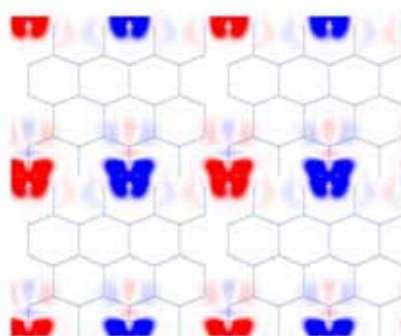


図1  $\text{Ga}_{30}\text{V}_2\text{N}_{32}$ (wurtzite)の結晶構造

スピン分極密度:  $n_{\uparrow}(r) - n_{\downarrow}(r)$



強磁性



スピングラス: 反強磁性

$$E_T = -2793.416836 \text{ (Ha/cell)}$$

$$\Delta E = -3.1 \text{ meV}$$

$$-2793.416606 \text{ (Ha/cell)}$$

図2  $\text{Ga}_{30}\text{V}_2\text{N}_{32}$  (wurtzite)のスピン分極密度とエネルギーの計算結果



## 【材料・化学】酸化物のボルン有効電荷・格子誘電率の計算 [A/PHASE]

## 1. 解析対象

酸化物などの絶縁体

## 2. 使用ソフトウェア

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

## 3. 背景

高誘電率材料の探索指針として、絶縁体であり、格子誘電率が大、ボルン有効電荷が大、基準振動数が小、などの特徴を持つ物質が有望な高誘電体です。Advance/PHASE では、これらの指標を評価する機能が実装されています。

## 4. 解析モデルと解析結果

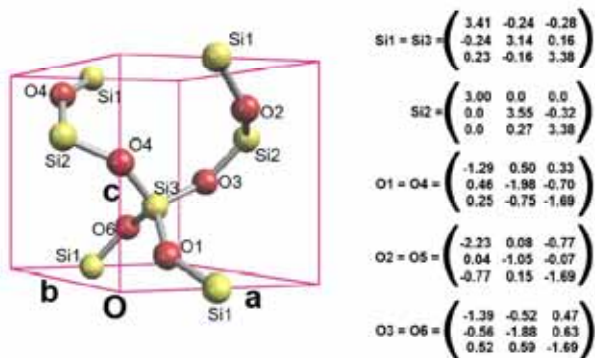
4.1. 非金属酸化物の例： $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>

図1  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>の結晶構造とボルン有効電荷

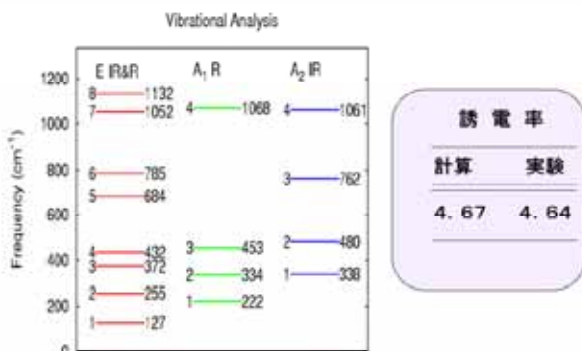


図2  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>の振動解析と格子誘電率の計算結果

図1は、 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>の結晶構造と各原子のボルン有効電荷の計算結果を示しています。格子分極は有効電荷と原子変位の積で決まるので、ボルン有効電荷の計算結果から、有限の格子分極が生じることが期待されます。

図2は、 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>の振動解析と格子誘電率の計算結果を示しています。各基準振動モードの振動数、および格子誘電率の計算値は実験値と一致しています。

4.2. 金属酸化物の例：CeO<sub>2</sub>

セリウム酸化物 CeO<sub>2</sub> は高誘電率材料として知られています。電子材料の誘電率を評価する際には、電子系および格子系両方からの寄与が重要です。Advance/PHASE の誘電率計算は、下記のように電子系と格子系からの寄与をそれぞれ独立に求めることができます。

分極率  $\mathbf{P} = \frac{f_e}{V} \sum_i \frac{\mathbf{a}_i}{2\pi} \phi_i \rightarrow \mathbf{Z}_{\alpha\beta}^* = \frac{V}{e} \frac{\partial P_{\alpha}}{\partial u_{\beta}}$

モード有効電荷  $\tilde{Z}_{IR} = 1.12 \times M_0^{-1/2}$

ダイナミカル・マトリックス  $\Phi_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 F}{\partial u_{\alpha} \partial u_{\beta}}$

振動数  $\omega_{IR} = 305 \text{ cm}^{-1}$   
赤外活性振動モード

計算結果:

$$\begin{aligned} Z^*(\text{Ce}) &= 5.712 \\ Z^*(\text{O}) &= -2.856 \\ \epsilon^{\infty} &= \epsilon^{\text{calc}}(0) = 7.5 \\ \epsilon^{\text{lat}} &= \frac{4\pi}{V} \frac{\tilde{Z}_{IR}^2}{\omega_{IR}^2} = 16.8 \\ \epsilon^0 &= \epsilon^{\infty} + \epsilon^{\text{lat}} = 24.3 \end{aligned}$$

計算結果より、セリウム酸化物 CeO<sub>2</sub> の誘電率は格子系の寄与が非常に大きいことが明らかとなり、実験値とも非常によく一致しています(図3)。また、CeO<sub>2</sub> とほかのセリウム酸化物 c-Ce<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, h-Ce<sub>2</sub>O<sub>3</sub> の比較でも、CeO<sub>2</sub> のほうは誘電率が高いことが分かります。

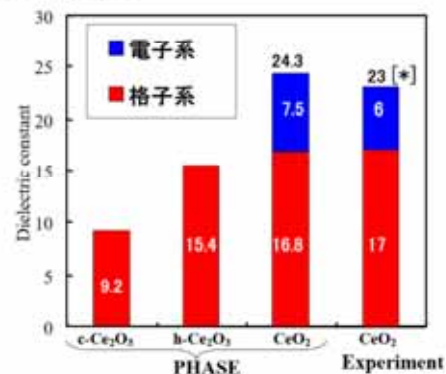


図3 セリウム酸化物の誘電率の計算結果

[\*] N. I. Santha et al., J. Am. Ceram. Soc. 87, 1233 (2004).



## 【材料・化学】炭素材料やMgOのEELS/XAFSの第一原理計算[A/PHASE]

## 1. 解析対象

単体・化合物

## 2. 使用ソフトウェア

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

## 3. 背景

Advance/PHASE に、EELS（電子エネルギー損失分光法）もしくは XAFS（X 線吸収微細構造解析）のスペクトルを計算する機能が実装されています。この機能により、実験結果とシミュレーションの直接的な比較が可能です。

## 4. 解析モデルと解析結果

図 1 は、炭素材料 C60 の C K-edge EELS スペクトルを示しています。計算結果は、他の炭素材料（ダイヤモンドなど）と区別できる特徴的なピークを再現しています。

図 2 は、MgO の Mg K-edge EELS スペクトルを示しています。計算結果から、内殻正孔擬ポテンシャルを使うことにより、実験結果をよく再現しています。

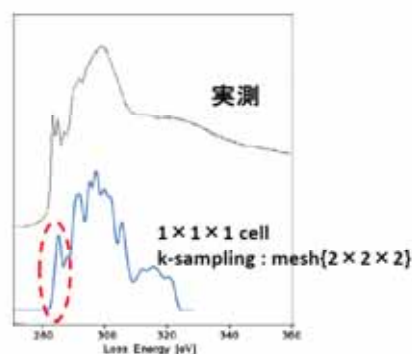
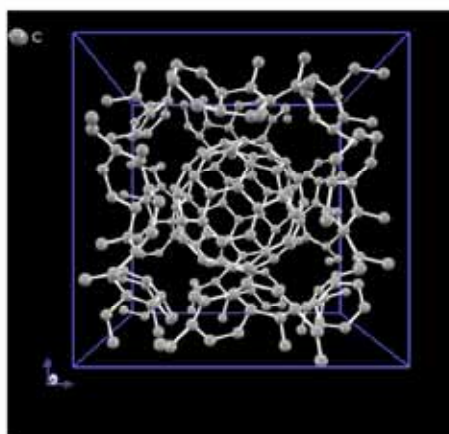


図 1 C60 の C K-edge EELS スペクトル

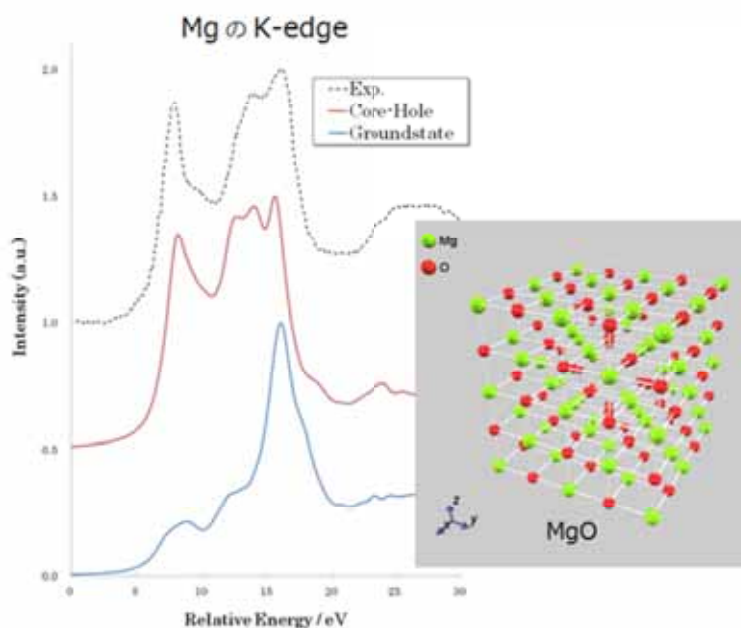


図 2 MgO の Mg K-edge EELS スペクトル

## 【材料・化学】FIRE法によるリチウム拡散経路のNEB計算 [A/PHASE]

## 1. 解析対象

電極材料

例:  $\text{Li}_4\text{C}_{24}\text{-Li}_3\text{C}_{24}$  での Li 原子の拡散過程の NEB 計算

## 2. 使用ソフトウェア

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

従来の quenched MD は 1600~3000 回の繰り返し計算が必要だった結果に対して、FIRE アルゴリズムは 60~100 回程度の繰り返し計算で拡散経路を見つけることができました。

## 3. 背景

Nudged Elastic Band (NEB) 計算では、始状態と終状態の原子配置が既知であるとして、始状態と終状態の間の中間状態の原子配置やエネルギーなどを隣接する状態間がばねによって結ばれているという拘束条件の下で構造最適化計算を行います。これで反応障壁や反応経路が求められます。

NEB 法は複数の状態を同時に計算し、採用できる最適化手法も通常の構造最適化より限られていますので、計算に時間がかかります。

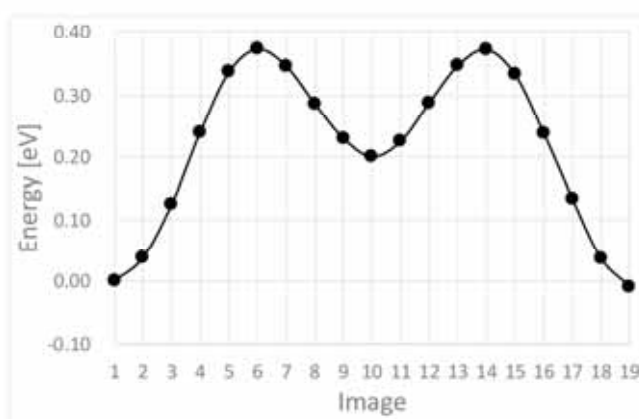


図1 Li 拡散経路におけるエネルギー曲線

## 4. 解析モデルと解析結果

Advance/PHASE では、NEB 計算を高速化するために、FIRE (Fast Inertial Relaxation Engine for Optimization on All Scales) algorithm [1]を導入しています。また、初期反応パスの生成方法に、IDPP solver (Image Dependent Pair Potential for improved interpolation of NEB initial guess)も導入しています。

図1は、Li 拡散経路におけるエネルギー曲線を示しています。中間の local minimum (Image 10)を経由していること（図2）が分かります。

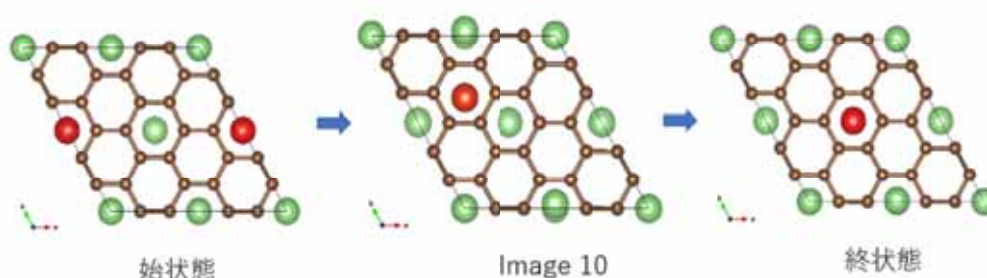


図2 Li の拡散経路

## 参考文献

[1] Erik Bitzek et al, Structural Relaxation Made Simple, Phys. Rev. Lett. **97**, 170201 (2006).

## 【材料・化学】白金(111)表面における一酸化炭素分子の吸着構造の密度汎関数理論による計算 [A/NanoLabo]

### 1. 解析対象

ナノ材料統合 GUI Advance/NanoLabo を用いた、白金(Pt)(111)表面に一酸化炭素(CO)分子を吸着させた構造についての密度汎関数理論(DFT)による解析事例を紹介します。紹介する事例は、モデルの作成からジョブの投入・結果の解析に至る一連のプロセスをすべて Advance/NanoLabo 上で行うことができます。

### 2. 使用ソフトウェア

ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo

### 3. 解析モデルと解析結果

#### 3.1. 白金単結晶の計算

最初のステップとして、白金単結晶のバルク構造の計算を行います。構造最適化の結果、格子定数が  $4.02 \text{ \AA}$  の構造が得られました。実験値が  $3.92 \text{ \AA}$  であり、実験値と計算値の相対誤差は 2.5% となっています。



図1 構造最適化計算のエネルギー変化

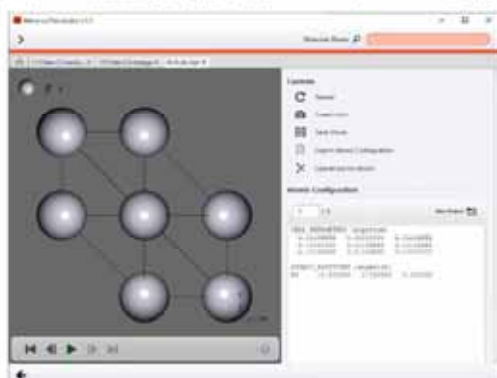


図2 最適化した白金のバルク構造

#### 3.2. Pt(111)表面の計算

最適化を行ったバルク構造から(111)表面が露出するように切り出した 4 層のスラブモデル(Pt(111))を作成します。表面の法線方向に十分な厚さの真空層を設定することで、3 次元の周期境界条件のもとで表面モデルの計算を行うことができます。

本事例では下の2層の原子を固定してスラブモデルの構造最適化を行いました。

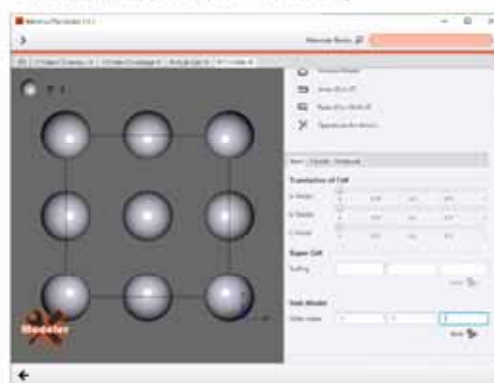


図3 露出させる表面の面指数の設定

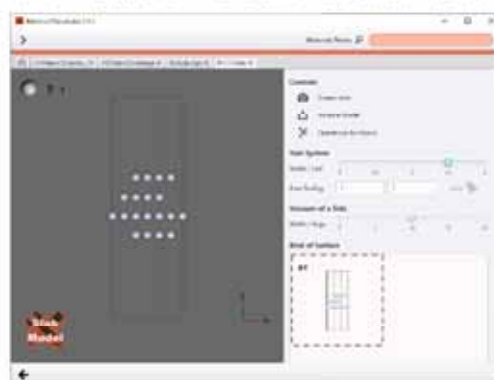


図4 スラブモデル(Pt(111))の作成

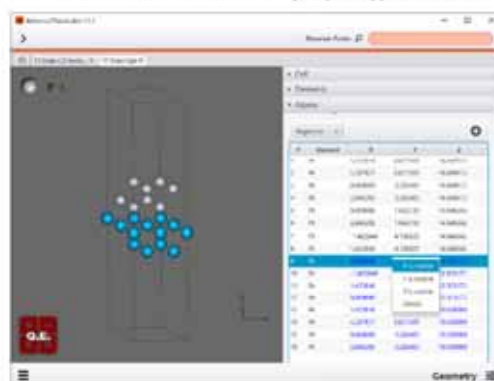


図5 固定する原子の設定画面



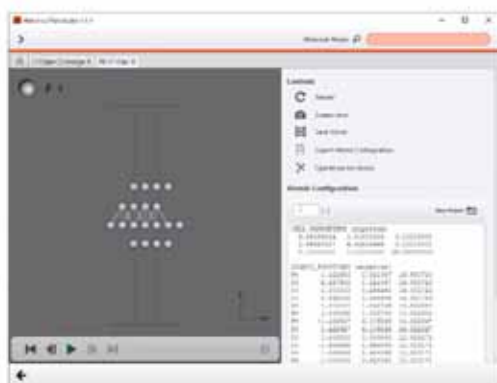


図6 構造最適化後のスラブモデル

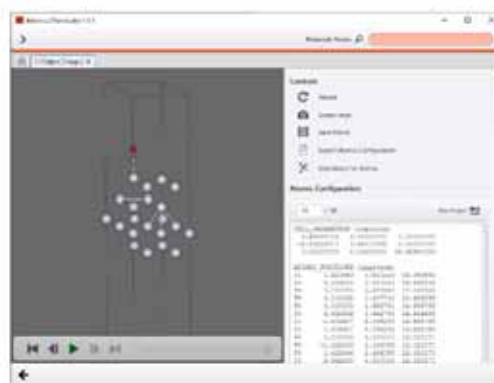


図8 最適化した CO/Pt(111)の構造

### 3.3.3. CO/Pt(111)の計算

Pt(111)のスラブモデルの on-top サイトに CO 分子を吸着させたモデル (Pt/CO(111)) を作成し、構造最適化計算を行いました。また、吸着エネルギーを計算するために、孤立 CO 分子の構造最適化計算も行いました。Pt(111)表面には on-top サイト以外にも複数の吸着サイトが存在しますが、低被覆率では on-top サイトが最も安定な CO 分子の吸着サイトであることが実験的に知られています<sup>4</sup>。

CO/Pt(111)・Pt(111)・CO 分子の各モデルの全エネルギー<sup>2</sup>より、CO の吸着エネルギーは 1.45eV となりました。吸着エネルギーの実験値は 1.39eV<sup>3</sup>であり、計算値と実験値は比較的よい一致を示しています。



図9 孤立 CO 分子のモデル

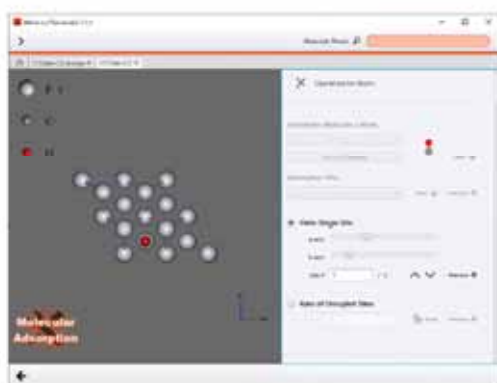


図7 CO/Pt(111)モデルの作成

<sup>1</sup> C. Kittel: "キッテル固体物理学入門 (第 8 版) 上・下", (宇野 良清, 津屋 昇, 新関 駒二郎, 森田 章, 山下 次郎 共訳), 丸善 (2005)

<sup>2</sup> 吸着エネルギー  $E_{\text{ads}} = |E_{\text{CO/Pt(111)}} - (E_{\text{Pt(111)}} + E_{\text{co}})|$

<sup>3</sup> 岩澤 康裕, 中村 潤児, 福井 賢一, 吉信 淳: "ベーシック 表面化学", 化学同人 (2010)

<sup>4</sup> P. J. Feibelman, et al: "The CO/Pt(111) puzzle." *J. Phys. Chem. B* 105.18 (2001) 4018–4025.

## 【材料・化学】NEB法によるAlアドアトムの拡散経路の解析 [A/NanoLabo]

### 1. 解析対象

ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo では Nudged Elastic Band 法 (NEB 法) を用いて化学反応過程や拡散過程の活性化エネルギーを計算することができます<sup>1</sup>。Advance/NanoLabo 上で反応過程の始状態と終状態の構造を指定するだけで、容易に NEB 計算を行うことができます。本事例では、NEB 法を用いて Al(001)表面上における Al アドアトムの拡散過程の解析を行いました。

### 2. 使用ソフトウェア

ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo

### 3. 解析モデル

NEB 法による計算機能は Advance/NanoLabo ver1.2 で新たに実装されました。詳細については、ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo のページをご覧ください。

#### 3.1. NEB 法

NEB 法は始状態と終状態の構造から着目している反応の遷移経路を明らかにする手法です。遷移経路に沿ったエネルギー曲線から反応の活性化エネルギーを求めることができます。例えば表面反応や表面拡散について、最も起こりやすい反応過程を予測したり、実験的に求めた活性化エネルギーと比較したりすることができます。

NEB 法のアルゴリズムは次の通りです。始状態と終状態の構造をつなぐ複数の構造 (イメージ) を作成します。イメージ間に仮想的なバネを設定して、反応座標に沿った方向にバネ力が働くようにします。この仮想的なバネ力をエネルギー勾配に加えて各イメージを繰り返し構造最適化することで、最終的に反応の遷移経路に沿ったイメージが求められます。

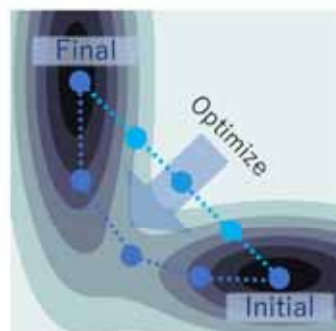


図 1 NEB 法の概念図

#### 3.2. Al(001)表面上での Al アドアトムの表面拡散

Al(001)表面上の Al アドアトムの表面拡散について検討します。

下図のようにアドアトムの拡散経路には 2 通りの経路が考えられます。1 つめは隣接した吸着サイトへと表面上をアドアトムが飛び跳ねる経路 (Hopping) です。最も直感的な拡散経路といえます。2 つめはアドアトムが 1 層目の格子内原子と入れ替わることによる拡散 (Exchange) です。

本事例ではこの 2 通りの拡散経路について NEB 法により活性化エネルギーの計算を行い、どちらの経路で拡散がより起こりやすいか予測します。

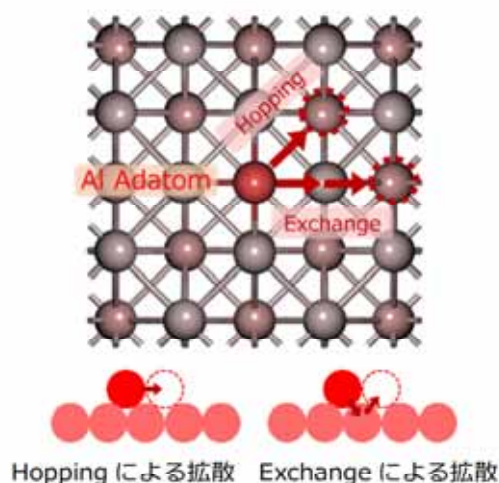


図 2

### 3.3. NEB 計算のセットアップ

Advance/NanoLabo では反応の始状態と終状態の構造を指定するだけで、NEB 計算の設定を行うことができます。始状態と終状態の構造を指定すると、自動的に構造を補間して複数の初期イメージを生成します。自動で生成された各イメージは残像による可視化機能により、一目で確認することができます。

下図は Hopping による拡散過程についての NEB 計算のセットアップ画面を示しています。本事例では 9 個のイメージを用いて NEB 計算<sup>2</sup>を行うように設定をしています。

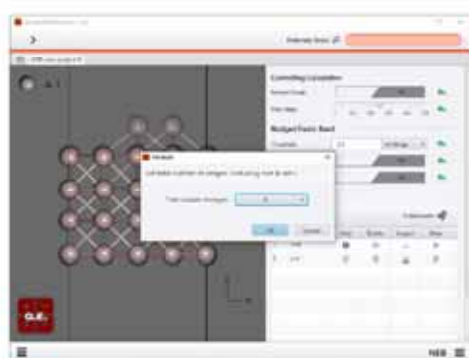


図 3 始状態と終状態の構造の設定

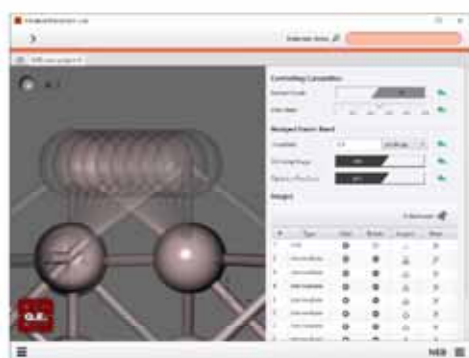


図 4 残像による各イメージの表示

### 3.4. Hopping による拡散過程

Hopping による拡散過程の計算結果を示します。NEB 計算により活性化エネルギーは 0.46eV となりました。



図 5 エネルギー曲線



図 6 各イメージに働く力

### 3.5. Exchange による拡散過程

Exchange による拡散過程の計算結果を示します。NEB 計算により活性化エネルギーは 0.14eV となりました。

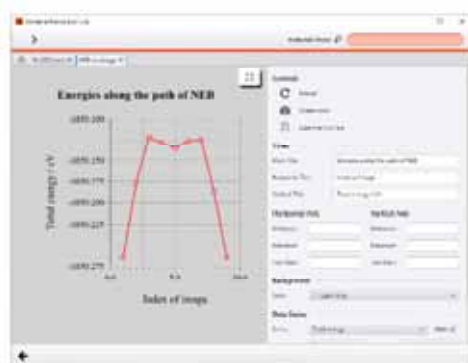


図 7 エネルギー曲線





図 8 各イメージに働く力

## 4. 解析結果

### 4.1. Hopping と Exchange の拡散過程の比較

拡散経路	活性化エネルギー (eV)
 Hopping	0.46
 Exchange	0.14

図 9

NEB 法により Hopping よりも Exchange による拡散過程の方が活性化エネルギーが 0.3eV だけ低いことが明らかになりました。この計算結果は Hopping よりも Exchange による拡散過程の方が起こりやすいことを示唆しています。

最も直感的な Hopping の経路よりも、格子内原子との原子の交換を伴う Exchange の経路の方が起こりやすいというのは、一見不思議に思われるかもしれませんが<sup>3</sup>、この現象は電界イオン顕微鏡 (FIM) による実験でも確認されています。

このような Exchange によるアドアトムの拡散は、Al 表面だけでなく Pt 表面や Ir 表面など、ほかの金属表面でも観察されています<sup>456</sup>。

1 計算ソルバーは Quantum Espresso が対応しています。

2 本事例では NEB 法の改良手法である CI-NEB 法を用いて計算を行っています。

3 拡散過程の中で組み変わる結合の数によって説明が可能です。

4 A. Grob: "Theoretical Surface Science" Springer (2009)

5 村田好正: "表面物理学 (朝倉物理学大系)" 朝倉書店 (2003)

6 P. J. Feibelman: "Diffusion path for an Al adatom on Al(001)" Phys. Rev. Lett. 65 (1990): 729.

## 【材料・化学】分子動力学シミュレーションによるNi単結晶のヤング率の異方性の計算 [A/NanoLabo]

### 1. 概要

ナノ材料統合 GUI Advance/NanoLabo を用いた Ni 単結晶の分子動力学シミュレーション<sup>1</sup>の解析事例について紹介します。本事例では、異なる結晶方位にひずみを加えたときの応力の応答から、剛性の指標として用いられるヤング率の異方性を調べました。

### 2. 使用ソフトウェア

ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo

### 3. 計算モデルの作成

Materials Project より取得した面心立方構造のユニットセル(mp-23)をもとに、(100)面、(110)面、(111)面方向に切り出されたスーパーセルモデルを作成しました(以下ではそれぞれを Ni(100)、Ni(110)、Ni(111)と表記します)。Advance/NanoLabo では、ミラー指数及び各軸方向の繰り返し回数を指定するだけでこのようなモデルを容易に作成することができます。各モデルの原子数、格子定数を表に示します。

表 1

系	原子数	格子定数 a(Å)	格子定数 b(Å)	格子定数 c(Å)
Ni(100)	4000	35.05798000	35.05798000	35.05798000
Ni(110)	3920	34.70562960	34.70562960	35.05798000
Ni(111)	4032	36.43332154	34.70562955	34.34966497

力場には原子挿入法 (Embedded Atom Method; EAM) ポテンシャルを採用しています。EAM ポテンシャルには、引力項・斥力項といった 2 体ポテンシャルのほかに、周辺原子が形成する電子密度の中に原子を埋め込むことで生じる項 (多体項) が含まれます。EAM ポテンシャルは金属結合系の分子動力学計算で主に利用されています。

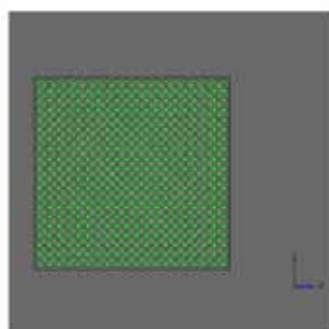


図 1 Ni(100)

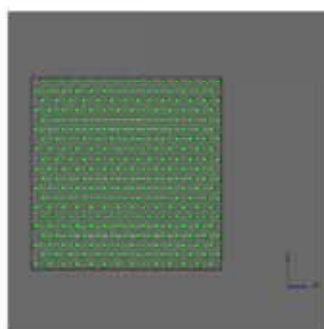


図 2 Ni(110)

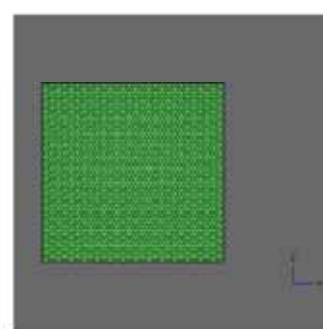


図 3 Ni(111)

#### 4. 計算スキームの設定

統計的アンサンブルには温度と圧力が一定の NPT アンサンブルを採用しています。温度と圧力を一定に保つための手法として、Nose-Hoover の方法を用いています。シミュレーション時間の刻み幅は 1fs としました。

まず、各モデルについて 300K, 1bar の条件下で 20 万ステップ(200ps)のシミュレーションを行い、系を平衡化しました。このとき、セルには等方的な変形のみを許しました。

次に、各モデルについて  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  方向に  $0.001 \text{ \AA/ps}$  のひずみを与えながら、ピリアル応力の計算を 100 万ステップ(1ns)行いました。本シミュレーションでは一軸応力の測定を目的としているため、ひずみを与えている方向と垂直な方向の圧力は 0bar で一定となるように設定を行いました<sup>2</sup>。

Advance/NanoLabo では Option 画面から、任意の方向へのセルの変形を容易に設定することが可能です。また、User's 画面からは任意の物理量の定義、計算及びグラフによる可視化の設定を行うことができます。本シミュレーションでは User's 画面からピリアル応力の計算設定を行いました。

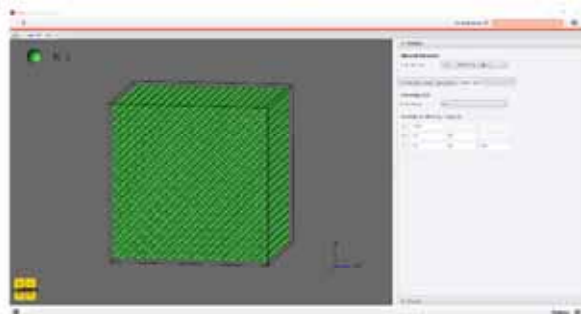


図 4 Option 画面における計算設定

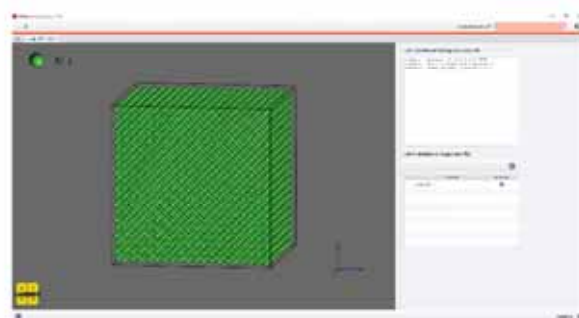


図 5 User's 画面における計算設定

#### 5. 計算結果

Advance/NanoLabo では、計算結果の GUI 上での可視化や、CSV ファイルの出力を容易に行うことができます。ヤング率はひずみと応力の比として定義されるため、ひずみに対する応力の応答を一次関数でフィッティングすることでヤング率を算出しました<sup>4</sup>。その結果得られた、各結晶方位におけるヤング率を表に示します。いずれの結晶方位についても実験値と同程度の値が得られており、結晶方位ごとの大小関係も再現することができています。

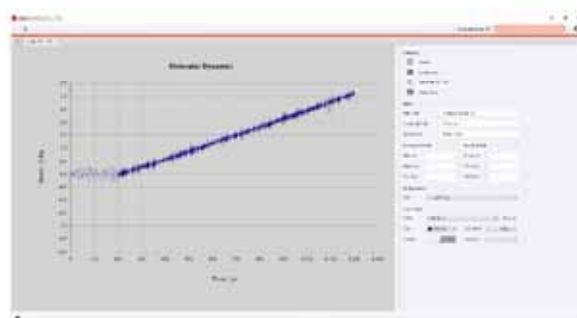


図 6 GUI 上での可視化

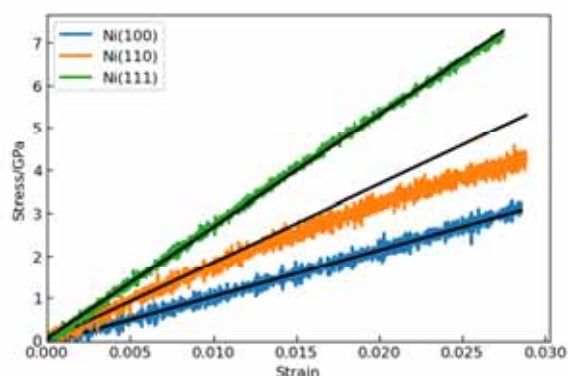


図 7 ヤング率の算出



表 2

系	ヤング率 (GPa)(計算 値)	ヤング率 (GPa)(実験 値) <sup>5</sup>
Ni(100)	110.0	121.3
Ni(110)	184	203.8
Ni(111)	263.5	262.2

1. ソルバーには LAMMPS(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)を用いています。 [e](#)
2. MORTAZAVI, Bohayra; AHZI, Saïd. Thermal conductivity and tensile response of defective graphene: A molecular dynamics study. Carbon, 2013, 63: 460-470. [e](#)
3. [https://docs.lammps.org/fix\\_nh.html](https://docs.lammps.org/fix_nh.html) [e](#)
4. Ni(110)については線形な範囲内のデータのみを用いてフィッティングを行いました。 [e](#)
5. 増本量, et al. ニッケル単結晶のヤング率の結晶異方性と温度変化. 日本金属学会誌, 1968, 32.6: 525-528.

## 【材料・化学】汎用グラフニューラルネットワーク力場M3GNetを用いた $\text{Li}_3\text{OCl}_{1-x}\text{Br}_x$ の室温におけるイオン伝導率の計算 [A/NanoLabo]

### 1. 概要

ナノ材料統合 GUI Advance/NanoLabo では、汎用グラフニューラルネットワーク力場 M3GNet<sup>1</sup>を用いた分子動力学シミュレーション<sup>2</sup>を実行することができます。本事例では、M3GNetを用いた分子動力学シミュレーションを行い、リチウムイオン伝導体  $\text{Li}_3\text{OCl}_{1-x}\text{Br}_x$  の室温におけるイオン伝導率の組成依存性を計算しました。

### 2. 使用ソフトウェア

ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo

### 3. 汎用グラフニューラルネットワーク力場 M3GNet

M3GNet は、Materials Project<sup>3</sup> の膨大な構造緩和データを学習した、<sup>3</sup> 体相互作用を伴う汎用グラフニューラルネットワーク力場です。Materials Project における構造緩和は DFT 計算によって行われています。学習には 62,783 種類の化合物のデータを用いており、エネルギー、力、応力のそれぞれについて 187,687 件、16,875,138 件、1,689,183 件のデータセット(MPF.2021.2.8)を使用しています。

M3GNet を用いることで、物質ごとに力場パラメータの最適化をすることなく、分子動力学計算を

短時間で精度よく実行できることが期待されます。

### 4. リチウムイオン伝導体 $\text{Li}_3\text{OCl}_{1-x}\text{Br}_x$

$\text{Li}_3\text{OCl}_{1-x}\text{Br}_x$  は固体のリチウムイオン伝導体であり、第一原理分子動力学によると  $x=0.25$  の組成<sup>4</sup>で最も高いイオン伝導率( $\sim 4 \times 10^{-2}$  mS/cm (室温))を示すことが報告されています<sup>5</sup>。本事例では、M3GNet を用いた分子動力学計算により、 $\text{Li}_3\text{OCl}_{1-x}\text{Br}_x$  のイオン伝導率が組成によってどのように変化するのかを計算しました。

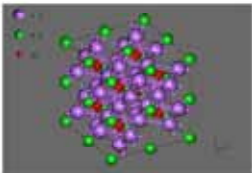
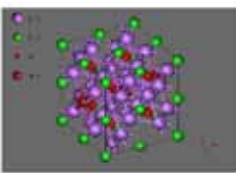
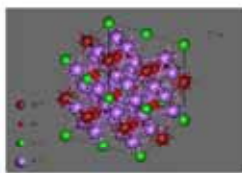
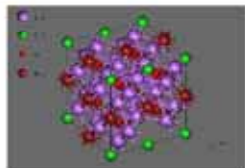
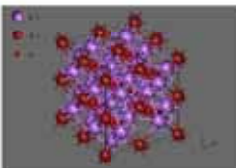
### 5. 計算モデルの作成

まず初めに、Materials Project より取得した  $\text{Li}_3\text{OCl}$  ( $x=0$ ) のユニットセル(mp-985585)の  $2 \times 2 \times 2$  スーパーセルモデルを作成しました。次に、Cl を Br に置換し、 $x=0.25, 0.5, 0.75, 1$  のそれぞれに対応するモデルを作成しました。

$x=0.25, 0.5, 0.75$  のモデルでは、それぞれにおいて系の対称性が最も高くなるように元素の置換を行いました<sup>6</sup>。最後に各モデルから 1 つの Li を取り除き、Li 空孔を導入しました<sup>5</sup>。

Advance/NanoLabo では、GUI によりこのようなモデルを容易に作成することができます。

表 1

		
$\text{Li}_3\text{OCl}$	$\text{Li}_3\text{OCl}_{0.75}\text{Br}_{0.25}$	$\text{Li}_3\text{OCl}_{0.5}\text{Br}_{0.5}$
		
$\text{Li}_3\text{OCl}_{0.25}\text{Br}_{0.75}$	$\text{Li}_3\text{OBr}$	

## 6. 計算スキームの設定

以降のすべてのシミュレーションにおいて、力場には M3GNet を用いて計算を行いました。

まず、各モデルについて、0 bar の条件下でセルに異方的な変形を許して構造最適化を行いました。このとき、時間の刻み幅は 1 fs で計算を行いました。次に、20 K/ps の割合で一定の温度(各組成ごとに 900,1200,1500,1800,2100 K)まで系の温度を昇温し、その後 5000 ステップ(10 ps)の一定温度のシミュレーションを行いました。

最後に、各温度のモデルについて、MSD(Mean Square Displacement)の計算を 150000 ステップ(300 ps)行いました。これらの動力学計算では、統計的アンサンブルに NVT アンサンブルを採用しています。また、シミュレーション時間の刻み幅は 2 fs としました。

Advance/NanoLabo では Diffusion Coefficient スイッチを ON にするだけで各元素の MSD の計算・可視化を行うことができます。

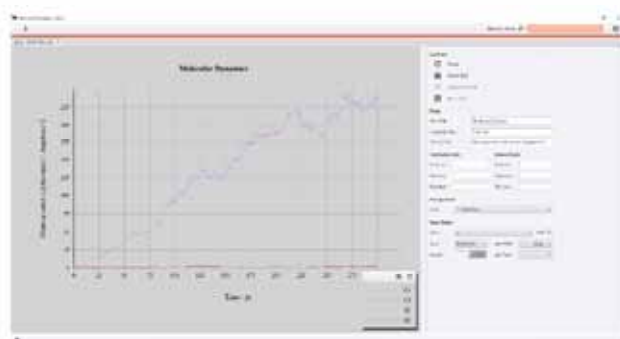


図 1 GUI 上での MSD の可視化

## 7. 計算結果

3 次元系の場合、拡散係数  $D$  と MSD は次の関係にあります。

$$\text{MSD} = 6Dt$$

ここで  $t$  は時間を表します。この関係式を用いて MSD の時間変化のプロットをフィッティングし、その傾きから Li の拡散係数  $D$  を算出しました。各組成・各温度において求められた拡散係数  $D$  のアレニウスプロットを下図に示します。

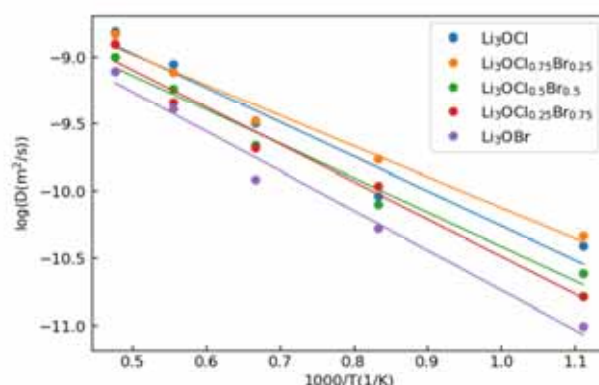


図 2 拡散係数  $D$  のアレニウスプロット

また、イオン伝導率  $\sigma$  は、拡散係数  $D$  と温度  $T$  を用いて次のように表されます。

$$\sigma = \frac{\rho e^2}{kT} D$$

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_a}{kT}\right)$$

ここで、 $\rho$  は Li イオンの数密度、 $e$  は素電荷、 $k$  はボルツマン定数、 $\Delta E_a$  は活性化エネルギーを表します。まず初めに、この関係式を用いてアレニウスプロットをフィッティングし、各組成における活性化エネルギー  $\Delta E_a$  および定数  $D_0$  を算出しました。次に、算出した  $\Delta E_a$  および  $D_0$  を用いて、 $T=300$  K における各組成のイオン伝導率を計算しました。その結果を下図に示します。図からは、先行研究の第一原理分子動力学の結果<sup>5</sup>と同様にして、 $x$  を 0 から増加させると  $x=0.25$  のときにイオン伝導率は最大となり、その後は単調に減少して  $x=1$  で最小となることがわかります。ただし、イオン伝導率の絶対値は第一原理分子動力学の結果に比べて小さく見積られています。この原因としては、高温においては M3GNet の計算精度が下がり、拡散係数を過大評価している可能性などが考えられます。



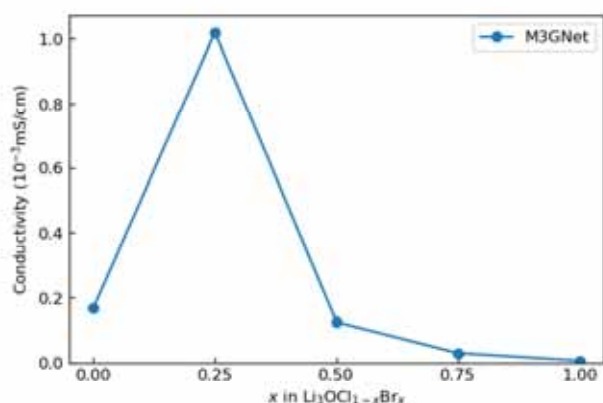


図 3  $\text{Li}_3\text{OCl}_{1-x}\text{Br}_x$  のイオン伝導率の組成依存性

本事例において、一つの組成・一つの温度についてのシミュレーションにかかった時間は並列化をせずに約 2 時間程度であり、第一原理分子動力学に比べて大幅に計算コストが削減されています。それにも関わらず、第一原理分子動力学で得られたイオン伝導率の組成依存性と同様の傾向を示す計算結果を得ることができました。

1. Chen, C., Ong, S.P. A universal graph deep learning interatomic potential for the periodic table. Nat Comput Sci 2, 718–728 (2022). [☞](#)
2. ソルバーには LAMMPS(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)を用いています。 [☞](#)
3. Materials Project は物質材料のオンラインデータベースです。カリフォルニア大学バークレー校の Kristin Persson 准教授らのグループによって運用されています [☞](#)
4. 1 つの LiLi 空孔を導入した  $2 \times 2 \times 2$  スーパーセルモデル( $\text{Li}_{23}\text{O}_8\text{Cl}_{8(1-x)}\text{Br}_{8x}$ )における計算結果 [☞](#)
5. Deng, Z., Radhakrishnan, B., and Ong, S. P., Chemistry of Materials 2015 27 (10), 3749-3755 [☞☞☞](#)
6. Chen, Ronghan, et al., ACS Applied Energy Materials 2021 4 (3), 2107-2114 [☞](#)

## 【材料・化学】汎用ニューラルネットワーク力場による Ti-6Al-4V の体積弾性率の計算 [A/NanoLabo]

### 1. 概要

汎用ニューラルネットワーク力場である M3GNet と CHGNet、および汎用タイトバインディング法である ThreeBodyTB を用いて Ti-6Al-4V の体積弾性率を計算し、その結果を第一原理計算での計算結果と比較しました。さらに、これらの汎用ニューラルネットワーク力場をファインチューニングしたものを用いて同様の計算を行いました<sup>1)</sup>。

が適切な値になるように Ti の一部を Al と V に置換しました。

最後に、作成した 2 つの構造をそれぞれ Quantum ESPRESSO を用いて最適化しました。

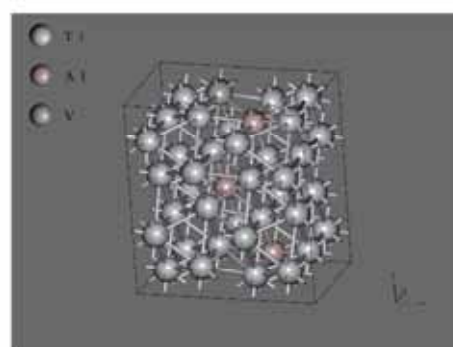


図 1 作成した Ti-6Al-4V (hcp)

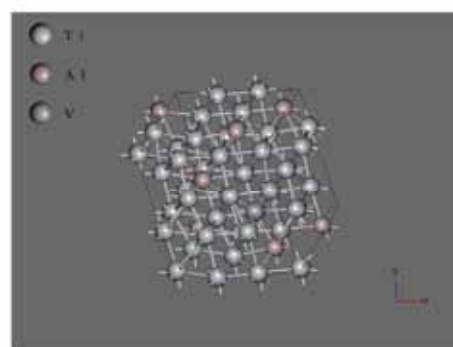


図 2 作成した Ti-6Al-4V (bcc)

### 2. 使用ソフトウェア

ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo

### 3. Ti-6Al-4V について

Ti-6Al-4V は、質量分率で 6% の Al と 4% の V を加えた合金です。hcp と bcc が混在した構造をとります。高い強度と耐食性をもち、かつ加工も容易であることから宇宙航空産業をはじめとした分野で広く用いられています。

### 4. 計算モデルの作成

本解析では hcp と bcc の 2 つの構造の Ti-6Al-4V を作成しました。

hcp については、Materials Project より取得した hcp の Ti の構造ファイル(mp-46)をもとにして作成しました。まず、mp-46 のセル形状を直方晶系に変換し、 $2 \times 2 \times 2$  のスーパーセルモデルを作成しました。次に、それぞれの質量分率が適切な値になるように Ti の一部を Al と V に置換しました。

bcc については、Materials Project より取得した bcc の Ti の構造ファイル(mp-73)をもとにして作成しました。まず、mp-73 のセル形状をプリミティブセルに変換し、 $3 \times 3 \times 3$  のスーパーセルモデルを作成しました。次に、それぞれの質量分率

### 5. 計算方法

体積弾性率  $K$  は以下の式で表されます。

$$K = -V \frac{\partial p}{\partial V}$$

ただし、 $V$  は系の体積で、 $p$  は圧力です。本解析では、この式をもとにして以下のように体積弾性率を計算しました。

1. まず初めに、作成した 2 つの構造の各格子ベクトルの大きさを、2% 小さくした構造と 2% 大きくした構造を作成しました。

- 次に、これらの構造の圧力を Quantum ESPRESSO, M3GNet, CHGNet, ThreeBodyTB のそれぞれを用いて計算しました。
- このようにして得られた体積と圧力の関係と、先ほどの式を用いて体積弾性率を計算しました。

## 6. 計算結果

計算の結果を以下の表に示します。

表 1

	QC (GPa)	M3GNet 計算値 (GPa)	誤差率 (%)	CHGNet 計算値 (GPa)	誤差率 (%)	ThreeBodyTB 計算値 (GPa)	誤差率 (%)	実測値 (GPa)
hcp	110.2	99.8	-9.6	99.8	-18.7	94.0	-17.5	119.7
bcc	109.0	95.1	-12.8	89.9	-17.6	98.2	-13.8	

なお、誤差率は Quantum ESPRESSO での計算結果に対する相対誤差として算出しました。

さらに、計算の精度を向上させるため、自己学習ハイブリッドモンテカルロ法(SLHMC)で作成した教師データをもとに、汎用力場をファインチューニングして計算を行いました。なお、教師データ作成の際の計算条件は hcp と bcc とともに以下の通りです。

- ・訓練の回数は 50 回
- ・1 回の訓練あたりの DFT 計算の回数は 50 回
- ・温度は 1000 K

教師データの数は 4329 個としました。

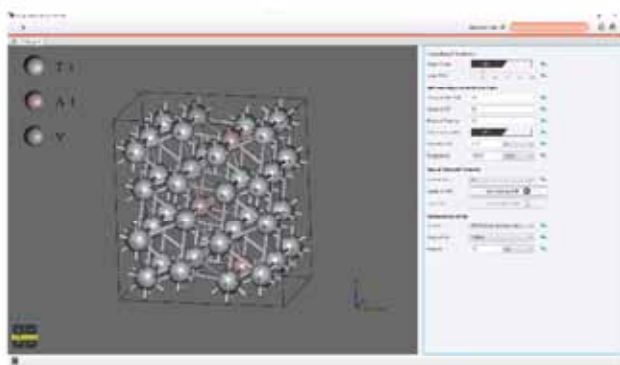


図 3 SLHMC での教師データ作成の際の計算条件



図 4 SLHMC の Result 画面から教師データをエクスポート

ファインチューニングした力場での結果を以下の表に示します。

表 2

	M3GNet (FineTuned)		CHGNet (FineTuned)	
	計算値 (GPa)	誤差率 (%)	計算値 (GPa)	誤差率 (%)
bcc	109.7	0.6	101.3	-7.1

ファインチューニングした汎用力場では bcc に対しては計算精度が向上していることがわかります。



## 【材料・化学】マルチGPU対応の汎用GNN力場SevenNetによる 分子動力学計算ベンチマーク [A/NanoLabo]

### 1. 概要

SevenNet(Scalable EquiVariance Enabled Neural Network)<sup>12</sup>は、グラフニューラルネットワーク(GNN)を使って原子間の相互作用を計算し、様々な組成の系の分子動力学計算を行うことができる汎用の力場です。GNN 力場の中でも、SevenNet は CUDA-aware OpenMPI を使うことで、複数の GPU を使った並列実行による高速化ができることが特長となっています。

SevenNet は LAMMPS に実装する形で公開されていますが、ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo を使うことで、GUI 上の操作で SevenNet を使った計算を行うことができます。

本事例では、硫化物リチウムイオン伝導体  $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$  の大規模系での分子動力学計算を、実際に複数の GPU を使って並列実行し、ベンチマークを行いました。

### 2. 使用ソフトウェア

ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo

### 3. 協力

計算環境は富士通株式会社にご協力いただき、Fujitsu Computing as a Service(CaaS)の「Fujitsu クラウドサービス HPC」を利用して作成しました。

### 4. 計算環境

Materials Project より取得した  $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$  の構造ファイル(mp-696128)をもとにスーパーセルを生成し、21600 原子および 98000 原子の大規模系を用意しました。これらの系に対し、学習済みモデル parallel SevenNet-0 を使って、NVT アンサンブル(500K)・時間刻み幅 0.5fs で 100 ステップの分子動力学計算を実行しました。同じ計算を GPU 使用数 1 から 8 まで変えながら実行し、計算時間を計測しました。GPU あたりの MPI プロセス数は 1、プロセスあたりのスレッド数は 1 としました。

### 5. ベンチマーク結果

各 GPU 使用数での計算時間と、同じ条件で 1 日実行した場合のシミュレーション時間を表で示します。21600 原子系では GPU 使用数 1、98000 原子系では GPU 使用数 4 以下の場合に GPU メモリ不足(OOM)となりました。この程度の規模の系では複数 GPU が必須となるようです。

表 1

	100 ステップの計算時間(s)		1 日実行時のシミュレーション時間(ns/day)	
	21600 原子系	98000 原子系	21600 原子系	98000 原子系
GPU×1	OOM	OOM	OOM	OOM
GPU×2	74	OOM	0.060	OOM
GPU×3	51	OOM	0.088	OOM
GPU×4	40	OOM	0.112	OOM
GPU×5	34	204	0.132	0.022
GPU×6	28	115	0.163	0.039
GPU×7	25	101	0.184	0.044
GPU×8	23	87	0.204	0.052

なお、SevenNet の論文<sup>1</sup>では A100 80GB を 8 枚使用して Si3N4 の計算を行い、10 万原子系でおよそ 0.1ns/day<sup>3</sup> という計算速度を報告しており、それと概ね同程度の計算ができています。

また、GPU 使用数に対する並列効率を見るため、相対計算速度をプロットします。通常は GPU 使用数 1 を基準としますが、今回はそれが使えないため、21600 原子系・GPU 使用数 2 の計算時間の半分を基準とします。98000 原子系についても、計算時間が原子数に比例するとして同じ基準を使います。

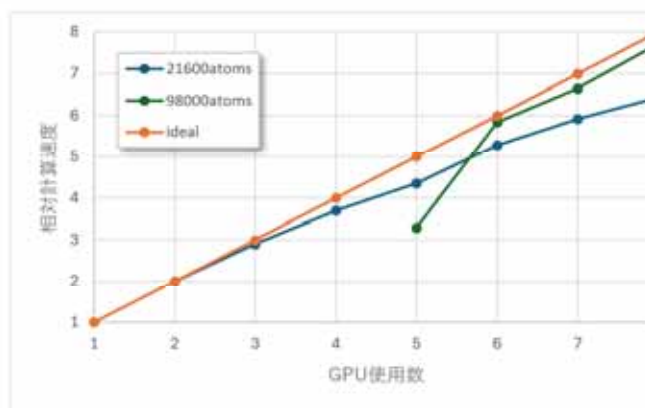


図 1

理想的には相対計算速度は GPU 使用数に比例し、これに近いほど並列効率が良いということになります。21600 原子系では GPU 使用数が多くなるほど並列効率が徐々に下がっていますが、98000 原子系では 6~8 であまり変化しておらず、原子数が多いと複数 GPU の性能を効率的に使えるようです。

また、GPU 使用数 5 の時に計算速度が低くなっています。当初、各 GPU への原子の割り当てに偏りがあるため非効率になっているのではと疑いましたが、確認したところ原子数は等分されていました。おそらくセル分割の形状により、GPU 間の通信量が多くなっているなどの理由によると考えられます。

このように、SevenNet による分子動力学計算を複数の GPU による並列実行で高速化できること

が分かりました。

1. Y. Park, J. Kim, S. Hwang, and S. Han, "Scalable Parallel Algorithm for Graph Neural Network Interatomic Potentials in Molecular Dynamics Simulations". arXiv, arXiv:2402.03789. (2024) (<https://arxiv.org/abs/2402.03789>)
2. S. Batzner, A. Musaelian, L. Sun, M. Geiger, J. P. Mailoa, M. Kornbluth, N. Molinari, T. E. Smidt, and B. Kozinsky, "E (3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials". Nat. Commun., 13, 2453. (2022) (<https://www.nature.com/articles/s41467-022-29939-5>)
3. シミュレーション時間は時間刻み幅に依存するため、そのままの比較はできません。



## 【材料・化学】 $\Delta$ -NNP法によるリチウムイオン伝導体LGPSの伝導率計算 [A/NeuralMD]

### 1. 解析対象

$\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$

### 2. 使用ソフトウェア

ニューラルネットワーク分子動力学システム  
Advance/NeuralMD

### 3. 解析モデル

- $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$  (LGPS)は、室温で 10-2 S/cm 以上の高いイオン伝導率有するリチウムイオン伝導体であり、全固体リチウムイオン電池における固体電解質としての利用が期待されています。
- 正方晶のユニットセルに、四面体構造の  $[\text{GeS}_4]^{4-}$  を 2 つ、 $[\text{PS}_4]^{3-}$  を 4 つ、 $\text{Li}^+$  を 20 個含みます。
- この結晶に対して、当社が独自に開発した新しい Neural Network 力場法である  $\Delta$ -NNP 法を適用して、イオン伝導率を計算します。

#### 3.1. $\Delta$ -NNP 法

- 通常の Neural Network 力場(NNP)法では、系の全エネルギー  $E_{\text{tot}}$  を NNP にて計算されたエネルギー  $E_{\text{NNP}}$  にて表現します：  
 $E_{\text{tot}}=E_{\text{NNP}}$
- 当社では NNP 法を改良した差分 NNP 法( $\Delta$ -NNP 法)を独自に開発し、自社製品である NeuralMD に実装しました。 $\Delta$ -NNP 法では、全エネルギー  $E_{\text{tot}}$  を古典力場にて計算されたエネルギー  $E_C$  と NNP にて計算されたエネルギー  $E_{\text{NNP}}$  の和で表現します：  
 $E_{\text{tot}}=E_C+E_{\text{NNP}}$
- 古典力場としては、Lennard-Jones 様の 2 体ポテンシャルを使用します：

$$E_C = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{A}{r_{ij}^{12}} + \frac{B}{r_{ij}^{10}} + \frac{C}{r_{ij}^8} + \frac{D}{r_{ij}^6}$$

- Neural Network の教師データには DFT で計算されたエネルギー EDFT そのものではなく、DFT と古典力場の差分 EDFT-EC を使用します。
- 無機結晶においては、Lennard-Jones や Buckingham などの 2 体関数にてポテンシャル地形の概ねの構造を表現できることが知られています。当社はこれに着目してポテンシャル地形の第 0 近似として 2 体関数を適用し、2 体関数で表現しきれない余剰の部分を NNP 法で補完するというアプローチを採用しました。その結果、NNP は凹凸の少ない地形のみを表現することになり、Neural Network の真価を十分に発揮することなく結晶系を取り扱うことができます。つまり、結晶系という平時においては、Neural Network は余力を十分に残した状態にあります。逆に、欠陥や不純物、表面や界面、イオンが激しく運動するといった特殊な状況においては、この Neural Network の余力が機能します。
- また、 $\Delta$ -NNP 法の適用により、(1)Neural Network 学習過程の収束性が向上し、且つ、(2)少ない教師データでも有用な力場を作成できるという大きなメリットを得ることに成功しました。

#### 3.2. 初期力場の作成

- まずは、少ない教師データ数で初期力場を作成します。その後、強化学習により教師データ数を増やします。
- 初期力場用の教師データとしては、 $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$  のユニットセル(50 原子系)を使用しました。結晶構造は Materials Project より取得したもの(mp-696128)をそのまま使用しています。原子座標をランダムに 0.1-0.2 Å だけ変位させて多数の構造を生成し、各構造に対して SCF 計算を実施して、その結果を教師



データとしました。

- 教師データに採用した構造は 714 個です。SCF 計算には、Quantum ESPRESSO を使用しており、擬ポテンシャルはウルトラソフト、カットオフエネルギーは 40Ry、k 点サンプリングは  $\Gamma$  点のみです。
- 作成した教師データを用いて、力場を最適化します。まずは 2 体力場を最適化して、その後 Neural Network の学習を行いました。比較のために、2 体力場を使わない通常の HDNNP も作成しました。 $\Delta$ -NNP と HDNNP とともに、 $\text{RMSE}(\text{Energy}) \approx 1.4\text{meV/atom}$ 、 $\text{RMSE}(\text{Force}) \approx 0.08\text{eV/\AA}$  まで収束させました。
- NNP における対称関数には、80 個の Chebyshev 関数を使用しました。カットオフ半径は 6  $\text{\AA}$  です。Neural Network の構造は 2 層 x 40 節で、活性化関数は twisted tanh です。

## 4. 解析結果

### 4.1. 初期力場を使った MD 試計算

- 作成した初期力場を用いて、MD 計算を実施しました。NVT アンサンブルで  $T=800\text{K}$ 、 $\Delta t = 0.5\text{fs}$ 、シミュレーション時間は 100ps です。

#### 4.1.1. $\Delta$ -NNP の計算結果

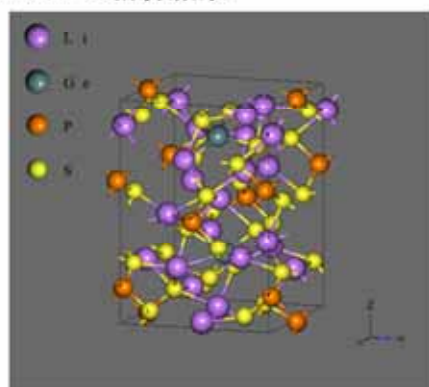


図 1  $t = 100\text{ps}$  での構造

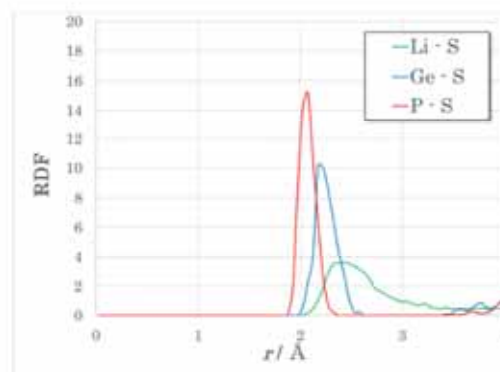


図 2 動径分布関数

- $[\text{GeS}_4]^{4-}$  および  $[\text{PS}_4]^{3-}$  の四面体構造が保持されています。
- 原子をランダムに変位させただけの約 700 個程度の教師データのみで、800K の高温に耐え得る安定性を実現！！
- 少ない教師データで初期力場生成 → 初期力場での MD や MC で構造を追加 → 強化学習の実施 というスキームが容易に実現できます。

### 4.1.2. HDNNP の計算結果

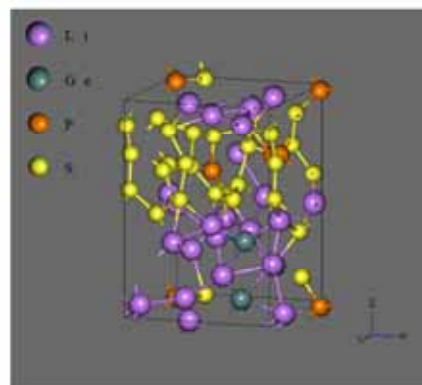


図 3  $t = 100\text{ps}$  での構造

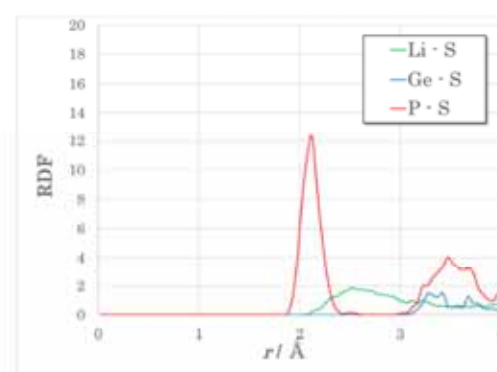


図 4 動径分布関数

- HDNNP では 800K という高温には耐えられず、構造が完全に破綻します。外挿が機能しないためです。
- トラジェクトリーを用いた強化学習が実施できません。

## 4.2. 強化学習

- 初期力場を使用して Metropolis 法を実施して、新たに多数の構造を生成しました。Metropolis 法における温度は 300K~1000K です。最終的な教師データの構造数は、6,914 個です。このうち 200 構造は  $2 \times 2 \times 1$  スーパーセルで、それ以外の構造は全てユニットセルです。L-BFGS 法にて 10,000 エポックの学習を実施しました。
- $\text{RMSE}(\text{Energy}) = 3.4 \text{ meV/atom}$ 、 $\text{RMSE}(\text{Force}) = 0.077 \text{ eV/\AA}$
- $\Delta$ -NNP は HDNNP よりも収束性が良いことが確認できました(下図)。

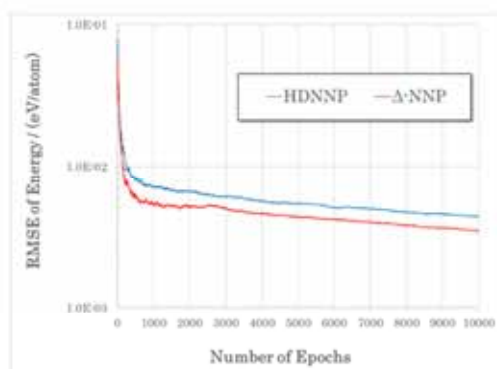


図 5

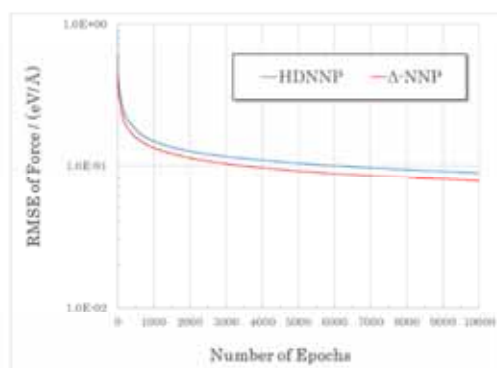


図 6

## 4.3.2 体ポテンシャル関数

2 体ポテンシャルのみを使用したとき(NNP 無し)の精度:

- $\text{RMSE}(\text{Energy}) = 41.9 \text{ meV/atom}$ 、 $\text{RMSE}(\text{Force}) = 0.457 \text{ eV/\AA}$
- Ge-S、P-S などの結合を正しく表現できています(下図)。

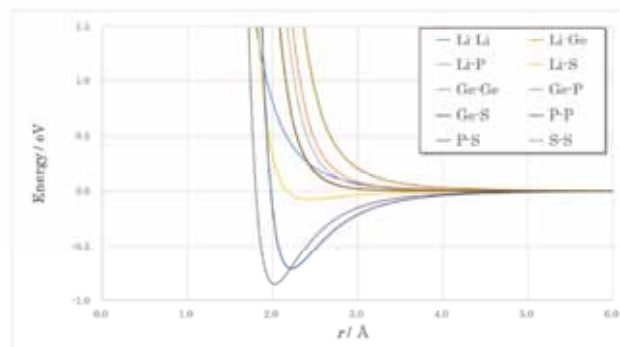


図 7

## 4.4. Li イオンの拡散係数計算

- 1600 原子系のスーパーセルモデル(右図)を用いて、0.5~1.0ns の MD 計算を実施する。 $\Delta t = 0.5 \text{ fs}$ 、NVT アンサンブルとします。
- 温度を 350~800K の種々の値としてシミュレーションを実施して、MSD の傾きからリチウムイオンの拡散係数を評価します。
- 一般に、高温では原子の運動が大きく、モデルサイズが小さくても高精度に拡散係数を評価できます。逆に、低温ではモデルサイズを十分に大きくしないと拡散係数の精度が担保されません。このため、第一原理 MD では高温での計算はできるものの、低温での拡散係数計算には NNP 法が必須です。

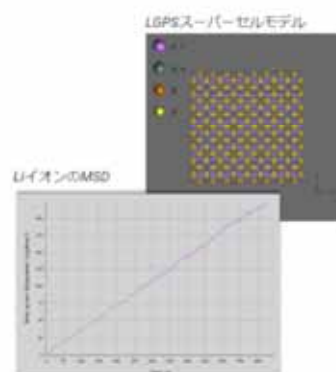


図 8

#### 4.5. イオン伝導率

- 拡散係数を  $D$  とすると、 $\text{Li}^+$  のイオン伝導率  $\sigma$  は下式となります。 $\rho$  は  $\text{Li}^+$  の濃度、 $e$  は素電荷、 $k$  はボルツマン定数、 $T$  は温度です。

$$\sigma = \frac{\rho e^2 D}{kT}$$

- 計算された  $\sigma$  のアレニウスプロット：

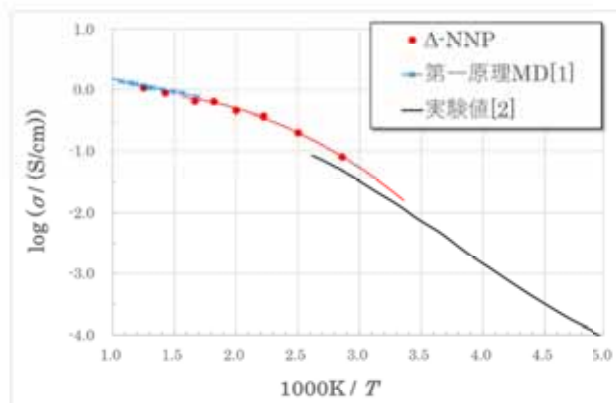


図 9

- $T = 298.15\text{K}$  におけるイオン伝導率を、2 次関数で補外して予測すると、

$$\sigma = 1.6 \times 10^{-2} \text{ S/cm}$$

となりました。実験値  $1.2 \times 10^{-2} \text{ S/cm}$  にかなり近い数値です。

- 第一原理 MD や既存 NNP よりも低コストに高精度なイオン伝導率が予測できることから、LGPS 以外の固体電解質への適用も期待されます。
- 教師データ作成から  $\sigma$  算出まで 1 週間弱ほどで完了。

[1] A. Marcolongo, et al.,

<https://arxiv.org/abs/1910.10090>

[2] 菅野了次, Electrochemistry, 85(9), 591 - 596 (2017)



## 【材料・化学】自己学習ハイブリッドモンテカルロ法による 酸化物系リチウムイオン伝導体LLZOの伝導率計算 [A/NeuralMD]

### 1. 使用ソフトウェア

ニューラルネットワーク分子動力学システム  
Advance/NeuralMD

### 2. 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法

旧来の Neural Network 力場 (NNP) の作成方法では、教師データに用いるランダム生成構造の生成方法における任意性の問題や、教師データをどこまで増やすかがユーザーに委ねられているといった問題があった。

自己学習ハイブリッドモンテカルロ(SLHMC)法は下図の計算スキームで NNP を生成する。

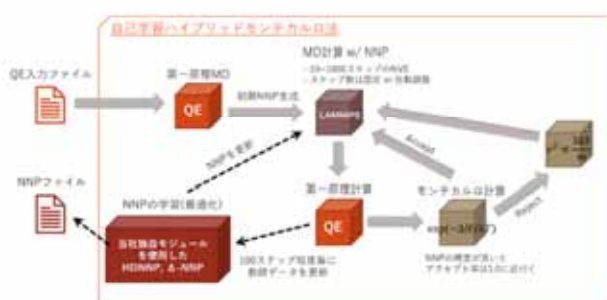


図1

この手法のメリットには以下のようなものがある。

- ・ユーザーの練度や作成手順に依存せず、常に同水準の Neural Network 力場が生成可能。
- ・計算プロセスが自動化されているため、ユーザーが行うべき操作が極めて少ない。ユーザーは、第一原理計算の入力ファイルを用意するだけでいい。
- ・操作手順が少ないことに加え、教師データの数も低減できる傾向にあるため、力場作成に要する時間を大幅に削減できる。これまで数週間掛かっていた作業が半日～数日ほどに。
- ・モンテカルロ計算の結果を使って、厳密に第一原理の精度で物理量の評価が可能。

Advance/NeuralMD では、第一原理計算には Quantum ESPRESSO を、分子動力学(MD)計算には LAMMPS を使用する(どちらもオープンソース)。また、NNP の学習には、当社独自実装のモジュールを使用する。加えて、モンテカルロ法におけるアンサンブルは NVT および NPT に対応し、アクセプト率に応じて MD 計算のステップ数を自動調整する機能を備えている。

これら全ての機能を Advance/NanoLabo(GUI)から操作可能である。

### 3. 酸化物 Li イオン伝導体 : $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$

$\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$  (LLZO) は、室温で  $2.5 \times 10^{-1}$  S/cm 程度のイオン伝導率を有する酸化物 Li イオン伝導体である。ユニットセル1つにつき、12個  $\text{LaO}_8$  12面体と8個の  $\text{ZrO}_6$  8面体が形成するガーネット型結晶構造と、28個の  $\text{Li}^+$  を含む。

BCC 構造(立方晶)と BCT 構造(正方晶)があり、BCT 構造では、BCC 構造に対してわずか2%ほどの格子の歪みにもかかわらず、イオン伝導率が  $2.4 \times 10^{-2}$  S/cm 程度にまで大きく低下することが知られている。この2つの結晶構造の LLZO を教師データとして SLHMC 法による NNP を作成し、イオン伝導率を比較する。

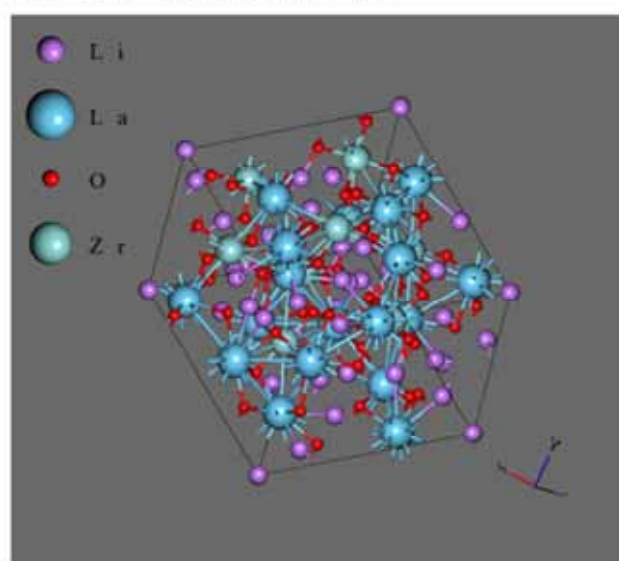


図2

#### 4. Neural Network 力場の作成

Quantum ESPRESSO の入力データを用意し、SLHMC 法を実行した。

- 初期構造には、BCC 構造の  $\text{Li}_{28}\text{La}_{12}\text{Zr}_8\text{O}_{48}$  (96 原子系) を使用した。結晶構造には、Materials Project から取得したもの(mp-942733)をプリミティブセルに変換し、格子定数が全て約 11.2 Å の BCC 構造に変換したものをを用いた。

- MD 計算は NVT アンサンブルで行った。BCC 構造と BCT 構造の違いを取り込むために、200 ステップ毎に NPH アンサンブルでの NNP-MD を追加した。MD 計算の温度は、構造のバリエーションを得るために、高めの 800 K に設定した。

- SCF 計算にはウルトラソフト擬ポテンシャルを用いた密度汎関数法を用いた。交換相関汎関数は GGA-PBE を用いた。カットオフエネルギーは 36.0 Ry、k 点は  $\Gamma$  点のみとした。

- NNP における対称関数には 80 個の Chebyshev 関数を用いた。カットオフ半径は 5 Å とした。Neural Network は 40 ノード x 2 層とし、活性化関数は twisted tanh を用いた。また、第 3 世代 HDNNP で各原子の電荷を表現し、 $\Delta$ -NNP 法も併用した。
- 初期力場は 200 ステップの FPMD を行って作成し、NNP-MD は SCF 計算毎に 10~80 ステップ(2.5 ~ 20.0 fs)で行った。教師データが 100 個増える度に教師データおよび NNP の更新を行った。教師データには採択されたものと棄却されたものの両方を含み、総数は 2500 個になった。

Intel Xeon Gold 5218 (2 CPU, 32 コア) を使用して、約 50 時間で力場作成が完了した。類似の Li イオン伝導体(LGPS)を旧来の手法で作成した際には、1 週間近く掛かっている。CPU 稼働時間は大きく変わらないが、手続きが自動化されているため、総時間が大きく短縮できる。

エネルギーの誤差(下図左)は  $\text{MAE} = 2.2 \text{ meV/atom}$  まで収束した。MC 法によるアクセプト率(下図右)は 20 ~ 60% の範囲だった。

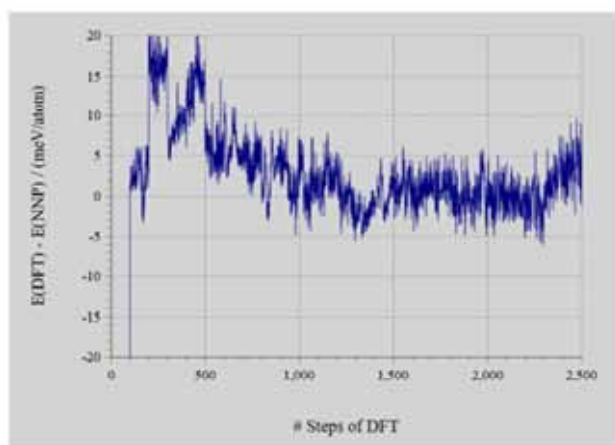


図 1 エネルギー誤差

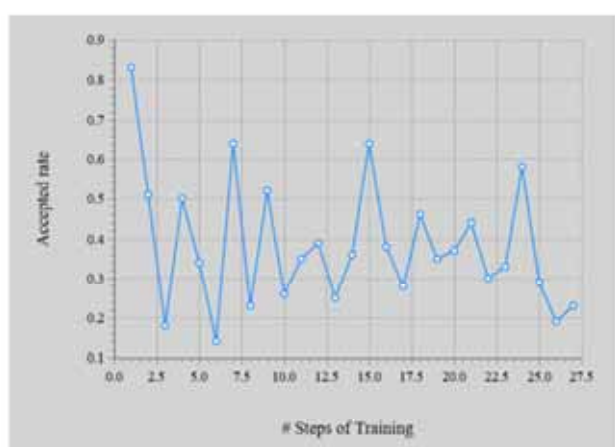


図 2 アクセプト誤差

#### 5. イオン伝導率の計算

作成した NNP を使用して NNP-MD 計算を行った。

- 構造には、Materials Project から取得した mp-942733 の BCT ユニットセルと、その格子定数を 12.95 Å に揃えた BCC ユニットセルを用いた。どちらも 192 原子系を用いた。

- NPT アンサンブル(isotropic)で 600 K、1.0 ns のシミュレーションを行い、拡散係数  $D$  からイオン伝導率  $\sigma$  を算出した。



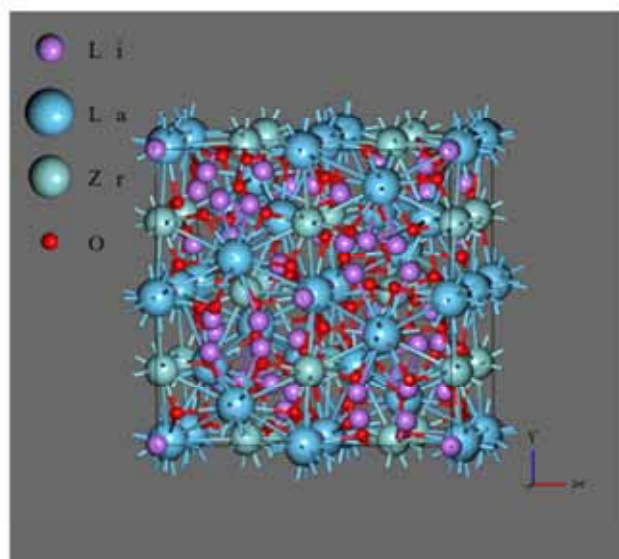


図 3

イオン伝導率  $\sigma$  は、拡散係数  $D$ 、 $\text{Li}^+$ イオン密度  $\rho$ 、素電荷  $e$ 、ボルツマン定数  $k$ 、温度  $T$  を用いて、次式によって算出される。

$$\sigma = \frac{\rho e^2 D}{kT}$$

$\text{Li}^+$ イオンの平均二乗変位は下図のようになり、算出されたイオン伝導率  $\sigma$  は下表のようになった。このように、SLHMC で作成した NNP で、BCC 構造と BCT 構造のイオン伝導率の違いを再現できた。

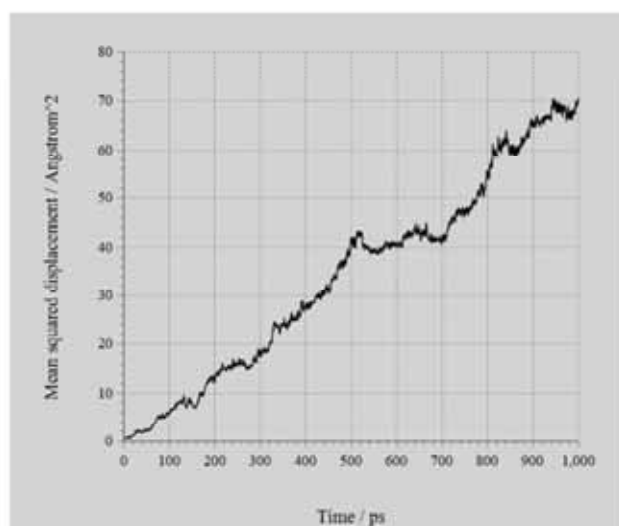


図 4 BCC 構造

表 1

BCC 構造の $\sigma$ / (S/cm)	
NNP-MD	$9.4 \times 10^{-2}$
Buckingham	$8.6 \times 10^{-4}$ <sup>3</sup>
実験値	$2.5 \times 10^{-1}$ <sup>4</sup>

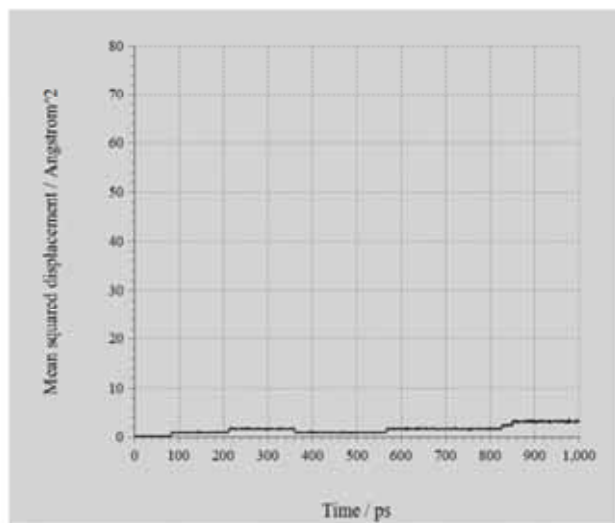


図 5 BCT 構造

BCT 構造の $\sigma$ / (S/cm)	
NNP-MD	$4.2 \times 10^{-3}$
実験値	$2.4 \times 10^{-2}$

1. Y.Nagai et al., Phys. Rev. B, 2020, 102, 041124 [e](#)
2. K.Kobayashi et al., J. Chem. Phys., 2021, 155, 034106 [e](#)
3. A.Kuhn et al., J. Phys. Chem., 2012, 226, 252 [e](#)
4. F.Chen et al., J. Phys. Chem., 2018, 122(4), 1963 [e](#)



## 【材料・化学】32GPU搭載クラウドにおけるベンチマーク[A/NeuralMD]

## 1. 解析対象

Neural Network 力場を用いた、LAMMPS による分子動力学計算のベンチマークを 32 個の GPU を搭載したクラウド上で実施しました。本事例では、以前の Mat3ra におけるベンチマークで用いた硫化物リチウムイオン伝導体 Li<sub>10</sub>GeP<sub>2</sub>S<sub>12</sub> の 21600 原子系スーパーセルモデルに加えて、同一組成の 98000 原子系スーパーセルモデルについても計算を行いました。

## 2. 使用ソフトウェア

ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD

## 3. 計算機環境

本事例で使用した計算機の 1 ノードあたりのスペックを以下に示します。本事例で使用した計算機には 4 つのノードが搭載されています。

- ・ CPU : AMD EPYC 7J13 (64cores, 2.55GHz) x2
- ・ メモリ : 2048GB
- ・ GPU : NVIDIA A100 ×8

- ・ ストレージ : 120GB NVMe + 27.2TB NVMe SSD (7.68TB ×4)
- ・ ネットワーク : 2 ×50Gbps + 16×100Gbps RDMA
- ・ コンパイラ : Intel oneAPI 2021.7.1
- ・ MPI ライブラリ : OpenMPI 4.1.3
- ・ 行列演算ライブラリ : Intel MKL 2022.2.1
- ・ CUDA : 11.4

計算機環境の用意・使用にあたっては、HPC システムズ様にご協力いただきました。

## 4. ベンチマーク結果

計算条件および計算結果は下表の通りです。今回用いたマシンでは、1 ノードあたり最大 8 個の GPU が使用可能です。MPI 並列数に関しては、1 つの GPU につき 4 つの MPI プロセスが起動されるよう設定しました。また、全ての計算において OpenMP スレッド数は 1 としました。MD 計算は 100 ステップ行い、時間刻み幅は 0.5 fs としました。また、同様の分子動力学シミュレーションを 1 ns 間実施するのに要する日数を計算結果から算出し、下表に記載しました。

表 1

	GPU × 1	GPU × 2	GPU × 4	GPU × 8	GPU × 16	GPU × 24	GPU × 32
ノード数	1	1	1	1	2	3	4
MPI プロセス数	4	8	16	32	64	96	128
計算時間(sec) (21600 原子)	15.35	7.84	4.16	2.29	1.41	1.14	1.03
計算時間(sec) (98000 原子)	69.12	35.64	18.08	9.84	4.97	3.42	2.63
day/ns (21600 原子)	3.55	1.82	0.96	0.53	0.33	0.26	0.24
day/ns (98000 原子)	16.00	8.25	4.19	2.28	1.15	0.79	0.61

また、以前の Mat3ra におけるベンチマークの結果得られた、AWS において CPU (Intel Xeon Platinum/72core) を 1 つ用いた場合の計算速度を 1 とした相対計算速度を下図に示します。ただし、98000 原子系については AWS において計算を行っていないため、計算時間が原子数に比例することを仮定して  $\text{CPU} \times 1$  の場合の計算速度を算出し、それを基準として相対計算速度を算出しました。下図からは、クラウドの 32 個の GPU を使用することにより約 260 倍の高速化を達成できていることがわかります。

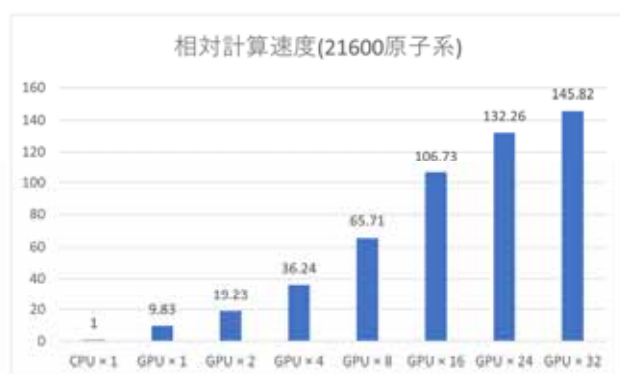


図 1

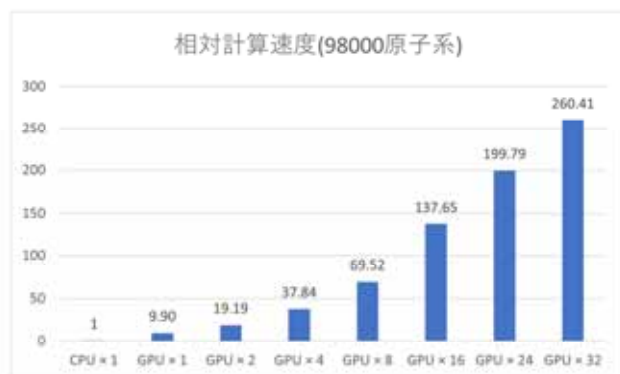


図 2

さらに、 $\text{GPU} \times 1$  の場合の計算速度を 1 とした相対計算速度を、21600 原子系及び 98000 原子系のそれぞれについて下図に示します。また、並列効率が理想的な場合の相対速度についてもプロットを行いました。21600 原子系では GPU デバイス数が増えるにつれて並列効率が下がっていますが、98000 原子系では GPU デバイス数が 32 でも十分な高速化が実現できていることがわかります。GPU デバイスを 32 個使用した場合、各 GPU に割り当てられる原子数が 21600 原子系では約 700 原子、98000 原子系では約 3000 原子

となっており、前者に比べて後者では 1GPU あたりの原子数が十分大きいと並列性能を維持できていると考えられます。

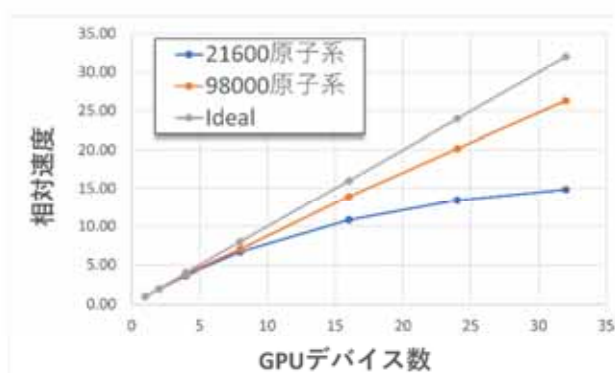


図 3

今回のベンチマークでは、Neural Network 力場を用いた 1 ns の分子動力学計算を 10 万原子程度の系に対して実施する場合でも、クラウド環境の 32 個の GPU を使用すれば 15 時間程度で計算を実行できることがわかりました。多数の GPU を搭載したクラウド環境を使用することで、より現実に近いモデルでのシミュレーションを短い計算時間で高精度に実行できることが期待されます。

## 【材料・化学】分子動力学シミュレーションを用いた水素添加時における鉄の劣化解析 [A/NeuralMD]

### 1. 解析対象

分子動力学シミュレーションでは、与えられた原子構造からある関数を使ってポテンシャルエネルギーを計算します。この関数は「力場」と呼ばれ、通常、経験的に決められた関数形を使用します。一方、ニューラルネットワーク力場では経験的な知識を使わずに、学習によってゼロから力場を構成します。本事例では、水素添加時に鉄が劣化する現象の分子動力学シミュレーションの解析事例について紹介します。金属に適する力場としてはEAM（Embedded Atom Method、原子挿入法）力場が知られているが、今回は既存の力場を使わずに、Advance/NeuralMD を使ってニューラルネットワーク力場を作り、水素添加量が異なる鉄にひずみを加えたときの応力の応答から、剛性の指標として用いられるヤング率を調査しました。

### 2. 使用ソフトウェア

ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD

### 3. 教師データの作成とニューラルネットワークの学習

ニューラルネットワーク力場では、系の中の1つひとつの原子について、「近傍の原子構造」から「その原子のエネルギー、およびその原子に働く力」を求めます。そのためニューラルネットワークの学習に使う教師データとして、本番の計算で現れ得る「近傍の原子構造」を万遍なく用意する必要があります。

本解析事例では、まず Materials Project より取得した体心立方構造のユニットセル(mp-13)1 を  $3 \times 3 \times 3$  で拡張したスーパーセルモデルを作成しました。鉄原子数は54個であり、その内部に3個の水素原子を添加することで水素添加された鉄をモデル化しました。Advance/NanoLabo では、

ユニットセルを決定した後に各軸方向の繰り返し回数および添加原子種および数を指定するだけでこのようなモデルを容易に作成することができます。力場作成に使用したモデルを以下の図に示しました。

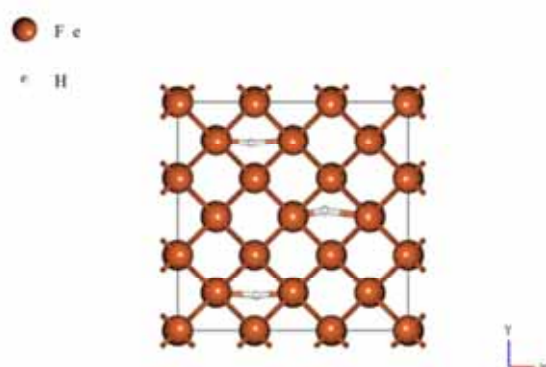


図 1

本モデルを使用して、自己学習ハイブリッドモンテカルロ（SLHMC）法によってニューラルネットワーク力場を作成しました。SLHMC 計算の詳細を以下に示します。

- ・QE 計算は NVT アンサンブルで行った。温度は実際に MD 計算にてヤング率の解析を行う 300 K に設定した。
- ・SCF 計算における交換相関汎関数は Pseudopotential を採用し、鉄には `fe_pbe_v1.5.uspp.F`、水素には `h_pbe_v1.4.uspp.F` を使用した。エネルギーのカットオフは 40.0 Ry、電荷のカットオフは 225.0 Ry とした。
- ・NNP における対称関数には Chebyshev 関数を用いた。カットオフ関数には `tanh` を用いており、半径関数の数は 50、角度関数の数は 30 に設定した。またカットオフ半径はいずれも 6.0 Å とした。Neural Network は 40 ノード  $\times$  2 層とし、活性化関数は `twisted tanh` を用いた。
- ・初期力場は 200 ステップの FPMD を行って作



成し、NNP-MD は SCF 計算毎に 2.5fs ~ 500.0 fs で行った。教師データが 100 個増える度に教師データおよび NNP の更新を行った。教師データには採択されたものと棄却されたものの両方を含み、総数は 2600 個になった。

#### 4. MD 計算モデルとスキームの設定

MD 計算モデルは体心立方構造のユニットセル (mp-13)<sup>1</sup> を  $10 \times 10 \times 10$  で拡張したスーパーセルモデルに水素を添加することで作成しました。鉄原子数は 2000 個であり、その内部に 20 個の水素を添加した水素濃度 1.0%、40 個添加した水素濃度 2.0% の場合と未添加時のヤング率を比較することで水素脆化の解析を行いました。計算に使用したモデルを以下に示しました。(上から、水素濃度 0.0%、1.0%、2.0%)



図 1

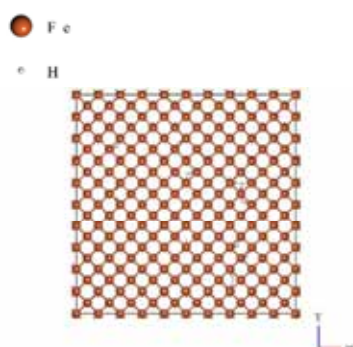


図 2

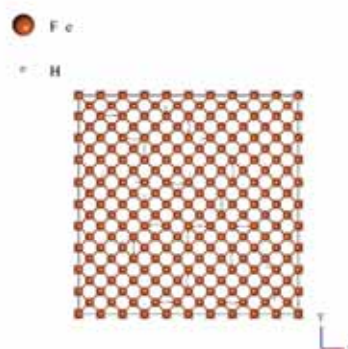


図 3

計算スキームは 3 つのステップから構成しました。

1. まず系のエネルギーを緩和するためにエネルギー安定化処理 (Optimization) を行った
2. その後、300K、1bar の条件下で 10 万ステップ (50 ps) のシミュレーションを行い、系を平衡化した。タイムステップは 0.5 fs とし、セルには等方的な変形のみを許した
3. 次に、各モデルについて X 方向に 0.001Å/ps のひずみを与えながら、ピリアル応力の計算を 50 万ステップ (500 ps) 行った。タイムステップは 1.0 fs とした。本シミュレーションでは一軸応力の測定を目的としているため、ひずみを与えている方向と垂直な方向の圧力は 0bar で一定となるように設定を行った。

Advance/NanoLabo では Option 画面から、任意の方向へのセルの変形を容易に設定することが可能です。また、User's 画面からは任意の物理量の定義、計算及びグラフによる可視化の設定を行うことができます。本シミュレーションでは User's 画面からピリアル応力の計算設定を行いました。以下に計算スキームの設定画面および Option 画面を示します。

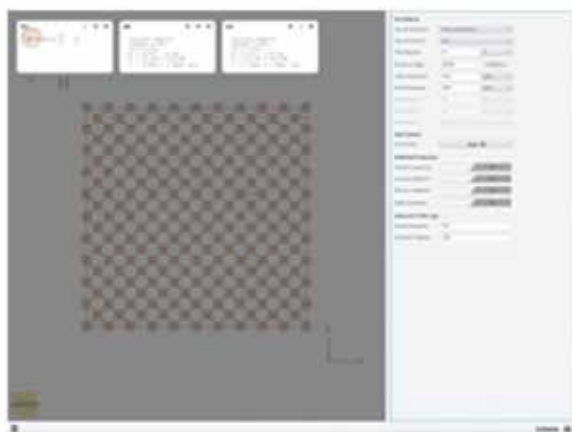


図 4

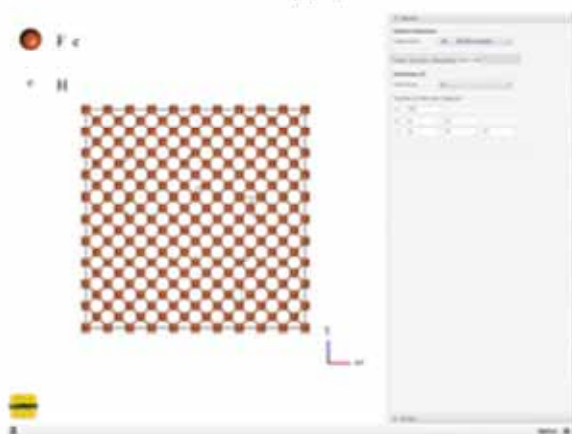


図 5

## 5. 計算結果

Advance/NanoLabo では、計算結果の GUI 上での可視化や、CSV ファイルの出力を容易に行うことができます。ヤング率はひずみと応力の比として定義されるため、ひずみに対する応力の応答を一次関数でフィッティングすることでヤング率を算出しました。応力—ひずみ曲線および、その結果得られた各水素濃度におけるヤング率を表に示しました。我々の解析結果は水素濃度 0.0% の純鉄のヤング率は 218.98 Gpa であり、実験結果 201-216 Gpa<sup>2</sup> の範囲におおよそ一致していることから、本解析は妥当であると考えられます。水素濃度 1.0% のヤング率は 208.51 Gpa、2.0% においては 195.42 Gpa となっており、水素濃度の増加によってヤング率が低下していることから、水素脆化現象を適切に再現することが出来ました。本手法を応用することで、鉄に限らず様々な物質の水素脆化現象について網羅的に解析が可能であることが示されました。

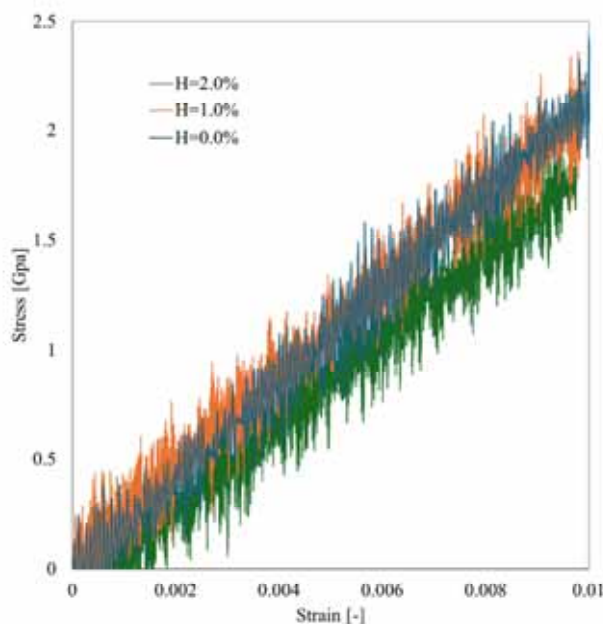


図 6

表 1

水素濃度 (%)	ヤング率 (GPa) (計算値)	ヤング率 (GPa) (実験値)
0.0	218.98	201-216
1.0	208.51	-
2.0	195.42	-

1. mp-13: Fe (Cubic, Im-3m, 229). Materials Project. <https://next-gen.materialsproject.org/materials/mp-13> (accessed 2024-03-06). [🔗](#)
2. Takaki, S.; Masumura, T.; Tsuchiyama, T. Young's Modulus of Single Crystalline Iron and Elastic Stiffness. Tetsu To Hagane 2020, 106 (9), 679–682.

## 【建築土木、産業機械】膜要素を使用したバルーンの膨らみ解析 [A/FSTR]

### 1. 概要

膜要素を使用し、バルーンの膨らみ現象を解析した事例をご紹介します。

### 2. 使用ソフトウェア

構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR

### 3. 膜要素について

#### 3.1. 膜構造とは？

- ・面内剛性しかない2次元構造（曲げ剛性=0）
- ・例えば、東京ドームの屋根、風船、布、細胞膜など

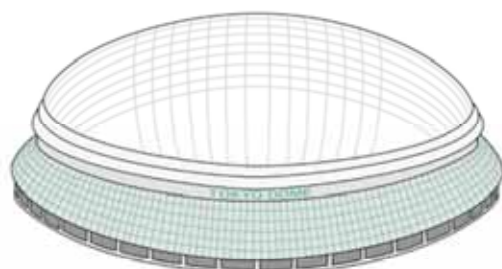


図 1

#### 3.2. 膜要素が対応する解析機能

- ・Advance/FrontSTR で実行できるすべての解析種類（!STATIC、!DYNAMIC etc...）
- ・線形解析、幾何学的非線形解析、接触解析（slave面として）
- ・材料非線形：弾性、粘弾性

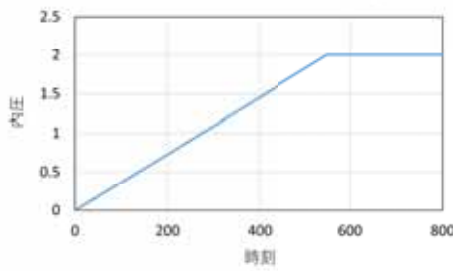
### 4. 解析条件

図2に示す萎んだ風船のメッシュに、ガスの注入を想定した内圧を負荷し、膨らむ過程を解析します。



図 2

表 1 解析条件

項目	値
要素タイプ	三角形一次要素 MTRIA3
材質	St.Venant-Kirchhoff 超弾性材 ヤング率 E=1000 MPa    ポアソン比 $\nu=0.25$
解析種類	時刻歴応答解析
解析手法	HHT- $\alpha$ 法
荷重条件	風船全体に面圧負荷（時間依存） 
境界条件	ガス注入口を拘束
ソルバー	直接法



## 5. 解析結果

この解析事例では、風船が大きく変形して、空間で大きな剛体移動や回転を生じながら、圧力方向は常に変化しています。

解析の結果、これらの問題を適切に再現できていることが確認できました。

### 5.1. 変形図

解析結果として、0 秒、360 秒、540 秒、730 秒における変形図を示します。バルーンは膨張した後に、ガス注入部付近の折れを広げる方向に変形していきます。

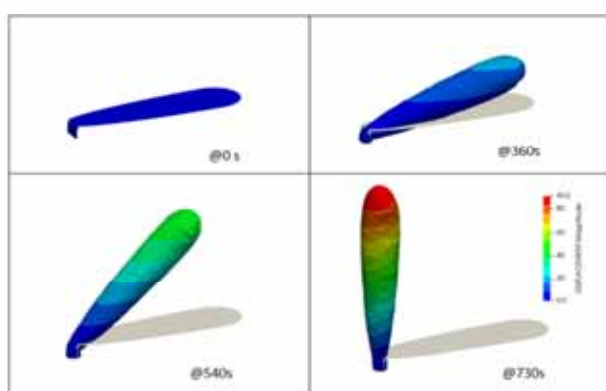


図 3 変形図

### 5.2. 応力分布図

730 秒における Von Mises 応力分布図がこちらです。

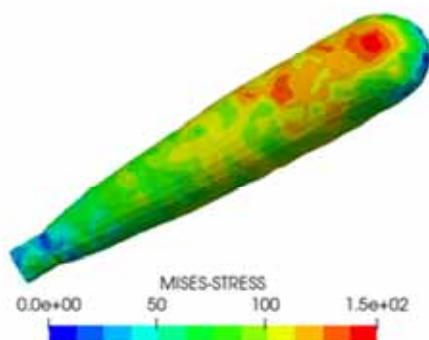


図 5 応力分布図

## 【産業機械】微細構造モデリングツールで作成した複合材料モデルの熱伝導解析 [A/REVOCAP]

### 1. 解析対象

多孔質体、炭素繊維複合材料、繊維強化金属といった微細構造を持つ材料

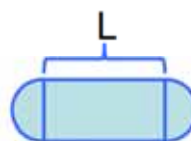


図1 フィラー高さ

### 2. 使用ソフトウェア

汎用プリポストプロセッサ

Advance/REVOCAP\_PorousModeler

### 3. 解析モデル

熱伝導率の低い母材に熱伝導率の高いフィラー（充填材）が充填されているような材料を考え、下面を一定温度、側面を断熱、上面を熱伝達境界として、熱伝導解析を行いました。この時、フィラーの充填率をほぼ一定にして、形状を変化させた場合の熱伝導解析結果を示します。

#### 3.1. 計算モジュールと計算環境

・モデル作成：微細構造モデリングツール

Advance/REVOCAP\_PorousModeler

・熱伝導解析：構造解析ソフトウェア

Advance/FrontSTR

・計算機：当社社内計算機サーバーIntel Xeon

2.8GHz

表1 計算条件

計算領域 [m]	0.1 x 0.1 x 0.1
フィラー半径 [m]	0.005
フィラー高さ L [m]	0.0 から 0.05 まで 0.005 刻み
フィラー密度	0.25
下面温度 [K]	100.0
上面熱伝達係数 [W/(m <sup>2</sup> K)]	1.0
上面雰囲気温度 [K]	0.0
マトリクス比熱 [J/(kg K)]	1100.0
マトリクス熱伝導率 [W/(mK)]	0.3
マトリクス質量密度 [kg/m <sup>3</sup> ]	1850.0
フィラー比熱 [J/(kg K)]	756.0
フィラー熱伝導率 [W/(mK)]	100.0
フィラー質量密度 [kg/m <sup>3</sup> ]	1760.0

### 4. 解析結果



図2

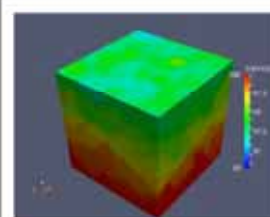


図3

L=0.05 の充填材の分布図

L=0.05 の熱伝導解析結果（温度）

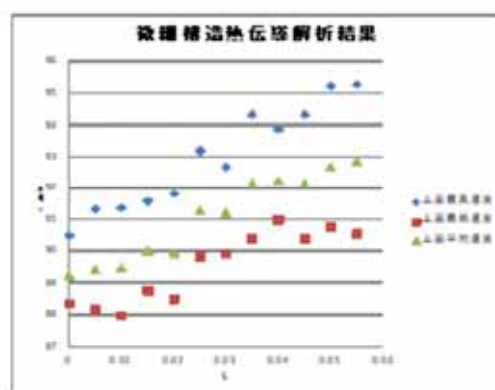


図4

フィラー長さLを変化させた時の上面の温度分布を統計処理したもの（最高、最低、平均）のグラフを示します。横軸がフィラー長さL、縦軸が温度です。

平均温度についてフィラー長さLとの相関係数を計算すると 0.974 となり、ほぼ線形従属の関係にあるとみなすことができます。

## 【産業機械】VOF法を用いたタンクからの放水解析 [A/FFred]

### 1. 解析対象

タンク

### 2. 使用ソフトウェア

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red

### 3. 解析モデル

Advance/FrontFlow/red の VOF 法を用いてタンクから水が放出される様子を解析しました。赤い領域が水、青い領域が空気を表します。タンクは左右それぞれ縦 0.5m× 横 0.3m で、メッシュは 2.5mm 間隔で切られています。

### 4. 解析結果

右側のタンクに貯められた水が計算スタートと同時に空気を巻き込みながら左側のタンクに移動しています。移動の途中では、激しい振る舞いで界面から巻き込まれた気泡が生成されます。このような複雑な流動においても界面は非常にシャープで、数値拡散が抑えられていることがよく分かります。

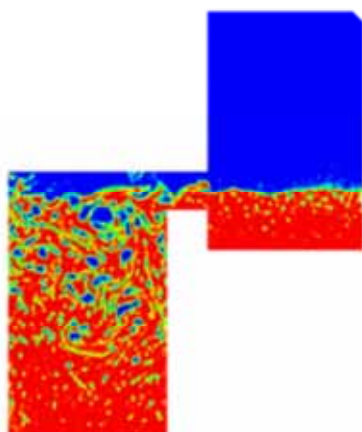


図 1



## 【産業機械】VOF法の解析事例 [A/FFred]

### 1. 概要

Advance/FrontFlow/red では VOF 法を用いて気液界面の運動を解析することができます。また界面だけでなく、液体が気体を巻き込みながら流れ込む際の気泡の運動なども含めて解析することができます。

- 開水路などの流動解析（水位や流速の評価）
- 毛管・毛細管現象の解析（表面張力による流動性の評価）

### 2. 使用ソフトウェア

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red

### 3. 解析事例

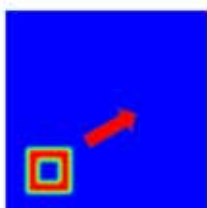


図1 VOF 法移流項の検証

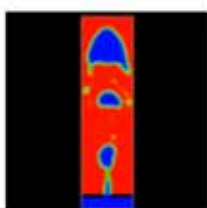


図2 VOF 法を用いた気泡塔解析

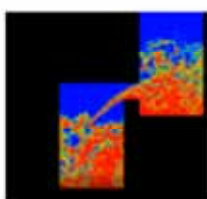


図3 VOF 法を用いたタンクからの放水解析

### 4. 適用例

- 潤滑油、冷却剤などの気泡解析（消泡性などの評価）
- インクや薬品などの塗布流動解析（塗布面の安定性や膜厚の評価）
- 液面スロッシング解析（液面挙動や壁面圧力、溢水量の評価）※

## 【産業機械】鉄道車両内の空調解析[A/FOCUS-i]

## 1. 解析対象

鉄道車両

## 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソフトウェア Advance/FOCUS-i

## 3. 背景

鉄道車両内の空調解析では解析対象が大きい限られた計算資源をどのように使うかが課題である。特にエアコンの吹き出し形状変更により車両内の流速と温度分布を容易に評価できる方法がもとめられている。Advance/FOCUS-i ではこれらの要望に応えるべく、テスト解析を実施し、その内容について紹介します。

## 4. 解析モデル

解析に使用した解析モデルとその寸法を表1と表2に示す。

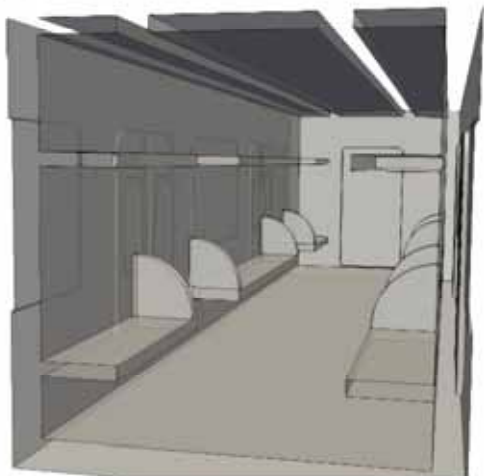


図1 解析モデル

表1 解析モデル寸法

No.	項目	寸法[mm]
1	車両室内長さ	19,500
2	車両室内幅	2,400
3	車両室内高さ	2,500

## 5. 解析条件

解析条件と、解析に用いた主要な計算手法を表2と表3に示す。

表2 解析条件

No.	項目	寸法[mm]
1	気体流入個所	車両天井中央 高さ2,500mm の位置
2	エアコン排出口幅	400mm
3	流入速度	2m/s
4	流入気体	空気
5	流出個所	車両天井 高さ2,500mm の位置
6	エアコン吸気口幅	200mm×2 か所
7	流出境界条件	101,325[Pa]
8	現象時間	150 秒程度
9	総格子数	203,556 格子

表3 解析に用いた主要な計算手法

No.	項目	詳細
1	時間進行法	Dual time stepping with preconditioning
2	擬似時間進行法	LU-SGS with preconditioning
3	対流項	AUSMDV(P)

## 6. 解析結果

鉄道車両内へ気体が流入した60秒後、車両10m地点の流線図を図2に示します。解析結果より鉄道車両2.5mの天井から風速2.0m/sで車両内に吹き込み、車両天井面に設置した吸気口に気体が行れる様子を確認できます。また、解析では温度分布も同時に解いているので、車両内の温度分布の結果も得ることが可能です。

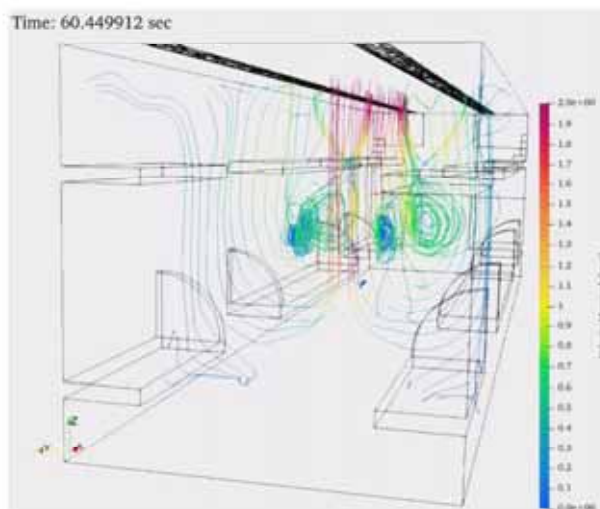


図2 風量の流線図

解析所要時間：16 時間（28CPU 計算、Intel Gold 6330 2.00GHz）

## 【建築土木、産業機械】空調機コンプレッサーの室内騒音評価 [A/FNoise]

## 1. 使用ソフトウェア

音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise

## 2. 概要

空調機では、コンプレッサーを音源としてその振動が空調機管内を伝播し室内に到達することが原因で室内の騒音が発生します。図1に示すモデルを使用して、空調機による室内騒音を、音響解析ソフトウェア Advance /FrontNoise で評価して、その解析結果を実験値と比較いたしました。

Advance/FrontNoise の入力となる音源は、実験から得られたコンプレッサーの時系列のガス圧脈動データを利用しました。音源からの音の伝播経路をシミュレーションすることにより、最終的に室内の騒音レベルを求めることができます。

Advance/FrontNoise を用いたシミュレーションでは、3段階で音響評価を実施しました。まず、音が伝播する経路の機器形状を3次元的に詳細にモデル化することにより、その伝播経路の音響特性を解析しました。すなわち、音響伝播経路の透過損失をシミュレーションで求めました。次に、室内にある空調機管内の音響解析の結果を用いて、管の内面から管の表面への音響伝播を評価しました。最後に、管表面から室内への音響放射を解析解により求め、室内の騒音レベルを算出しました。

室内での騒音レベルを実験と比較した結果、シミュレーション結果と実験結果は非常によく一致しました。特に3次元の効果が含まれる管内の音響伝播に基づく騒音を精度よく予測したい場合に、ここで示した Advance/FrontNoise を用いた音響解析手法が有効です。

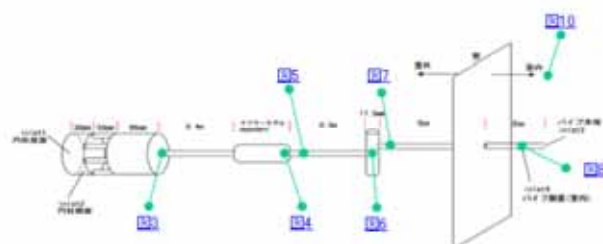


図1 解析モデル

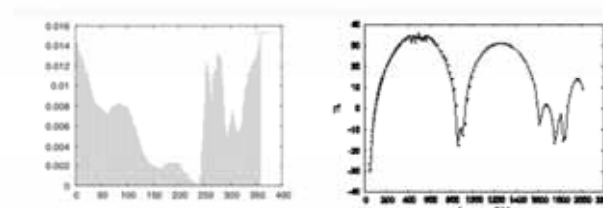


図2 コンプレッサ圧力の時系列データ

図3 コンプレッサ単独の音響特性

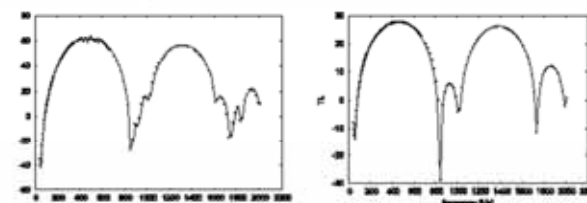


図5 マフラー出口での音響評価

図4 マフラー単独の音響特性

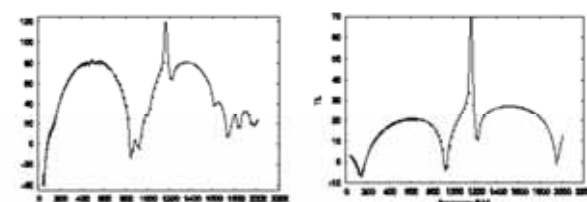


図7 四方井出口での音響評価

図6 四方井単独の音響特性

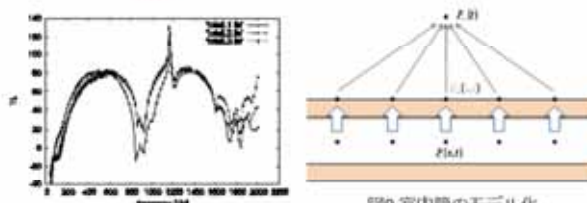


図8 室内管での音響評価

図9 室内管のモデル化

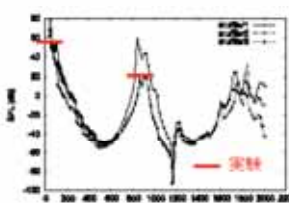


図10 実験



### 3. 解析条件

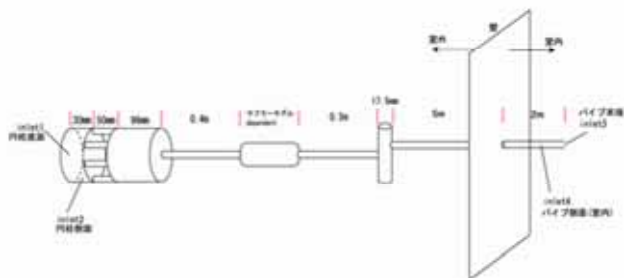
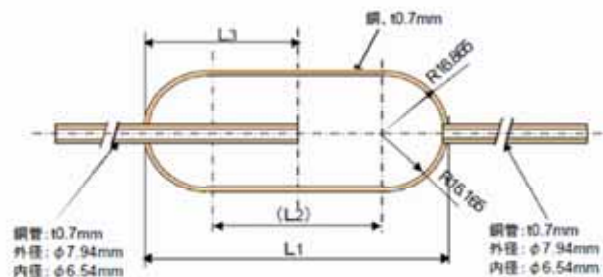


図 11 モデル寸法図



	マフラー1	マフラー2	マフラー3
L1	100mm	62mm	51mm
L2	(66.27mm)	(28.27mm)	(17.27mm)
L3	なし(0mm)	31mm	25.5mm

図 12 マフラーモデル寸法

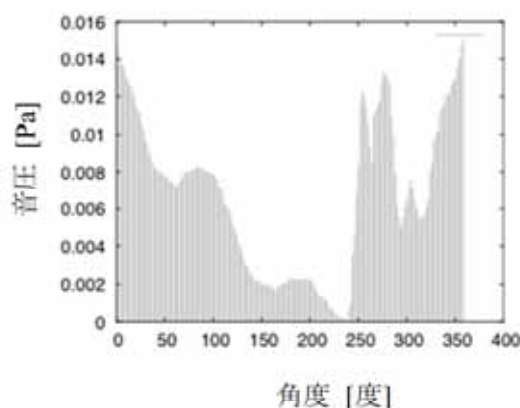


図 13 ガス圧脈動変形データ（周期データ）

#### 3.1. 全体形状

CAD モデルは図 11 と図 12 に示す寸法を用いて作成しました。

#### 3.2. 音源

お客さまから運転周波数 57.5 Hz の場合のガス圧脈動変形データをご提供いただきました。データを図 13 に示します。データは周期データで 1 周（360 度）に 0.0174 s かかります。これより、データの取得間隔は  $\Delta t = 9.6611 \times 10^{-5}$  s となります。

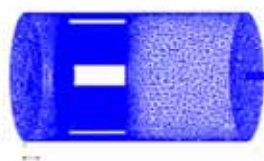


図 14 圧縮機部分の格子

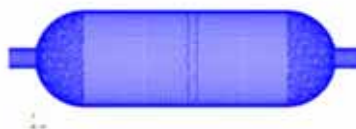


図 15 マフラー1の格子



図 16 マフラー2の格子



図 17 四方弁部分の格子

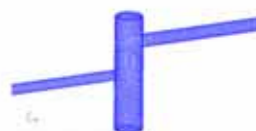


図 18 四方弁部分

#### 3.3. 格子

格子幅は、解析を行う最大周波数に相当する波長の 1/10 程度が必要です。解析の最大周波数が 4 kHz、媒質の音速が 175 m/s の条件では、格子幅は約 4 mm 程度となります。Advance/FrontNoise で使用する格子形状は四面体一次要素です。作成した格子の格子幅はモデルの部位によって異なり、最大で 4 mm、最小で 2 mm となっています。主要箇所格子を図 14～図 18 に示します。

#### 4. 解析結果

各マフラーモデルを用いた場合の全体の透過損失を図 19 に示します。マフラーを通過した後の音圧減衰は、マフラー1の方が低周波数側 (100～600 Hz) で大きく、マフラー3では、マフラー1に比べて高周波数側 (600～2000 Hz) で大きいことが判りました。

図 19 で得られた透過損失より、入力データより得られる音圧値を圧縮機部分に与えた場合に、予想される四方弁出口における音圧値は図 20 のようになります。四方弁通過後の測定点近傍での音圧減衰は、マフラー1、3共にマフラーを付けた場合に大きいことが確認できました。

直管から 0.2 m 離れた測定点における音圧レベルを図 21 に示します。黒線が計算値で、赤線はマフラー1の場合の実験値で、52 Hz のとき 44 dB、1 kHz 付近で 20 dB です。実験値と比較すると、同様の結果が数値計算で得られていることが確認できました。

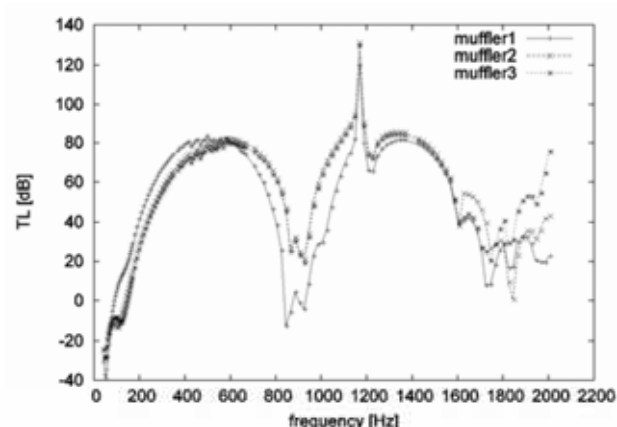


図 19 マフラーモデルごとの全体の透過損失

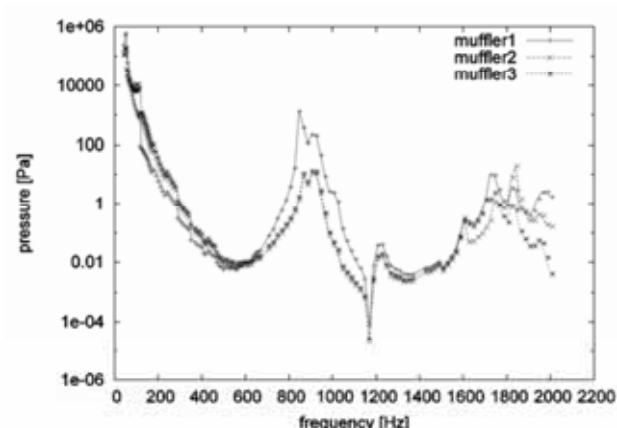


図 20 四方弁出口における音圧値

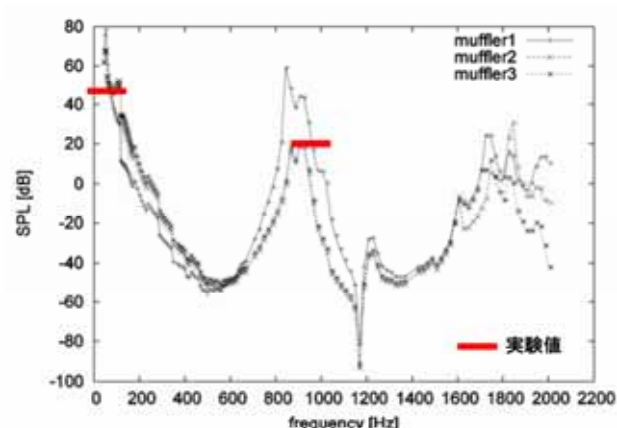


図 21 測定点での音圧レベル（部分計算結果で黒は計算結果、赤は実験値）

## 【産業機械】エッジトーンの流体音響弱連成解析[A/FNoise]

## 1. 概要

エッジトーンとは、細く絞られたジェットが楔形のエッジに衝突する事で生じる流体音のことで、パイプオルガンやリコーダーなどの発音メカニズムとなる現象です。エッジトーンの事例により、音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise と流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red 用いた、流体音響弱連成解析をご紹介します。

## 2. 使用ソフトウェア

音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise  
流体解析ソフト Advance/FrontFlow/red

## 3. 流体音響弱連成解析の流れ

## 3.1. 実行手順と利用ソフト

Advance/FrontNoise と Advance/FrontFlow/red を使用した流体音響弱連成解析の実施手順を図1に示します。まず、Advance/FrontFlow/red で解析領域における壁面の圧力変動や流体の速度分布を求めます。次に、Advance/FrontNoise に付属するツールを用いて周波数領域の音源を作成します。Advance/FrontNoise では、二重極音源と四重極音源を取り扱うことができます。二重極音源は壁面の圧力変動から作成し、四重極音源は流速から算出した Lighthill の乱流応力テンソルを用いて作成します。最後に、作成した二重極音源や四重極音源を音源として、音響解析を実施します。

エッジトーンの解析では、流体とエッジの衝突によって生じた渦を音源としました。したがって、流体解析結果から作成した四重極音源を使用して音響解析を実施しました。

## 3.2. 流体解析 (Advance/FrontFlow/red)

## 3.2.1. 流体解析条件

流体解析のモデルを図2に示します。ノズルに流入境界を設定しており、流入する気体の速度は 5.0 m/s です。図2の左側は、ノズルを除いて壁境界を設定し、上側、右側、下側は流出境界条件、

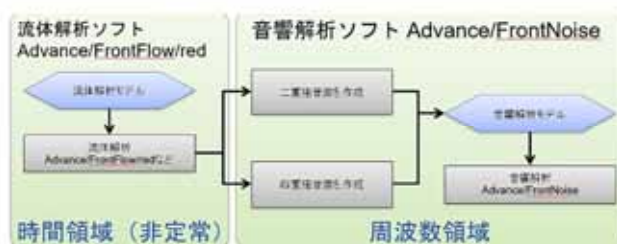


図1 流体音響弱連成解析の実行手順

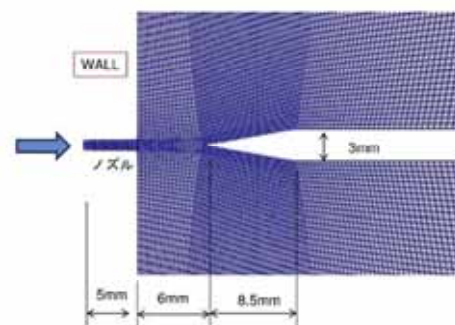


図2 流体解析のメッシュ

表1 流体解析の条件

項目	内容
解析手法	非定常解析
物性	標準大気
流入速度	5.0 m/s
乱流モデル	標準 Smagorinsky モデル
時間刻み	$1.0 \times 10^{-5}$ s

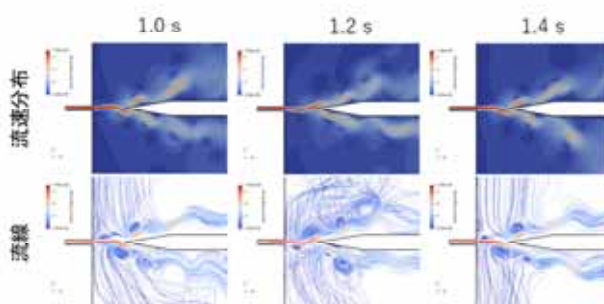


図3 流体解析の結果

手前と奥の面は周期境界条件を設定しています。解析条件を表1にまとめました。

## 3.2.2. 流体解析結果

流体解析の結果を図3に示します。エッジトーンの下上に渦が発生しています。



### 3.3. 四重極音源作成 (Advance/REVOCAP\_Prepost)

Advance/REVOCAP\_Prepost に付属するスクリプトを利用して、時系列の流体解析結果から Lighthill の乱流応力テンソルを計算し、四重極音源を作成します。なお、スクリプトは Advance/FrontNoise のユーザーにもご提供しております。任意の点において Lighthill の乱流応力テンソルをフーリエ変換した結果を図 4 に示します。

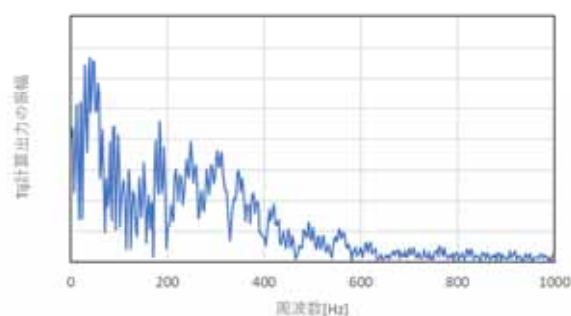


図 4 任意の点において Lighthill の乱流応力テンソルをフーリエ変換した結果

### 3.4. 音響解析 (Advance/FrontNoise)

#### 3.4.1. 音響解析条件

流体解析のメッシュを図 5 の左図に示します。境界条件は、左側の壁面とエッジ表面に完全反射、手前と奥に完全吸収、ドーム面に無限要素境界を設定しています。無限要素境界条件は球面のみに設定できます。無限要素境界条件は pc 境界として利用できるだけでなく、球面の延長上の外部領域において、通常では求めることが不可能な音圧レベル等の諸量を解析結果から算出できます。

音圧レベルの周波数特性を評価する点の位置を図 5 の右図に示します。p1 は解析領域内のため、解析結果に含まれていますが、点 p2 は無限要素境界を利用して結果を算出します。

可視化用のメッシュを図 6 に示します。Advance/FrontNoise に付属するツールを使用すると、解析領域と無限要素境界が設定された球面より外側の無限要素の領域内の音圧レベル等を別のメッシュにマッピングすることができます。青色は有限要素の領域で解析領域です。薄い赤色の領域は無限要素境界によって音圧レベル等が算出できる領域です。最後に赤色の領域は有限要素でも無限要素でもない領域で、音圧レベル等は算出できない領域です。

表 2 に音響解析の条件を示します。解析は 10 Hz から 1000 Hz まで、10 Hz 刻みで実施しました。

#### 3.4.2. 音響解析結果

130 Hz における音圧レベルのコンター図を図 7 に示します。図 6 で計算対象外となっている領域は 0 dB が与えられています。エッジトーンの上

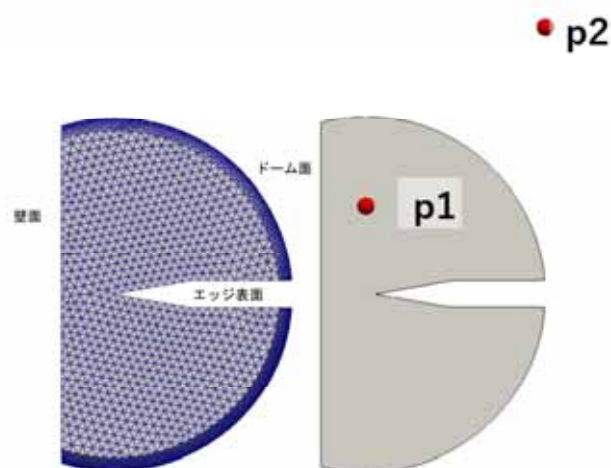


図 5 流体解析のメッシュと周波数特性評価位置

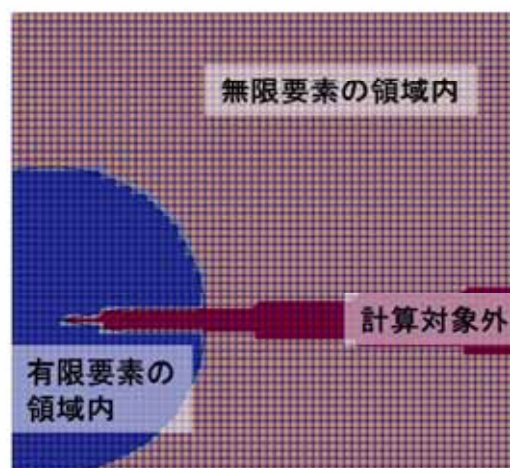


図 6 可視化用のメッシュ

表 2 音響解析の条件

項目	内容
空気密度	1.225 kg/m <sup>3</sup>
音速	340.0 m/s
計算周波数	10～1000 Hz
周波数刻み	10 Hz

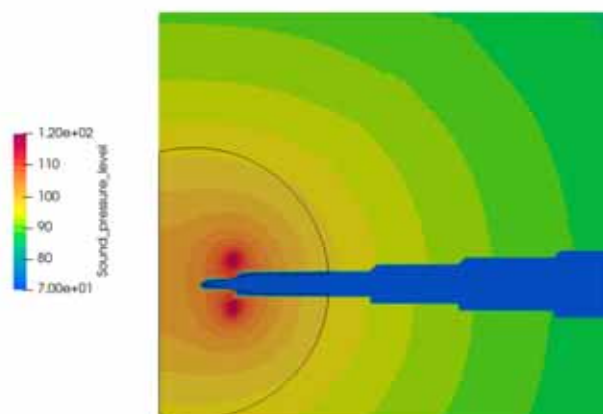


図7 音圧レベルのコンター図 (130 Hz)

下にそれぞれ音圧レベルが強い場所が観測されました。これは、130 Hz の音源となる速度場の乱れが当該位置に存在することを示しています。

観測点における音圧レベルの周波数特性を図8に示します。観測点 p1 と p2 ではおよそ 10 dB の差がありました。これは、音源から観測点までの距離による減衰です。

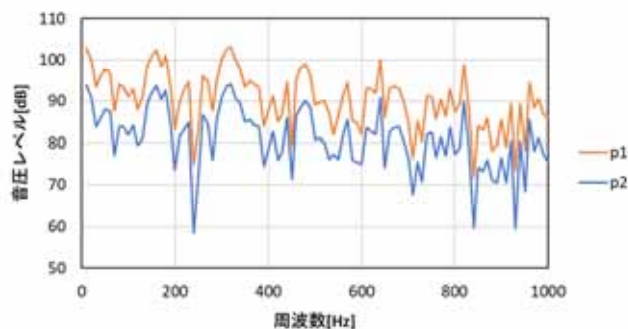


図8 観測点の音圧レベルの周波数特性

#### 4. まとめ

エッジトーンの事例を用いて、音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise と流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red 用いた、流体音響弱連成解析をご紹介しました。

## 【産業機械】スロットダイ塗布解析 [A/FMP]

## 1. 解析対象

スロットダイ塗布は、ダイヘッドから塗液を押し出ししながら基材にコーティングする方式です。

塗液の流動や膜厚は、塗液に働く表面張力・壁面の濡れ性（接触角）・粘性力・慣性力・圧力・重力のバランスにより決まります。ここでは、吸引減圧度の影響を解析し、実験結果[1]と比較します。

## 2. 使用ソフトウェア

気液二相流解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/MP

## 3. 解析モデル

表 1 解析条件

項目	値
流体	塗液と空気
塗液の物性値	密度 $1200\text{kg/m}^3$ 粘度 $0.025\text{Pa}\cdot\text{s}$ 表面張力係数 $0.061\text{N/s}$
気液二相状態	自由表面
気液二相流の扱い	二流体モデルとレベルセット法のハイブリッド
表面張力	CSF モデル
乱流モデル	なし
次元	2
格子数	9,582
時間刻み幅	$10^{-6}\text{s}$

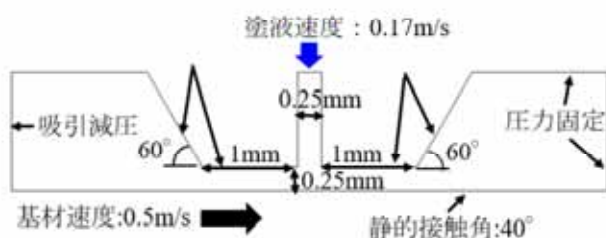


図 1 解析領域

## 4. 解析結果

吸引減圧度を変えて計算した塗液と速度分布を図2から図4に示します。青色が塗液を示します。

吸引減圧度が  $1500\text{Pa}$  の場合には塗布膜が妥当に形成されます（正常塗布）。

吸引減圧度が  $100\text{Pa}$  の場合にはノズル前方の圧力が大きすぎるため塗布液が前方にはみ出しています（空気同伴）。

吸引減圧度が  $2500\text{Pa}$  の場合にはノズル前方の圧力が小さすぎるために塗布膜が形成前にウェブに連行されています（濡れ上がり）。

計算結果は実験事実[1]を再現できています。

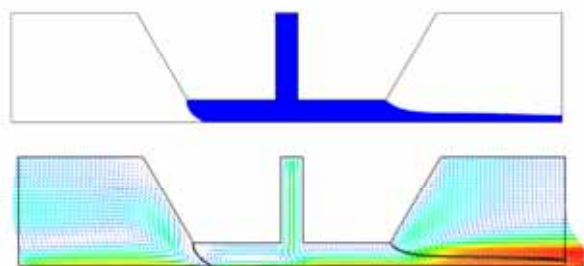


図 2 吸引減圧度:  $1500\text{Pa}$ （定常状態、正常塗布）

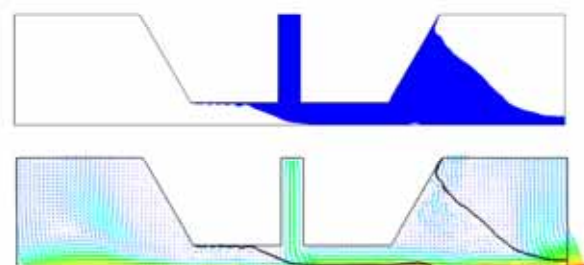


図 3 吸引減圧度:  $100\text{Pa}$ （過渡計算の途中、空気同伴）

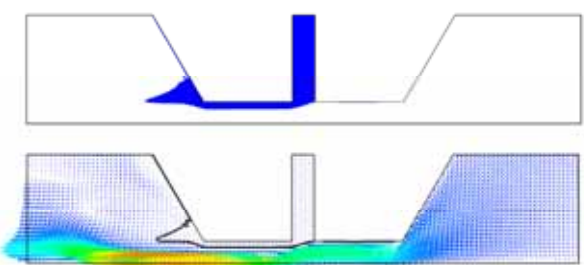


図 4 吸引減圧度:  $2500\text{Pa}$ （過渡計算の途中、濡れ上がり）

## 参考文献

- [1] 安原 賢, スロット塗布のビード解析(その 2), コンバーテック, 11 (2012), pp.69-73.



## 【産業機械】レーザー溶接の解析 [A/FMP]

## 1. 解析対象

銅板のレーザー溶接について、ビーム出力による溶融池形状の違いを解析します。

## 2. 使用ソフトウェア

気液二相流解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/MP

## 3. 解析モデル

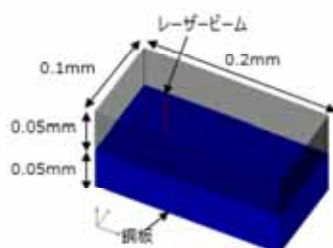


図1 解析領域

表1 解析条件

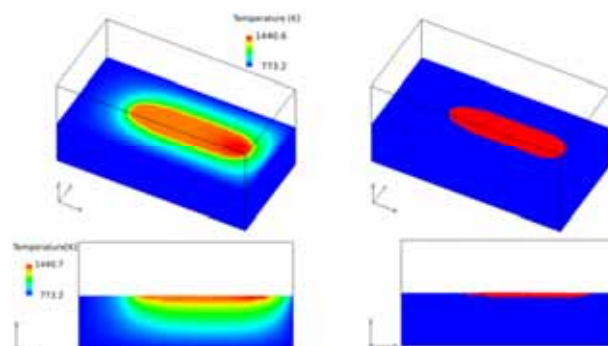
項目	値
ビーム	レーザービーム
ビーム径	100 $\mu$ m (ガウス分布)
ビーム出力	120W、200W
ビーム走査速度	5m/s
金属材料	銅
融点	1357.8K
沸点	2835.0K
融解潜熱	$2.127 \times 10^5$ J/kg
蒸発潜熱	$4.727 \times 10^6$ J/kg
初期温度	773.15K
底面と側面	no-slip、温度 773.15K
金属表面の放射率	0.3
気液二相状態	自由表面
相変化	溶融、蒸発、凝固
気液二相流の扱い	二流体モデルとレベルセット法のハイブリッド
表面張力	CSF モデル
反跳圧力	Anisimov モデル

蒸発速度	Anisimov モデル
ビーム照射に適合した並列計算	ビームの照射方向に直交する面に対して2次元で領域分割
メッシュサイズ	2 $\mu$ m
格子数	250,000 (100×50×50)
時間刻み幅	10 <sup>-9</sup> s

## 4. 解析結果

ビーム出力 120W の条件で 0.03ms における金属表面形状、温度分布、溶融分布を図2に示します。溶融部分は赤色、固体部分は青色で示しています。レーザー照射面は変形することなく溶融領域が進行しています。

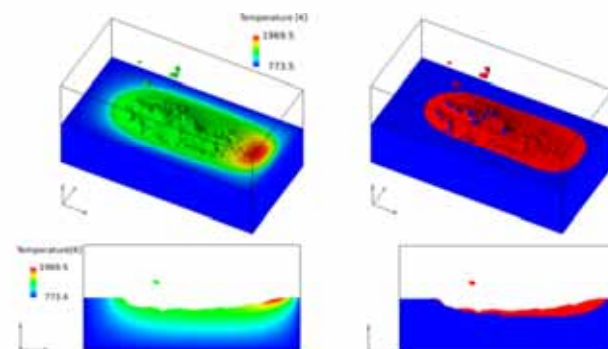
ビーム出力 200W の条件で 0.03ms における金属表面形状、温度分布、溶融分布を図3に示します。金属表面は乱れ、溶融金属の飛散（スパッタリング）が見られます。



(a)温度分布

(b)溶融/固体分布

図2 120W、0.03msの結果



(a)温度分布

(b)溶融/固体分布

図3 200W、0.03msの結果

## 【産業機械、材料・化学、原子力】衝突噴流による沸騰冷却の検証解析 [A/FMP]

### 1. 概要

水噴流を高温固体に衝突させ、固体を沸騰冷却する解析を行い、実験結果[1]と比較します。

### 2. 使用ソフトウェア

気液二相流解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/MP

### 3. 解析条件

図1に計算格子と境界条件を示します。Katto and Kunihiroの実験条件を使用し、加熱壁下面を温度固定の境界条件とします。加熱壁下面の温度をパラメータとし、時間進行法による定常解析を行い、表面（固体と流体が接する面）の温度と熱流束を求めます。ただし、固体は銅で熱伝導率が大きく、また厚さが小さいため、加熱壁下面と表面の温度差は小さくなります。

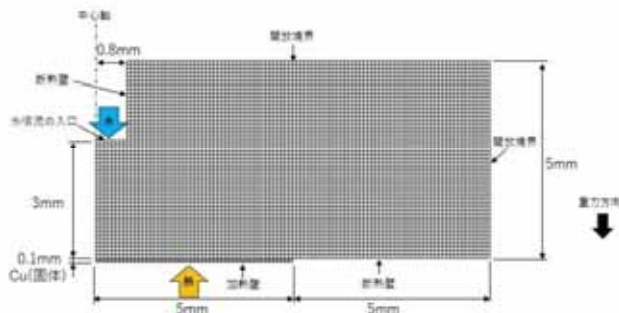


図1 計算格子と境界条件

表1 解析条件

解析条件	設定値
噴流口の半径	0.8 mm
流体	水と水蒸気
固体	銅
噴流水の速度	2 m/s
噴流水の温度	97 °C
飽和温度	100 °C
入熱範囲	中心軸から半径 5mm
加熱壁下面の温度	110, 115, 120, 122.5, 125, 127.5, 130 °C

気液二相流の扱い	二流体モデル
乱流モデル	k-ε モデル
重力加速度	9.80665 m/s <sup>2</sup>
次元	2 次元軸対称
半径方向の格子数	100
軸方向の格子数	52
時間刻み幅	10 <sup>-5</sup> s
計算する現象時間	4 s

### 4. 解析結果

中心軸上の固体表面における沸騰曲線を図3に示します。赤色のプロットはKatto and Kunihiroの実験結果で、青色のプロットは計算結果です。計算結果は実験結果と一致しています。

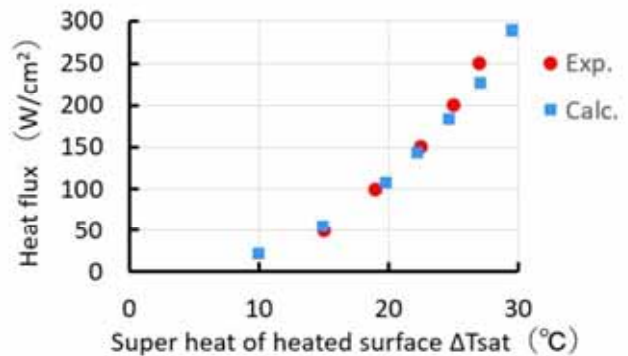


図2 衝突噴流における沸騰曲線

### 5. 本解析でわかったこと

衝突噴流による沸騰冷却において、Katto and Kunihiroの実験による沸騰曲線を再現できることが確認できました。

### 参考文献

- [1] Katto, Y. and Kunihiro, M., "Study of the mechanism of burn-out in boiling system of high burn-out heat flux", Bull.JSME, 16(1973)1357-1366.

## 【産業機械、材料・化学】曲がり管内の固気液三相流解析 [A/FMP]

### 1. 概要

曲がり管内を粉体と水と空気の三相が流れる解析事例をご紹介します。

### 2. 使用ソフトウェア

気液二相流解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/MP

### 3. 解析条件

図1に計算格子と境界条件を示します。

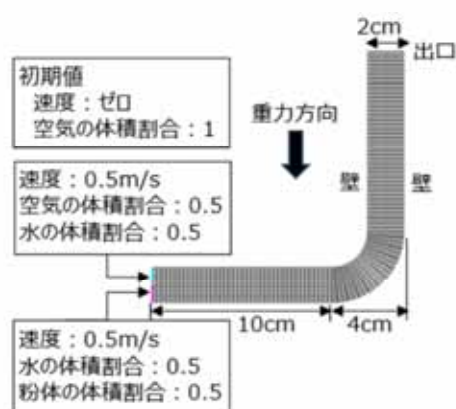


図1 計算格子と境界条件

表1 解析条件

解析条件	設定値
粉体の密度	5000 kg/m <sup>3</sup>
気体	空気
液体	水
粉体の粒子径	1mm
粉体の最密充填率	0.63
重力加速度	9.80665 m/s <sup>2</sup>
粉体同士および 粉体と壁面の衝突	グラニューエネルギー 保存方程式により考慮
固気の数値差	二流体モデルにより考慮
固液の数値差	二流体モデルにより考慮
気液の数値差	ドリフトフラックスモデル により考慮
次元	2
主流方向の格子数	160
壁面に垂直方向の	20

格子数	
時間刻み幅	10 <sup>-4</sup> s
現象時間	10 s

### 4. 解析結果

現象時間 10s の結果を図2に示します。

粉体はエルボで体積割合が最密充填率に達し静止領域が生じています。空気は内側の狭い空間を高速で流れています。

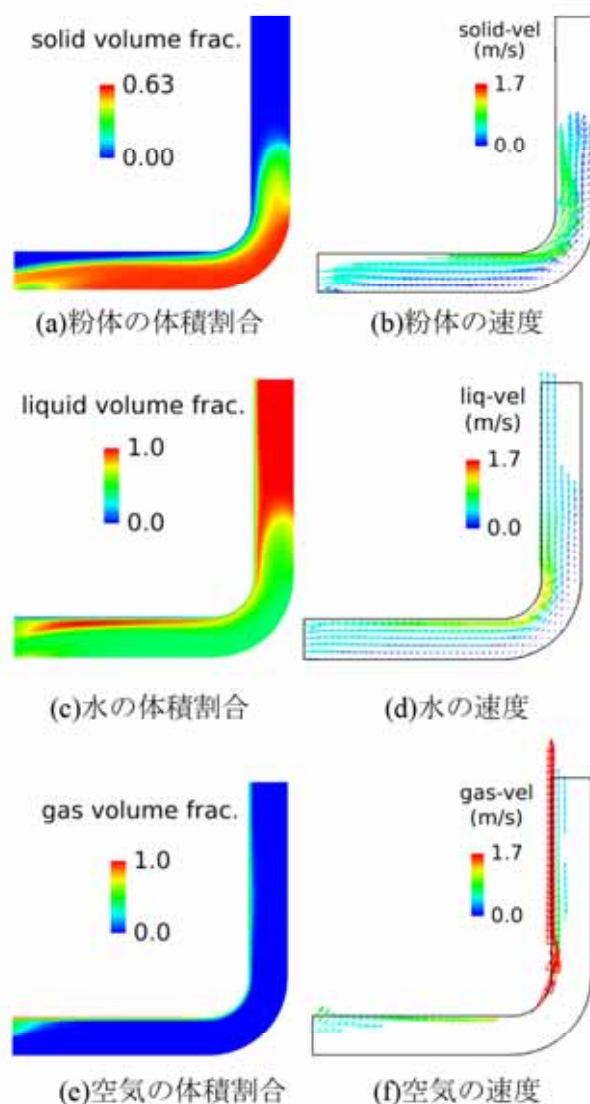


図2 計算結果

### 5. 本解析でわかったこと

曲がり管内における粉体と水と空気の体積割合と速度の分布が確認できました。



## 【産業機械、材料・化学】水と油の混合解析 [A/FMP]

## 1. 概要

水と油と空気の自由表面を考慮し、水と油の混合挙動を解析し、実験結果[1]と比較します。

## 2. 使用ソフトウェア

気液二相流解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/MP

## 3. 解析条件

図1に解析モデルと空気・水・油の初期値を示します。セパレータで水（青色）と油（赤色）を分け、それぞれ高さ4cmまで貯めた状態を初期値とします。セパレータを外し、水と油が密度差によって混合する非定常挙動を1.4秒まで計算します。

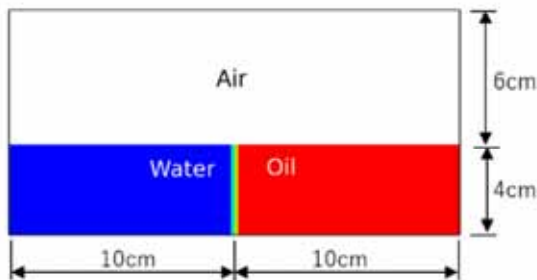


図1 解析モデルと空気・水・油の初期値

表1

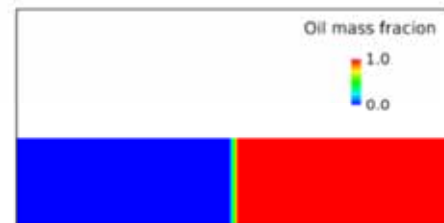
解析条件	設定値
解析領域	20 cm × 10 cm
空気の密度	1.166 kg/m <sup>3</sup>
空気の粘性係数	1.820x10 <sup>-5</sup> Pa・s
水の密度	998.2 kg/m <sup>3</sup>
水の粘性係数	1.002x10 <sup>-3</sup> Pa・s
油の密度	898.4 kg/m <sup>3</sup>
油の粘性係数	2.705x10 <sup>-2</sup> Pa・s
液相の初期高さ	4 cm
空気と液体（水と油）の自由表面の扱い	二流体モデル
水と油の自由表面の扱い	M-CICSAM と CSF モデルで表面張力考慮

空気と液体（水と油）の自由表面の扱い	二流体モデル
次元	2
水平方向の格子数	100（等分割）
垂直方向の格子数	50（等分割）
時間刻み幅	2x10 <sup>-4</sup> s
現象時間	1.4 s

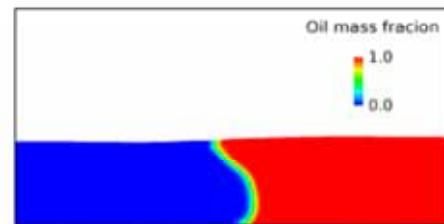
## 4. 解析結果

水と油と空気の界面形状の時間変化を図2に示します。参考文献[1]に示されている実験画像のように、油は水の上を広がり、水は油の下を広がる挙動を再現できています。

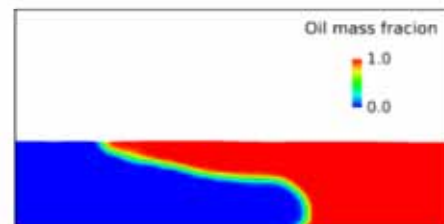
図2の1.4sに示すA点（左壁面から5cm）とB点（右壁面から5cm）における水と油の層厚の時間変化を図3に示します。A点の1.2s以降を除けば水と油の層厚の計算結果は実験結果を再現できています。



0s



0.2s



0.7s

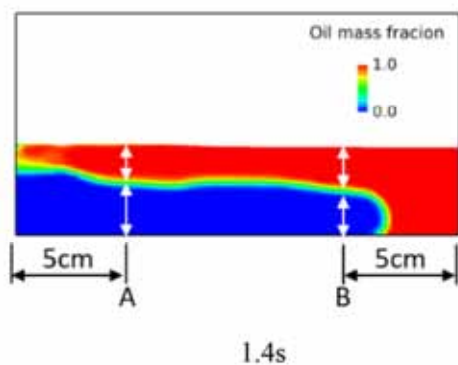


図2 水と油と空気の界面形状の時間変化

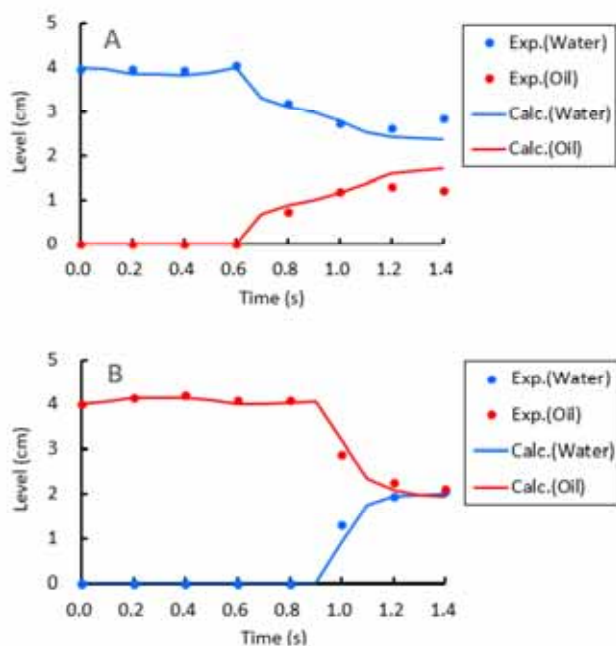


図3 水と油の層厚の時間変化

## 5. 本解析でわかったこと

水と油と空気の自由表面を考慮し、水と油の混合挙動を計算した結果、水と油が密度差によって混合する非定常挙動を再現できることが確認できました。

## 参考文献

[1] 荒木 健, 越村 俊一, 格子ボルツマン法による二相流れ場の数値シミュレーション, 土木学会東北支部技術研究発表会(平成 21 年度).

## 【産業機械、材料・化学】流動層の高濃度固気二相流解析 [A/FMP]

## 1. 概要

容器下部からの送風により粉体（固体粒子）を流動化させる固気流動層は化学反応、乾燥、吸着、熱交換、造粒、粒子の分離などに使用されています。ここでは、空塔速度を変えた流動層の解析を行い、膨張比の実験結果[1]と比較します。

## 2. 解析条件

図1に解析モデルと粉体体積割合の初期値を示します。高さ0.4mの充填層の底面から空気を流入させ、30秒まで解析を行います。

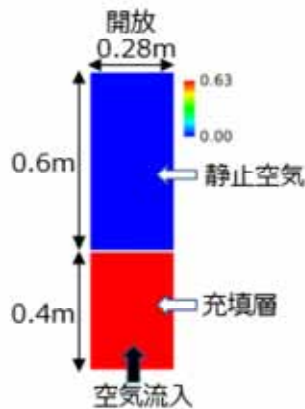


図1 解析モデルと粉体体積割合の初期値

解析条件	設定値
解析領域	0.28 m × 1 m
粉体の密度	2500 kg/m <sup>3</sup>
気体	空気
粉体の粒子径	350 μm
充填層の初期高さ	0.4 m
粉体の最密充填率	0.63
底面から流入する空気速度（空塔速度）	0, 0.1, 0.3, 0.5 m/s
底面から流入する空気の体積割合	1
粉体同士および粉体と壁面の衝突	グラニューエーネルギー保存方程式により考慮
水平方向の格子数	56（等分割）

垂直方向の格子数	200（等分割）
時間刻み幅	0.001 s
現象時間	30 s

## 3. 解析結果

図2と図3にそれぞれ流動層の膨張比と粉体体積割合の計算結果を示します。計算結果は実験結果の膨張比を再現できています。

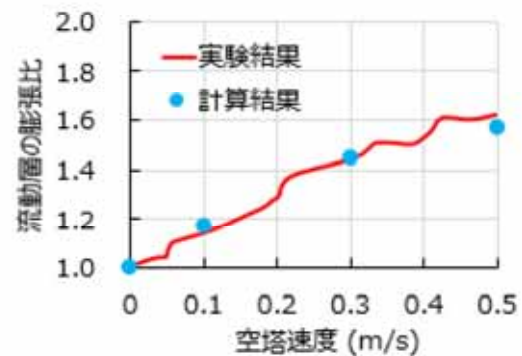


図2 空塔速度に対する流動層の膨張比

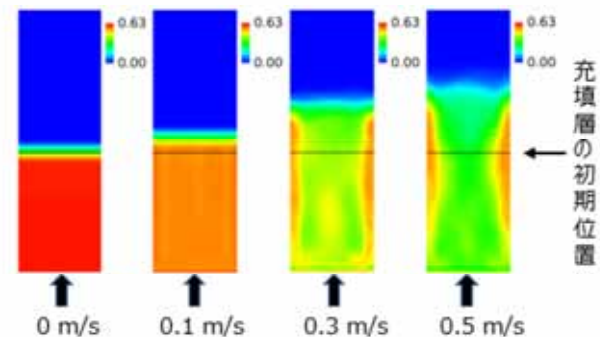


図3 粉体体積割合の計算結果(10秒から30秒間の時間平均分布)

## 4. 本解析でわかったこと

流動層の高濃度固気二相流解析において、流入する空気速度に対する流動層の膨張比を再現できることが確認できました。

## 参考文献

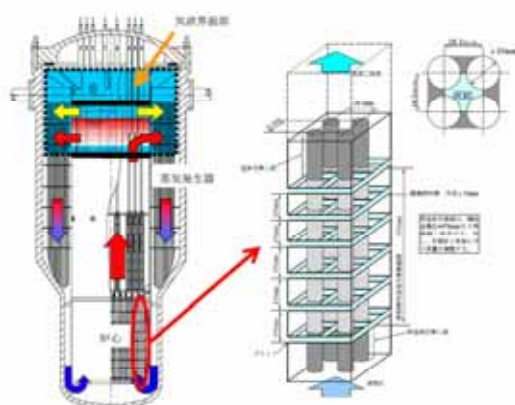
[1] M. Muthu Kumar, E. Natarajan, CFD simulation for two-phase mixing in 2D fluidized bed, Int J Adv Manuf Technol, 22(2009).



## 【産業機械、原子力】サブチャンネル内の気泡合体解析 [A/FMP]

## 1. 概要

高温高压二相自然循環炉の熱流動システムの評価手法を開発するために、六フッ化硫黄（気相）とエタノール（液相）という代替流体を用いて、高温高压二相自然循環炉の模擬試験装置内のサブチャンネルで気泡が発達する挙動を解析した例をご紹介します<sup>[1]</sup>。

図1 模擬試験装置<sup>[1]</sup> 図2 解析対象<sup>[1]</sup>

## 2. 使用ソフトウェア

気液二相流解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/MP

## 3. 解析条件

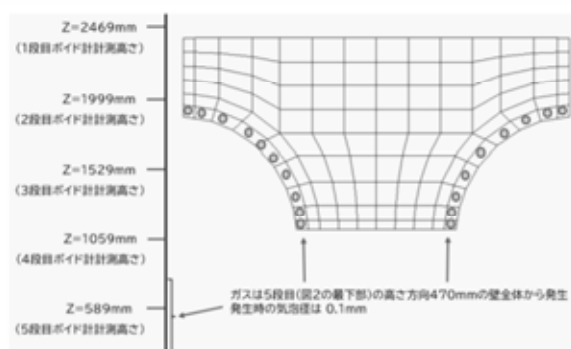


図3 計算格子とガス発生位置

表1 解析条件

解析条件	設定値
模擬燃料棒本数	2×2
模擬燃料棒外径	10mm

模擬燃料棒ピッチ	16.5mm
配置	正方配置
流路寸法	16.5mm×16.5mm
温度	一定
乱流モデル	k-εモデル
気相	六フッ化硫黄
液相	エタノール 0.99m/s
液体の流入速度	0.99m/s
ガス発生量	$2.67 \times 10^{-4} \text{ kg/s}$
気泡径	0.1mm、0.2mm、0.4mm、0.8mm、1.5mm、3mm、5mm の7グループ
格子数	81,150

## 4. 解析手法

## 4.1. グループ化とドリフト速度の計算

気泡径によって抗力・揚力・壁面潤滑力・乱流拡散力等が変わるため、気泡群は気泡径毎に異なる運動をします。しかし、全ての気泡の運動方程式を解くには計算機の負荷が大きすぎます。そこで、大小さまざまな気泡群を気泡径の範囲でグループに分けて、各気泡径グループ毎の運動を解きます。

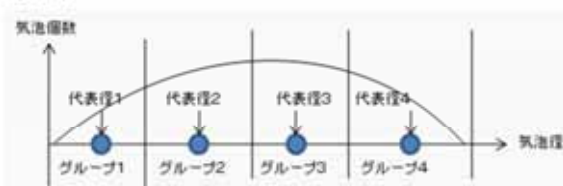


図4 大小さまざまな気泡群のグループ化

さらに計算時間を短縮するため、各気泡径グループの運動が力学的平衡状態にあると仮定して、各気泡径グループについて、気相全体の平均速度からの速度差を計算します。



図5 気相全体の平均速度からの速度差

## 4.2. 各気泡径グループの質量保存式の計算（ポビュレーションバランスモデル）

気泡合体による気泡径分布の変化を求めるために、気泡径グループ毎の質量保存式を解きます。グループ数に制限はなく、 $i$  番目の気泡径グループは以下の式で表現されます。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_i) + \nabla(\rho_g v_i \alpha_i) = S_i$$

$$S_{gi} = \rho_g \frac{\pi}{6} d_i^3 (B_{ci} - D_{ci} + B_{bi} - D_{bi})$$

$$B_{ci} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^i \sum_{k=1}^i Q_{jk}$$

$$D_{ci} = n_i \sum_{j=1}^N Q_{ij}$$

$$B_{bi} = \sum_{j=i+1}^N G_{ji} n_j$$

$$D_{bi} = n_i \sum_{j=1}^i G_{ij}$$

## 4.3. 気泡合体モデル

気泡がマイクロバブル化すると汚れや気泡の帯電が気泡合体に影響を与えますが、大きい気泡を扱うものとして、力学モデルを使用します<sup>[2]</sup>。

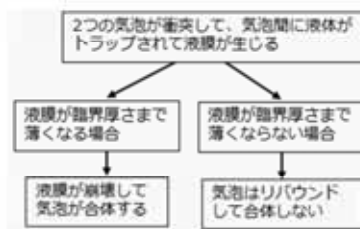


図6 気泡合体の力学モデル<sup>[2]</sup>

## 4.4. 気泡合体のソースターム

気泡合体のソースタームは、乱流運動・浮力・層流せん断による衝突頻度と液膜が臨界厚さに達するまで2つの気泡が接触する割合の積で計算します。

## 5. 解析結果

チャンネル平均気泡径の高さ方向分布に対する実験結果と計算結果の比較を図7に示します。計算結果は、サブチャンネル内で上昇に伴って気泡径が増大する実験値を再現できています。

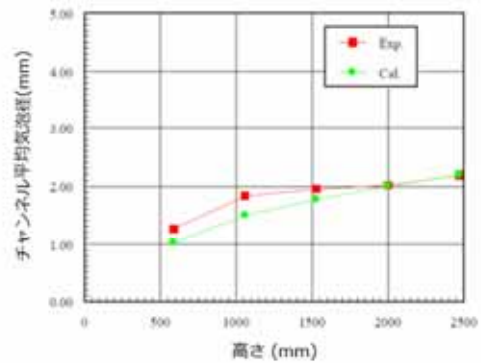


図7 チャンネル平均気泡径の高さ方向分布に対する実験結果と計算結果の比較<sup>[1]</sup>

平均気泡径の水平方向分布に対する実験結果と計算結果の比較を図8に示します。計算結果は、下段では気泡径が2mm以下の比較的小サイズであるため壁近傍に集まる「鞍型分布」を形成し、下流側に発達するにつれて合体によって気泡が大型化してサブチャンネル中心に集まる「砲弾型分布」を形成する実験結果を再現できています。

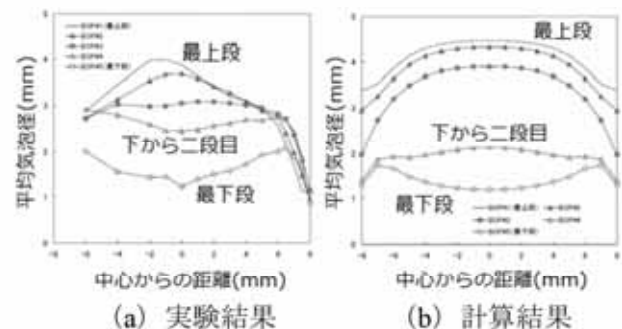


図8 平均気泡径の水平方向分布に対する実験結果と計算結果の比較<sup>[1]</sup>

## 6. 本解析で分かったこと

サブチャンネル内で発達過程の気泡径分布を概ね再現することが確認できました。

## 参考文献

[1] 革新的実用原子力技術開発費補助事業 平成18年度成果報告書概要版「高温高圧二相自然循環炉の熱流動シテム評価手法の開発」.

[2] Chen, P., J. Sanyal and M.P. Dudukovic, "Numerical Simulation of Bubble Columns Flow: Effects of Different Breakup and Coalescence Closures," Chem. Eng. Sci., 60, 1085(2005).

## 【産業機械、材料・化学、原子力】プール沸騰の検証解析 [A/FMP]

## 1. 概要

加熱面近傍以外が飽和温度である水の飽和プール沸騰を固体と気液二相流の熱連成で解析することにより表面熱流束を求め、沸騰曲線の実験結果[1]と比較します。

## 2. 使用ソフトウェア

気液二相流解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/MP

## 3. 解析条件

図1に解析領域を示します。加熱壁下面の温度をパラメータとし、時間進行法による定常解析を行い、表面（固体と流体が接する面）の温度と熱流束を求めます。



図1 解析モデル

表1 解析条件

解析条件	設定値
液体	水
気体	水蒸気
固体	銅
飽和温度	100 °C
銅板下面温度	104、120、160、1100°C
次元	2次元軸対称
格子数	11500
メッシュサイズ	0.2mm
時間刻み幅	$5 \times 10^{-5}$ s
現象時間	0.2 s

## 4. 解析結果

沸騰曲線の計算結果と実験結果[1]を図2に示します。表面熱流束は妥当に計算できています。

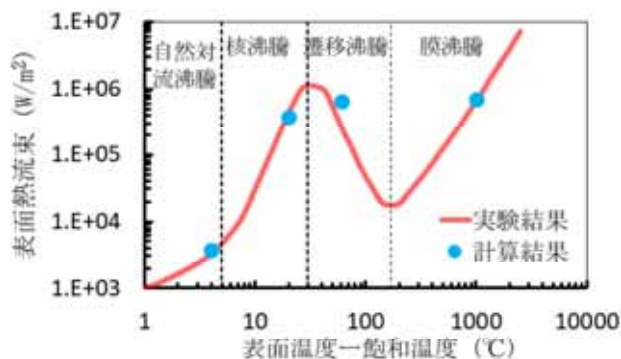


図2 沸騰曲線

上記の計算結果において、ボイド率と液相速度の時間平均分布を以下に示します。

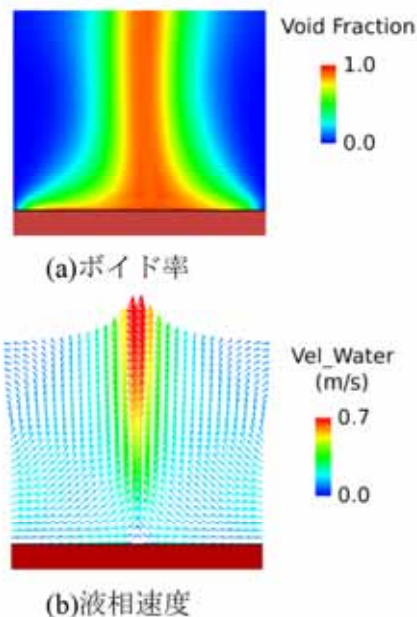


図3 核沸騰時の計算結果

## 5. 本解析でわかったこと

Advance/FrontFlow/MPの表面熱伝達モデルは、水の飽和プール沸騰において表面熱流束を妥当に計算できることが確認できました。

## 参考文献

[1] <https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/boiling-curve/>



## 【エネルギー、産業機械】LNG輸送システムの緊急遮断弁閉鎖時の水撃解析 [A/FNet/Ω]

### 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/Ω

### 2. 協力

民間エネルギー会社様

お客さまの声（担当者様より）

「以前よりも送液量が増えたにも関わらず、より高い安全性とより低い運転コストを両立する水撃対策を実現できた事が大きなメリットです。」

### 3. 解析モデル

図1のようなLNG輸送システムがあり、圧力制御弁（緊急時遮断）、緊急遮断弁、サブライン流量調節弁があります。このシステム上で、緊急遮断弁が閉まったときの水撃の解析を行います。通常運転時の各部の流量や圧力は入力与えます。

弁の遮断特性の詳細は不明であるため、解析条件として与えることとします。



図1 LNG輸送システムのモデル図

### 4. 解析目的

緊急遮断弁閉鎖時の水撃値をシミュレーションを用いて予測し、安全評価を行います。これを利用して運転条件を実績から大きく変更した場合の安全評価に役立てます。

### 5. 解析結果

LNG輸送システムの実機試験結果を図2に、

シミュレーション時刻=100秒で緊急遮断弁を閉じたときの圧力と流量の時系列試験解析結果を図3に、試験解析に用いた遮断条件を図4に示します。

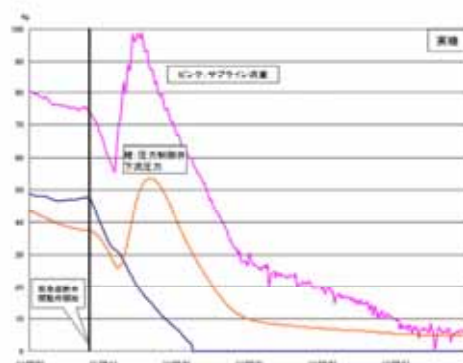


図2 実機試験結果  
(民間エネルギー会社様ご提供)

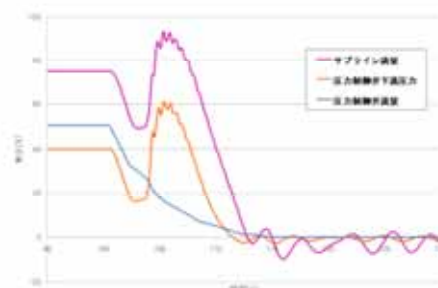


図3 試験解析結果

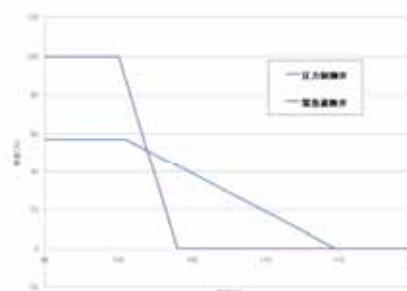


図4 試験解析に用いた遮断条件

### 6. LNG輸送システムの緊急遮断弁閉鎖時の水撃解析のまとめ

解析と実機試験を比較すると、緊急遮断弁閉鎖時のLNG輸送システムの圧力・流量の振舞いをよく捉えることができ、圧力制御弁下流圧力ピーク値も10%程度安全側に評価しています。

## 【建築土木、エネルギー、産業機械】ポンプ機能喪失・回復時の液柱分離・再結合解析 [A/FNet/Ω]

### 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/Ω

### 2. 解析目的

ポンプが停電により機能を喪失し、電源復旧により機能を回復した場合の圧力を解析します。参考文献との比較を行い、Advance/FrontNet/Ωの解析精度を確かめます。

### 3. 解析モデル・解析条件

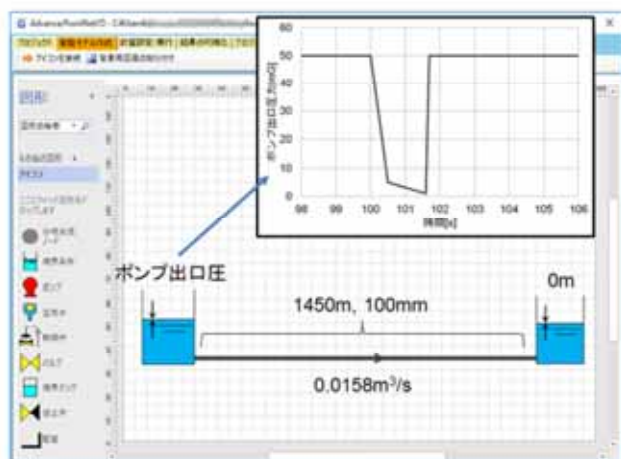


図1 解析モデルと解析条件

### 4. 解析結果

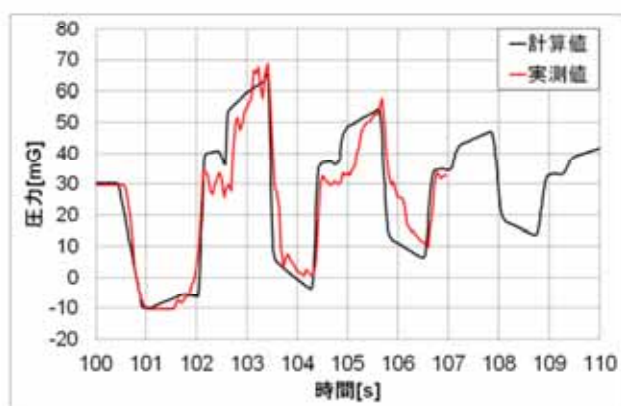


図2 解析結果と測定値の比較  
(上流から 580m の位置)

### 5. ポンプ機能喪失・回復時の液柱分離・再結合解析まとめ

ポンプの機能喪失・回復によるポンプ出口圧力の経時変化を境界条件として与え、水撃過渡解析を行い、結果を参考文献と比較しました。Advance/FrontNet/Ωによる計算値と参考文献中の実測値はほぼ一致し、液柱分離モデルの妥当性や解析精度を確認できました。

### 6. 参考文献

E.B.Wylie and V.L.Streeter : “Fluid transients in Systems”, Prentice-Hall Inc. (1993).

## 【建築土木、エネルギー、産業機械】ポンプトリップ解析 (低い位置の空気弁考慮) [A/FNet/Ω]

### 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア

Advance/FrontNet/Ω

### 2. 解析目的

低い位置に空気弁を設置した場合のポンプトリップの解析を行い、参考文献と比較します。

### 3. 解析モデル・解析条件

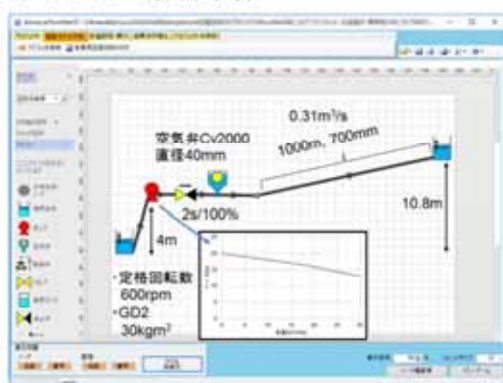


図1 解析モデルと解析条件

### 4. 解析結果

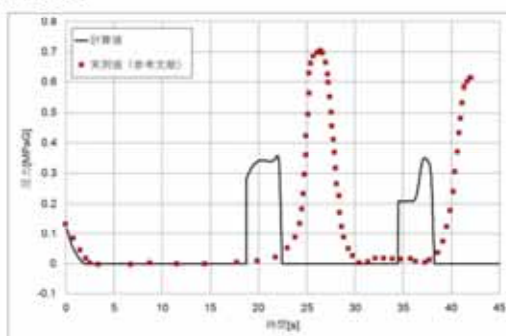


図2 解析結果 (圧力時系列)

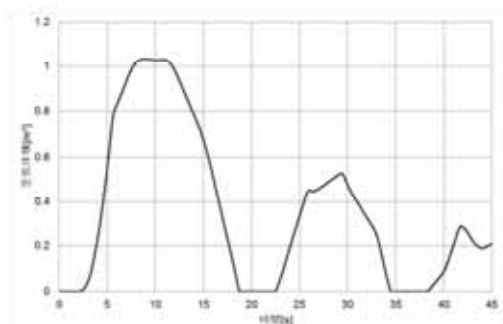


図3 解析結果 (管内空気体積)

### 5. ポンプトリップ解析 (低い位置の空気弁考慮)

#### まとめ

空気弁を考慮したポンプトリップ解析を行いました。空気の吸い込み/吐き出しや、圧力上昇を模擬することができ、解析と実測値の傾向は一致しています。

負圧を抑える効果をよく再現できているため、実用的には問題ないと思われるが、空気吐き出し時の圧力上昇は実測値が解析値の約2倍程度となっており、推定した諸元の見直しや解析精度は今後の課題です。

### 6. 参考文献

中田信夫、三輪俊夫、田中和男、藤原実, " 空気弁による水撃防止", 荏原時報, 第114号, p39 - 43 (1980)



## 【建築土木、エネルギー】ポンプトリップ解析(高い位置の空気弁考慮) [A/FNet/Ω]

### 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/Ω

### 2. 解析目的

空気弁は負圧が発生しやすい高い位置に設置されることが多いです。高い位置に空気弁が設置された場合のGD2が異なる2つのポンプトリップの計算事例を比較します。

### 3. 解析モデル・解析条件

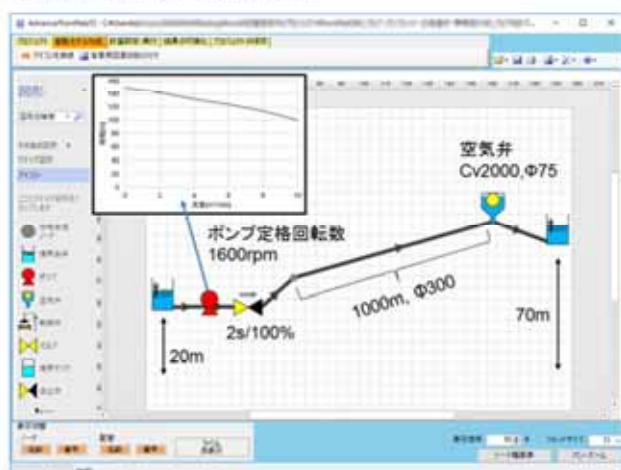


図1 解析モデルと解析条件

### 解析結果

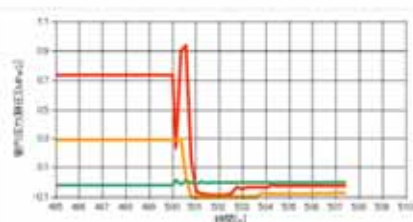


図2 解析結果(圧力時系列)  
GD2=1kg・m²の場合

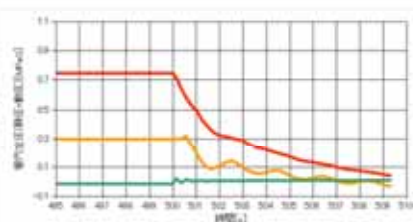


図3 解析結果(圧力時系列)  
GD2=30kg・m²の場合

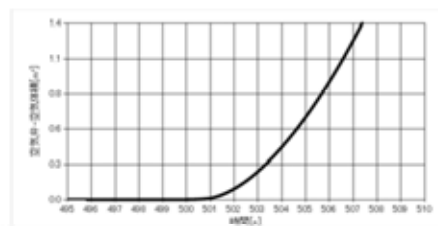


図4 解析結果(空気体積時系列)  
GD2=1kg・m²の場合

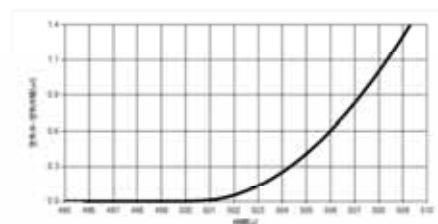


図5 解析結果(空気体積時系列)  
GD2=30kg・m²の場合

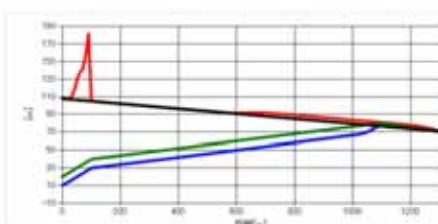


図6 解析結果(動水勾配線)  
GD2=1kg・m²の場合

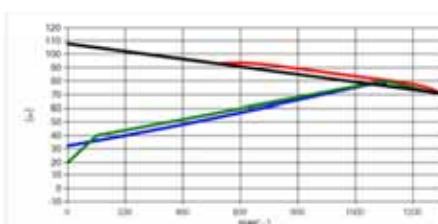


図7 解析結果(動水勾配線)  
GD2=30kg・m²の場合

### 4. ポンプトリップ解析(高い位置の空気弁考慮) まとめ

2種類のGD2に対してポンプトリップ解析を行い、動水勾配線を比較した。GD2=1kg・m²の場合は、負圧が発生し水撃が出ているが、

GD2=30kg・m<sup>2</sup>の場合は負圧が抑えられ水撃が出ていないことが分かります。Advance/FrontNet/ $\Omega$ によるポンプトリップ解析の基本性能を確認することができました。

なお、Advance/FrontNet/ $\Omega$ は基本的に液体単相流れの解析を目的としており、一時的な空気吸い込みには対応していますが、気液界面の追従の機能はありません。

そのため、本例のような場合、一般には境界の高さに応じて空気吸い込み量および水の界面位置が決まるのに対して、計算では1メッシュの体積を超える空気量を空気弁が吸い込んだ場合に、界面追従を行っていないことから計算精度が保証されないため計算を終了することとしています。

## 【エネルギー、産業機械】圧力制御弁PID値検討解析 [A/FNet/Ω]

## 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/Ω

## 2. 解析目的

流量が急増した場合にいくつかのPID値に対する圧力制御弁の応答を調べます。制御ブロック図は1次遅れとPIDを考慮します。

## 3. 解析モデル・解析条件

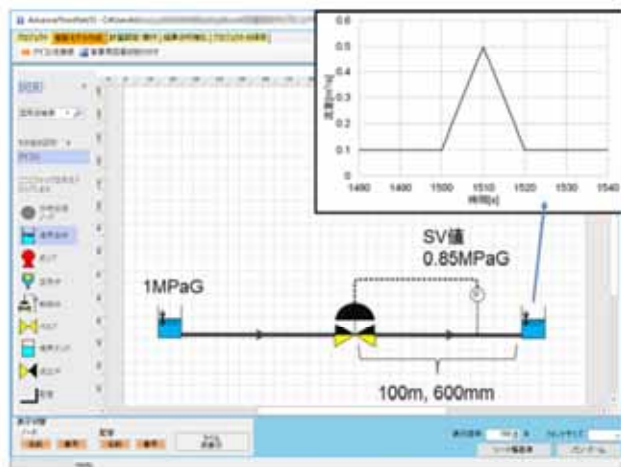


図1 解析モデルと解析条件



図2 制御ブロック図

## 5. 圧力制御弁PID値検討解析まとめ

流体解析と制御系の連成解析を行い、PとIを振ってバルブの応答による圧力変化を調べました。比例ゲインが小さく、積分時間が小さいと圧力応答が遅く、比例ゲインが大きく、積分時間が大きいと圧力応答が速かったです。

また、比例ゲインが小さく、積分時間が大きいと圧力は振動的になり、比例ゲインが大きく、積分時間が小さいと圧力のアンダーシュート/オーバーシュートが大きい結果となりました。以上の結果はPIの基本性能を表しています。

## 4. 解析結果

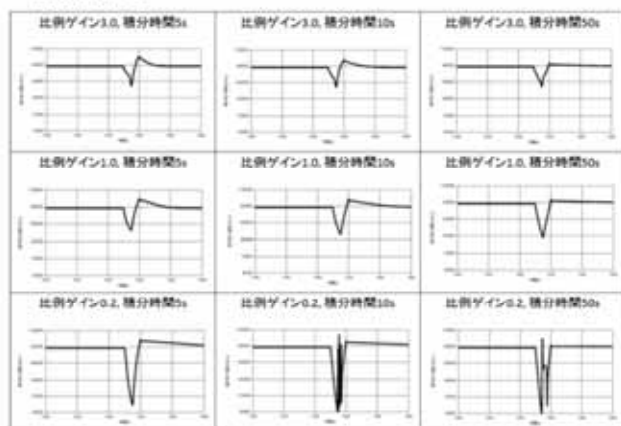


図3 各PIに対する解析結果（圧力時系列）



## 【産業機械、エネルギー】エアチャンバー(空気室)を考慮した場合のポンプトリップ解析 [A/FNet/Ω]

### 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/  
Ω

### 2. 解析モデル・解析条件

図1のようなポンプ2台並列、ポンプ出口に逆止弁があり、エアチャンバーを設置している延長約1kmの管路系冷却系配管に対し、ポンプトリップを想定した過渡解析を行います。計算条件は図2としました。

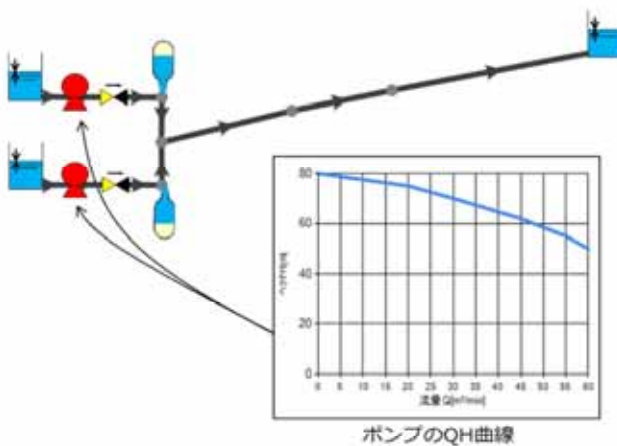


図1 解析モデル図

項目	説明
解析モデル	液注分離モデル
弁	逆止弁は瞬時に閉鎖
管形状	管長 1000m、管径 1100mm、 管厚 10mm
管摩擦モデル	Hazen-Williams( $C=110$ )
管種	Steel
ポンプ	定格揚程 60m、定格流量 $45m^3/min$ 、定格効率 0.8、定 格回転数 990rpm、 $GD^2=1000kgm^2$
エアチャンバー	体積 $60m^3$

図2 計算条件

### 3. 解析結果

図3に動水勾配線を示します。エアチャンバー設置後のほうが最高圧力は低くなっており、その効果が分かります。

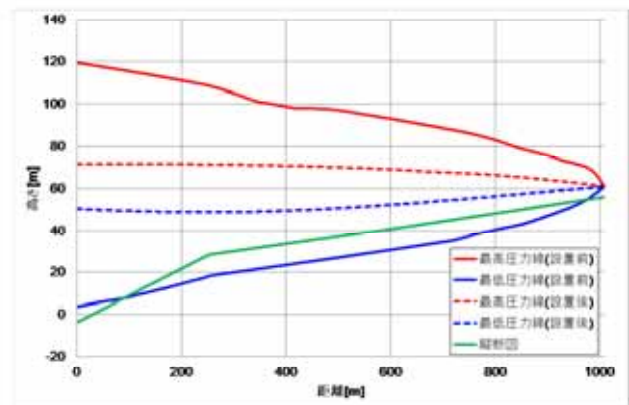


図3 動水勾配線

### 4. 参考文献

Eugen Ruus, Charts for water hammer in pipelines with air chambers, Canadian Journal of Civil Engineering, (1977)

## 【建築土木、エネルギー、産業機械】

### ポンプ完全特性を考慮した夜間揚水発電ポンプのトリップ解析 [A/FNet/Ω]

#### 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/Ω

#### 2. 解析モデル・解析条件

図1のように、ダムでは電力消費量の少ない夜間に水をくみ上げ、電力消費量の多い昼間に備えています。このような管路系においてポンプが電力喪失によりトリップした場合の解析を行います。ポンプの条件は図2にあるように完全特性を考慮しました。

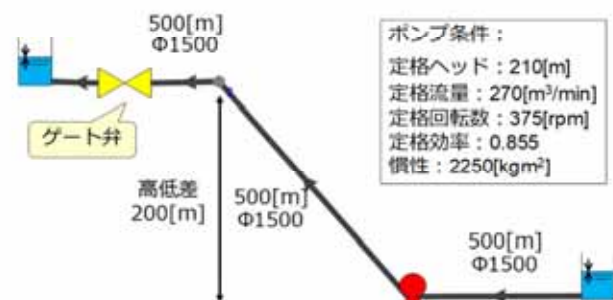


図1 プラントの解析モデル図

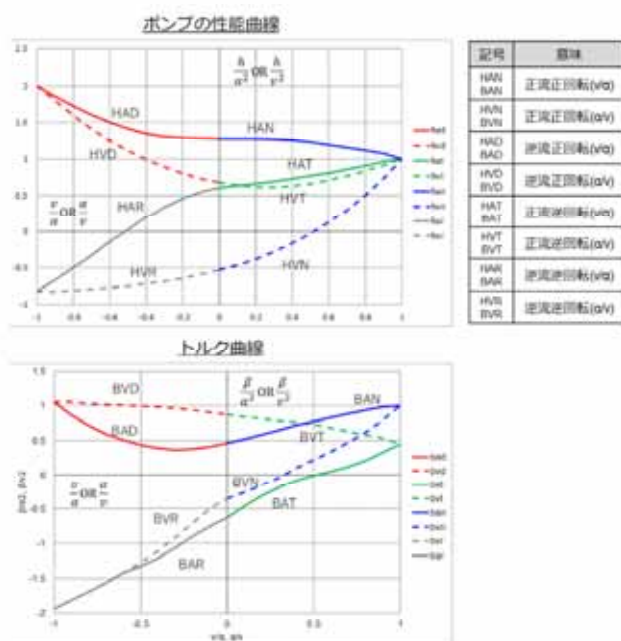


図2 ポンプ完全特性（参考文献より）

#### 3. 解析結果

時刻 200 s にポンプトリップが起こった場合の計算結果を以下に示します。図3は各部の圧力の時系列です。赤線がポンプ上流側、黄線が斜め管、緑線がゲート弁上流、青線がゲート弁下流を表します。210 s あたりで完全特性の HAD-BAD（逆流正回転  $v/\alpha$ ）領域から HVD-BVD（逆流正回転  $\alpha/v$ ）領域への遷移が起こっています。250 s あたりから逆回転領域に入ります。図4がポンプ揚程の時系列、図5、図6がそれぞれヘッド曲線およびトルク曲線上の作動点の推移となります。図7がコンター表示による圧力変化、図8が動水勾配線となります。上り配管の頂部付近で圧力上昇がみられます。また、水平管では飽和蒸気圧に達している領域が認められます。

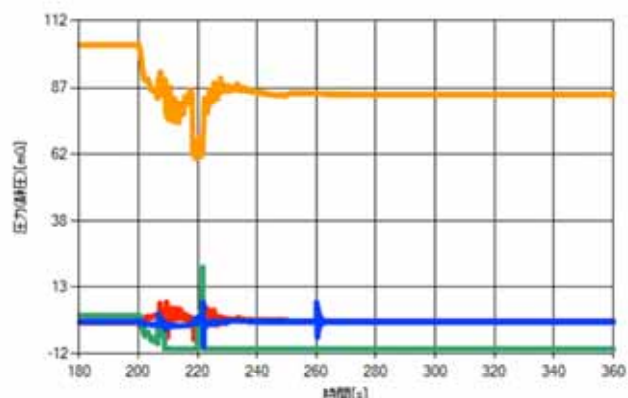


図3 計算結果（各部配管圧力）

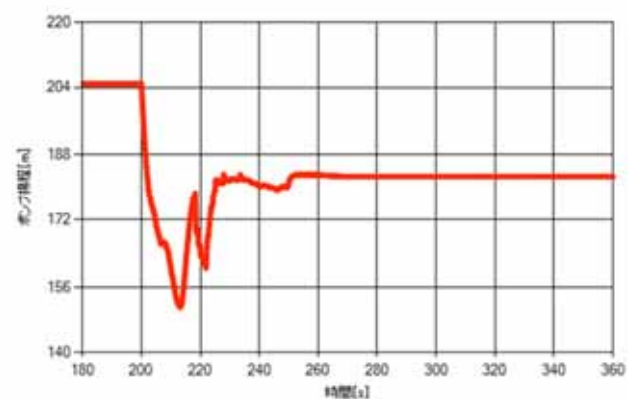


図4 計算結果（ポンプ揚程）

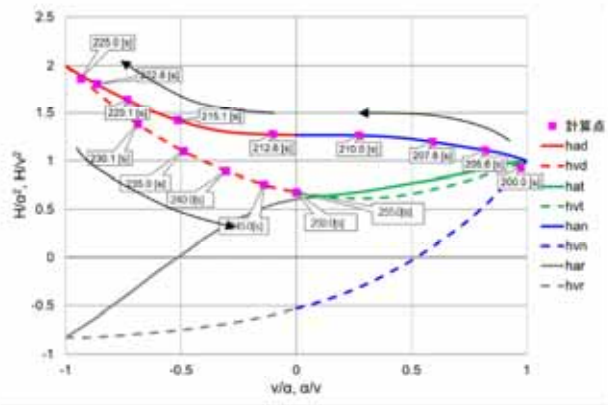


図5 計算結果 (ヘッド曲線)

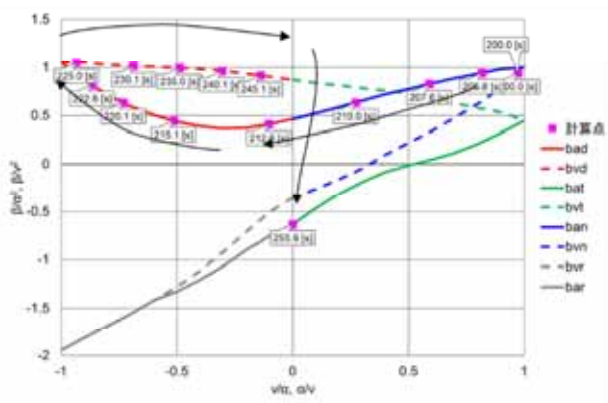


図6 計算結果 (トルク曲線)

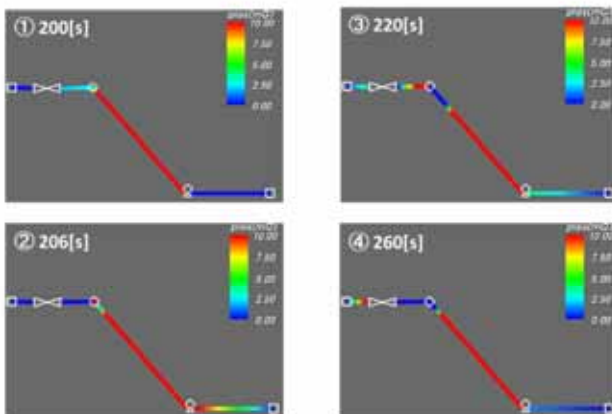


図7 計算結果 (圧力コンター)

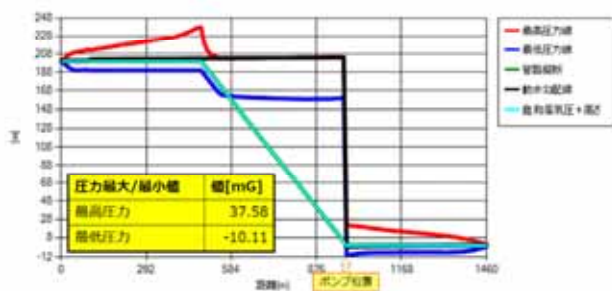


図8 計算結果 (動水勾配線)

#### 4. 参考

Imtiaz K. Madni and eric Cazzoli, NUREG/CR-0240  
BNL-NUREG-50859(June 1978)



## 【エネルギー、産業機械】バルブ遮断時の圧力波伝播解析 [A/FNet/Γ]

## 1. 解析目的

バルブ遮断時の圧力波の伝播の解析精度を調べます。また、陽解法と陰解法の解法の比較を行い、計算精度や計算時間を比較します。

## 2. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/Γ

## 3. 協力

測定条件および測定値は重工メーカー殿よりご提供いただきました。

## 4. 解析モデル・条件

下図のように、タンク出口に分岐管があり、一方は閉止端です。

もう一方に電動閉止弁が設置されています。

時刻 10s に電動閉止弁を 0.05s で全閉したときの各部圧力変化を調べます。

測定器が P1～P5 の位置に取り付けられています。作動流体は空気です。

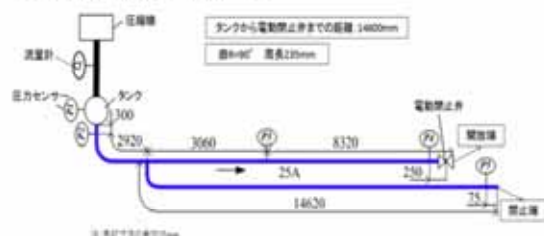


図1 試験条件

## 5. Advance/FrontNet/Γ GUI による設定画面



図2 Advance/FrontNet/Γ による計算モデル

## 6. 解析結果と計算時間

図3に計算結果を示します。測定値は四角で示されています。陽解法による結果は実線(赤)、陰解法の Courant 数 0.1 の結果は実線(青)、陰解法の Courant 数 1.0 の結果は実線(緑)で示されています。

陽解法と陰解法の Courant 数 0.1 の結果はほぼ一致し、第1ピークで実測値を上回っているものの、その後の圧力波をよく再現しています。陰解法の Courant 数 1.0 の結果は第3ピークまで実測値を再現し、その後はなまっています。

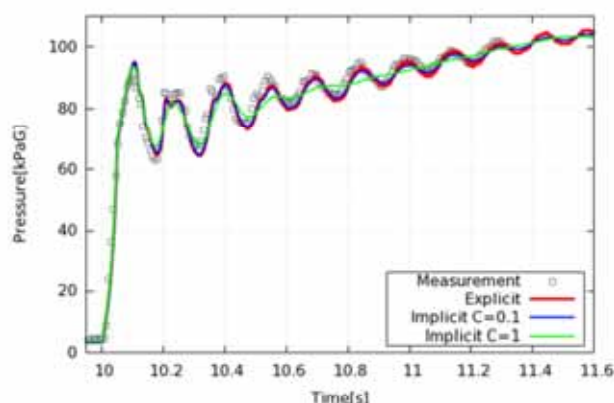


図3 計算結果の比較 (P4 の位置)

表8に解法と計算時間の比較をまとめます。陰解法は陽解法の 0.1～0.5 倍の計算速度でした。

表8 解法と計算時間の比較

解法、計算条件	評価	計算時間の比率
陽解法 Courant 数 0.99(※1)	実測値をよい精度で再現	1
陰解法、Courant 数 0.10(※2)	陽解法と同等	0.5
陰解法、Courant 数 1.00(※2)	圧力波は第3ピークまでほぼ再現、その後鈍る	0.1

注) (※1) 音速基準、(※2) 流速基準

## 7. バルブ遮断時の圧力波伝播解析まとめ

バルブ遮断時の圧力波伝播解析を行い、計算結果は測定値をよく再現することを確認しました。

陽解法と陰解法の比較を行い、Courant 数が小さい場合は陰解法が陽解法の結果をよく再現できることが分かりました。また、陰解法では陽解法の数倍の速さで計算が可能でした。

## 【エネルギー、産業機械】コークス炉におけるブロワトリップ時のガスホルダー影響検討 [A/FNet/Γ]

### 1. 概要

ブロワトリップ時において、ガスホルダー有無による管路系への影響を検討します。

### 2. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/Γ

### 3. 解析モデルと条件（ガスホルダー無し）

図 1 に示しますように、左側から C ガスが流れ、ブロワで昇圧しているコークス炉の管路系を対象とします。ブロワが時刻 100 s に時定数 0.1 s でトリップした場合の管路系への影響を調べます。

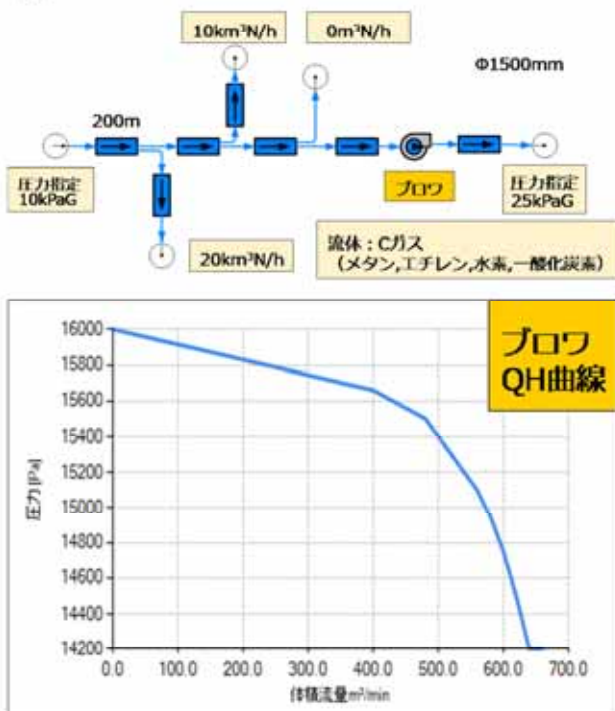


図 1 解析モデルと解析条件

### 4. 解析結果（ガスホルダー無し）

図 2 に計算結果（圧力の時間変化）と対応する位置を示します。

ブロワ出口（赤）では、ブロワ動力喪失で昇圧が下がり、圧力が下がっています。

ブロワ入口（緑）では、ブロワ動力喪失で流れが行き詰まり、慣性によって圧縮され、圧力上昇が

起こっています。

消費点付近（黒）には、ブロワ入口の圧力波が伝播しています。

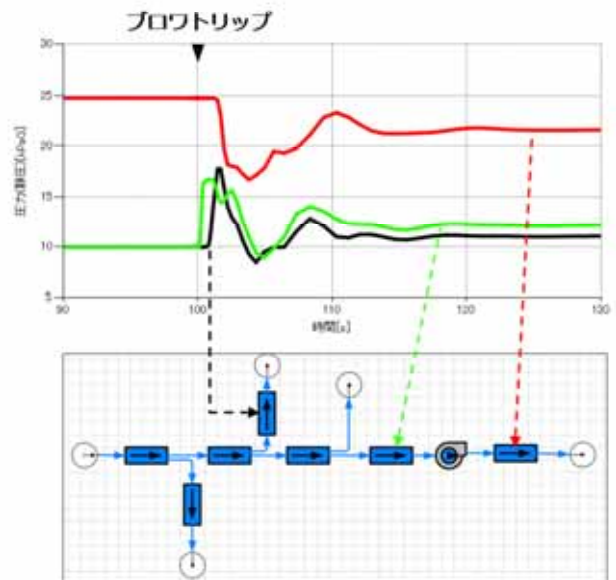


図 2 計算結果（圧力の時間変化）とその位置

図 3 に計算結果（流量の時間変化）を示します。ブロワ出口（赤）では、ブロワ動力喪失で昇圧が下がり、流量が減り、出口圧力境界からの逆流が起こっています。ただし、本計算では下流側の圧力が一定であることを想定しています。

ブロワ入口（緑）でも、時間差で逆流が起こっています。

消費点付近（黒）には、圧力波の影響で流量変動が起こっていますが、やがて下流側の流量境界の指定値に至っています。

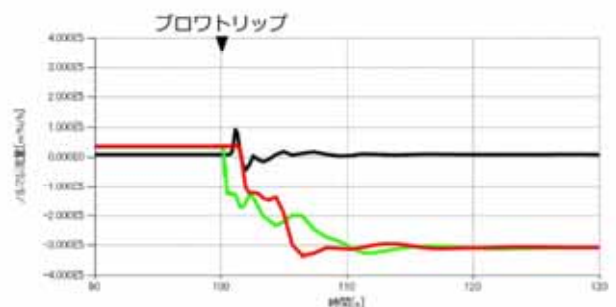


図 3 計算結果（流量の時間変化）

## 5. 解析モデルと条件（ガスホルダー有り）

図4に示しますように、ガスホルダーを設置します。その他の計算条件は同じで、時刻 300 s にブロワがトリップします。

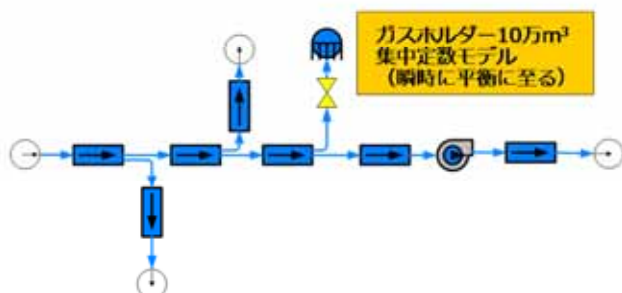


図4 解析モデルと解析条件

## 6. 解析結果（ガスホルダー有り）

図5に計算結果（圧力の時間変化）を示します。ブロワ出口（赤）では、ブロワ動力喪失で昇圧が下がり、圧力が下がっています。ブロワ入口（緑）では、ブロワ動力喪失で流れが行き詰まり、慣性によって圧縮され、圧力上昇が起こっています。消費点付近（黒）には、ガスホルダーがないときに比べブロワ入口の圧力波が伝播していないことが分かります。

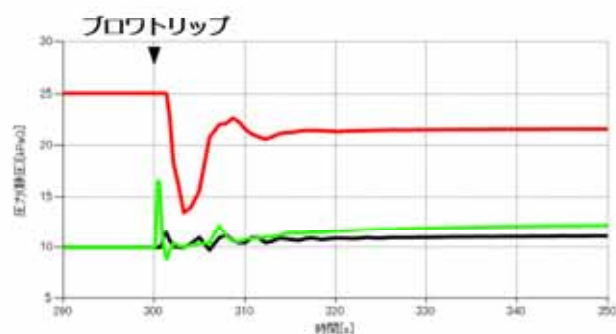


図5 計算結果（圧力の時間変化）

図6に計算結果（流量の時間変化）を示します。ブロワ出口（赤）、ブロワ入口（緑）の逆流傾向はガスホルダー無しと同様ですが、逆流の流量値が変わっています。ガスホルダー流量（流入が正符号）が青線で示されています。ガスホルダーにガスが流入していることが分かります。

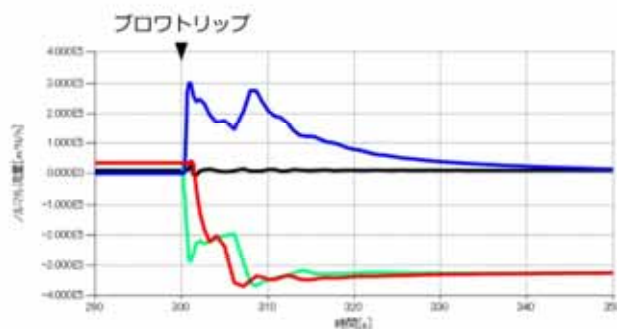


図6 計算結果（流量の時間変化）

図7に計算結果（ガスホルダーの圧力）を示します。

定常時（ブロワトリップ前）、ガスホルダーは 10 kPaG 付近で静定しています。

ブロワトリップ後、ガスホルダー内は圧力が上昇し、ガスが流入します。

これらの効果により、消費点への影響を緩和していることが分かります。

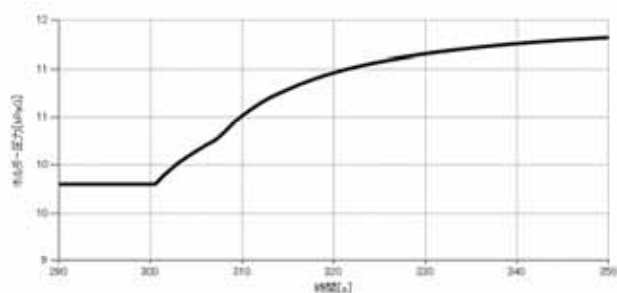


図7 計算結果（ガスホルダーの圧力）



【産業機械、建築土木、環境・防災】

## ローラミルによる分級のシミュレーション[A/DEPTH]

### 1. 解析对象

空気／水の影響を考慮したローラミルによる分球プロセス

## 2. 使用ソフトウェア

ウェア Advance/DEPTH

### 3. 協力

事例提供：海洋研究開発機構（JAMSTEC）

#### 4. 背景

・Advance/DEPTH は、離散要素法 (DEM) を主体とした大規模粒子法計算ソフトウェアです。

・DEM は粒子法的一种で、個々の粒子の運動の摩擦接触を考慮した運動方程式を解くことで **Langrange** 的に追跡し全体の運動を表す方法です。粉体工学における最適化手段の柱の一つであり、機械工学、建築土木、環境防災において摩擦要素の集団運動という普遍的なテーマを扱うことが可能です。

・また、Advance/DEPTH はその開発元である海洋研究開発機構による分散メモリ環境における独自の動的負荷分散機能を利用することが可能で大規模粒子を高速に計算することができます。

・2022年にリリースした旧バージョンではDEM粒子のみをシミュレーション対象としていましたが、2024年リリースの新バージョンでは、空気をCFDで取り扱うことによりDEM粒子と空気の固気2相シミュレーションが可能になりました。また水をSPH粒子として取り扱うことによりDEM粒子と水の固液2相シミュレーションも可能となりました。

## 5. 解析モデル

図 1 に DEPTH によるシミュレーションの流れを示します。構造物 (図 2・3 の升やスクリュウ等) は STL 形式の CAD ファイルをそのまま用いることができます。シミュレーションの詳細条件は、「Input\_Parameter.txt」と呼ばれる 1 つの入力ファイルのみで指定することが可能です。そこでは CFD や SPH と連成するか、構造物、DEM 粒子や水の初期配置、その他表 1 に示す項目を指定しています (Advance/DEPTH の機能詳細は表 2 に示します)。

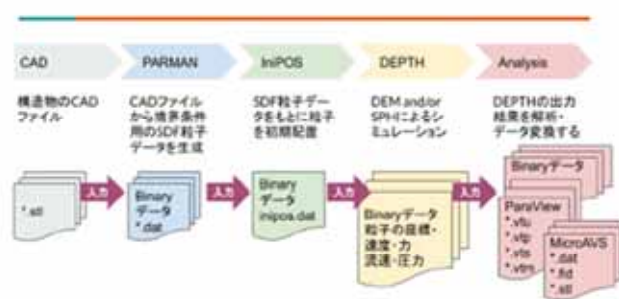


図 1 Advance/DEPTH シミュレーションの流れ

## 6. 解析結果

計算結果を図2（固気2相）、図3（固液2相）に示します。ローラを78.5 rad/s（約750 rpm）で動作させた2.5秒後の結果になります。図2のカラーは速度を示しています。

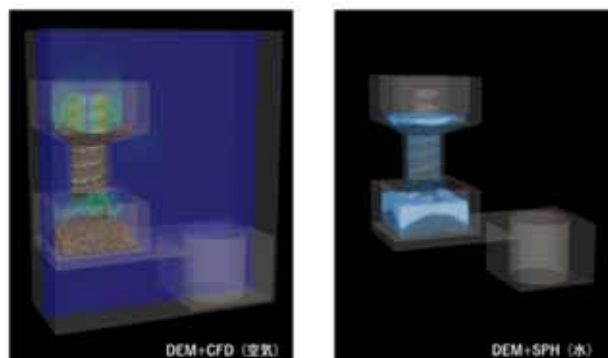


図2 固気2相シミュレーション 図3 固液2相シミュレーション

表 1. 主な計算条件の設定

項目		設定値
計算領域のサイズ		250mm × 100mm × 300mm
DEM 粒子 (約 96 万粒子)	最大粒子半径	$7.5 \times 10^{-4}$ m
	最小粒子半径	$3.5 \times 10^{-4}$ m
	粒子径分布	連続分布 平均粒子半径 $5 \times 10^{-4}$ m 幾何標準偏差 1.3
	密度	$7.874 \times 10^3$ kg/m <sup>3</sup> (鉄粉)
	ヤング率	$5.0 \times 10^6$ Pa
	ポアソン比	0.22
転がり摩擦のモデル		EPSD (elastic-plastic spring-dashpot) モデル
粒子間特性	反発係数	0.1
	摩擦係数	0.5
	付着力	0.0 J/m <sup>3</sup>
	転がり抵抗係数	0.15
	転がり粘性減衰比	0.05
SPH 粒子 (約 82 万粒子)	粒子半径	$5.0 \times 10^{-4}$ m
	密度	$1.0 \times 10^3$ kg/m <sup>3</sup> (水)
	粘度	$1.0 \times 10^{-3}$ Pa・s
CFD	流体密度	$1.2$ kg/m <sup>3</sup> (空気)
	流体粘度	$1.8 \times 10^{-5}$ Pa・s

表 2. DEPTH の機能詳細

項目	内容
粒子	DEM 粒子 (粉体粒子) SDF 粒子 (符号付距離関数の値を持った粒子) SPH 粒子 (流体粒子)
粉体パラメータ	最大粒子半径、最小粒子半径、平均粒子半径 幾何標準偏差密度 ヤング率 ポアソン比
粒子径分布	離散分布 連続分布
粒子間特性／粒子-CAD 要素間特性	反発係数、摩擦係数 付着力 転がり抵抗係数、転がり粘性減衰比
転がり抵抗モデル	CDT (constant directional torque) モデル HS (Hide Sakaguchi) モデル EPSD (elastic-plastic spring-dashpot) モデル
流体との相互作用力	静止流体の抗力 格子法 (CFD, 埋め込み境界法) SPH 法
CAD 要素運動	並進運動、回転運動、振動運動
定数パラメータ	重力加速度
SDF 粒子の計算パラメータ	解像度 半径 相互作用距離の最大値・最小値
CAD データフォーマット	STL 形式 (アスキーデータ)
可視化データフォーマット	ParaView (VTK) 形式、MicroAVS 形式

## 【自動車・運輸、航空宇宙】

## OpenModelicaを用いたPID制御パラメータ決定 [A/JIANT]

## 1. 目的

Advance/JIANT と OpenModelica を利用して PID 制御において適切なパラメータを決定します。求めるパラメータは、2つ (inertia1、目標速度) の決定係数 R2 です。

## 2. 使用ソフトウェア

品質工学ツール Advance/JIANT

## 3. 対象モデル概要

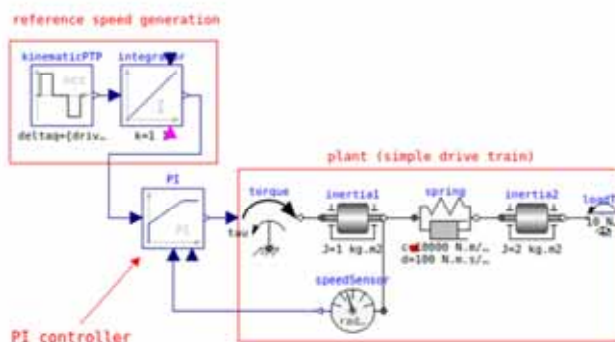


図 1

バネマスダンパーを特定の位置に保持する PID 制御モデルです。ここでは、OpenModelica の標準ライブラリ内の Modelica.Blocks.Examples.PID\_Controller モデルを使用します。

## 4. 設計基準

## 4.1. 入力パラメータ

表 1

表示名	キー名	単位	標準値
Inertia1 のモーメント	inertia1.J	kg.m2	1
Inertia2 のモーメント	inertia2.J	kg.m2	1
バネ抵抗	spring.c	N.m/rad	10000
ダンピング定数	spring.d	N.m.s/rad	100
微分周波数	PI.Td	s	0.1
積分周波数	PI.Ti	s	0.1
入力制御信号の上限値	PI.limiter.uMa x	-	12
入力制御信号の下限値	PI.limiter.uMi n	-	-12

## 4.2. 製品パラメータの水準設定

表 2

No.	表示名	キー名	単位	水準 1	水準 2	水準 3
1	Inertia1 のモーメント	inertia1.J	kg.m2	0.5	1	1.5
2	Inertia2 のモーメント	inertia2.J	kg.m2	0.5	1	1.5
3	バネ抵抗	spring.c	N.m/rad	5000	10000	15000
4	ダンピング定数	spring.d	N.m.s/rad	50	100	150



## 4.3. 運用パラメータの水準設定

表 3

No.	表示名	キー名	単位	水準 1	水準 2	水準 3
1	微分周波数	PI.Td	s	0.001	0.01	1.5
2	積分周波数	PI.Ti	s	0.001	0.01	1.5
3	入力制御信号の上限値	PI.limiter.uMax	-	11	12	13
4	入力制御信号の下限値	PI.limiter.uMin	-	-13	-12	-11

## 5. 評価結果

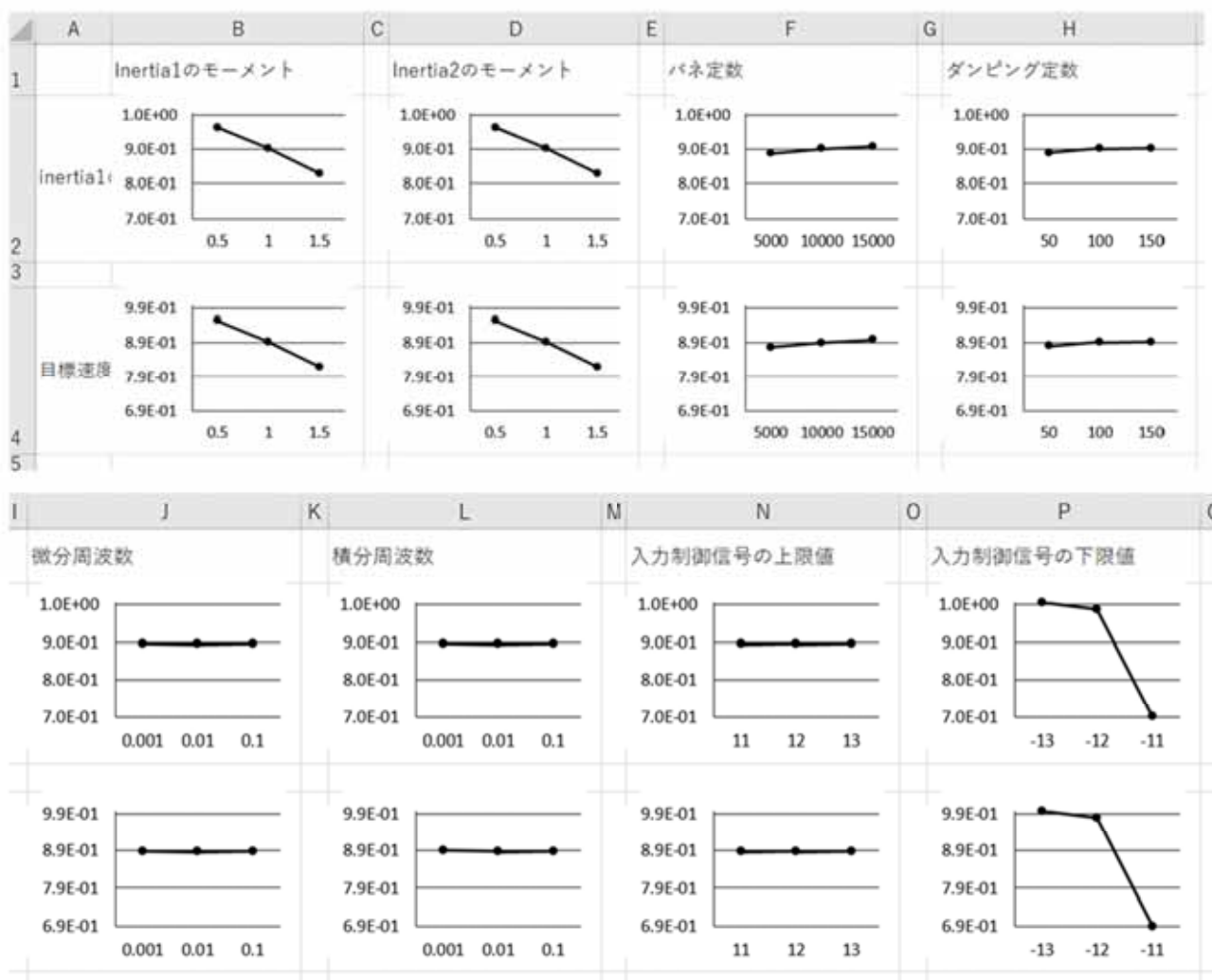


図 2

## 【航空宇宙】燃焼解析 [A/FFred]

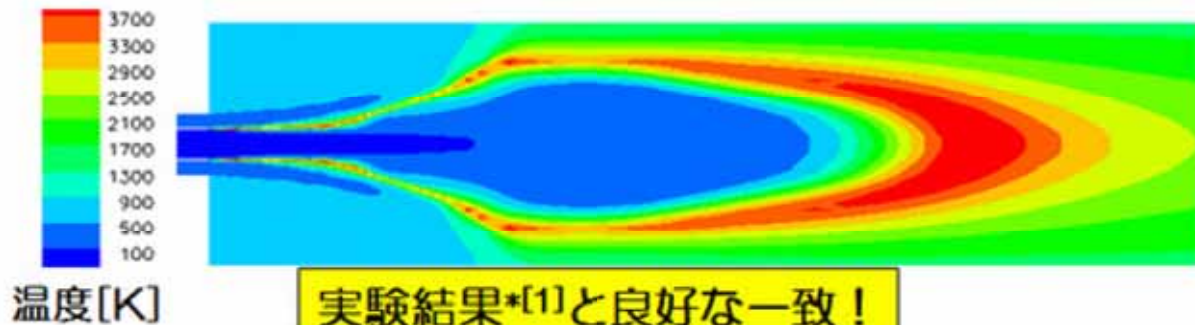
## 1. 使用ソフトウェア

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red

## 2. 超臨界圧燃焼解析

要求レベルの高い航空宇宙業界でも使用されている Advance/FrontFlow/red ならではの、高度な燃焼解析が可能です。

実在ガスモデルの他に、ODE ソルバー、OSM ソルバー、不連続格子など、負荷の高い化学反応計算を軽減させる機能が搭載されています。



\*[1] Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling, DLR, 2001.

図1

## 【航空宇宙】密閉施設内の爆轟遷移予測のシミュレーション [A/FOCUS-i]

## 1. 解析対象

水素ガス利用施設

## 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i

## 3. 背景

水素ステーションを始めとしてインフラ施設内における水素の安全利用のための設計に関連し、特定の環境下において水素燃焼は爆轟燃焼に遷移するためその危険予測は今後ますます重要となります。爆轟は衝撃波の背後で自着火し続けることにより、音速より速い速度で燃焼波面が伝播するため、その危険予測は非常に重要になります。

近年、爆轟の計算に関する解析手法で新たな進展がみられ、数十から 100 メートル規模の施設スケールで爆轟遷移を含め解析が可能となりつつあります\*1)。このような潮流のなかで、本ソフトウェアにこのアルゴリズムを取り込むことにより施設内スケールの爆轟遷移現象をシミュレーションすることが可能になりました。

\*1) Ettner, F, Vollmer, K. G., and Sattelmayer, T., "I Numerical Simulation of the Deflagration-to-Detonation Transition in Inhomogeneous Mixtures," J. Combustion, Vol. 2014,(2014).

\*2) Josef Hasslberger, Lorenz R.Boeck, and Thomas Sattelmayer, "Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition in large confined volumes," Journal of Loss Prevention in the Process Industries, Vol. 36, 2015, pp. 371-379.

## 4. 解析モデル

解析対象の概観図を図 1 に示します。これは RUT 試験設備として知られ、文献\* 2) でも爆轟計算の対象として採り上げられています。内部は 6 個または 12 個の障壁で仕切られており、火

炎が障壁を乗り越える際の条件が整うと火炎は爆轟波へ遷移することが知られています。長さスケールが数十メートルと大規模になるため、現実的な計算時間内で爆轟への遷移を含めた火炎の計算を行うには何らかの火炎モデルを使用する必要があります。



図 1 計算対象の外形図  
(障害物が 6 個の場合)

## 5. 解析結果

図 2 に火炎が爆轟波に遷移の様子を温度分布の時系列で示しています。爆轟遷移箇所に関連して実験\* 2) 値との比較を図 3 に示しています。火炎が進行する途上から伝播速度が急上昇し爆轟速度を維持しながら進行し、実験値との一致は良好であるのが見てとれます。

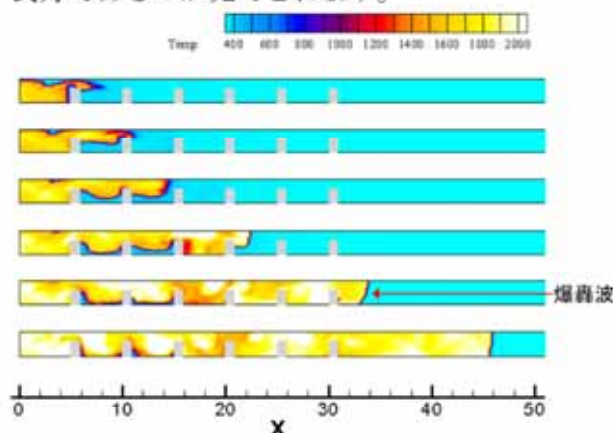


図 2 中心断面内の各時刻における温度分布



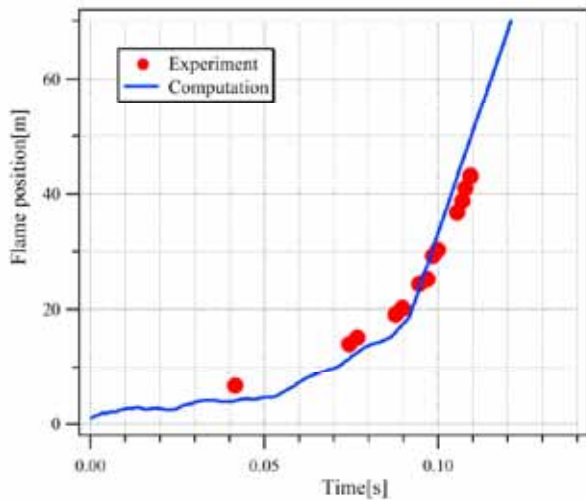


図3 火炎面に位置に関する実験とシミュレーションの比較

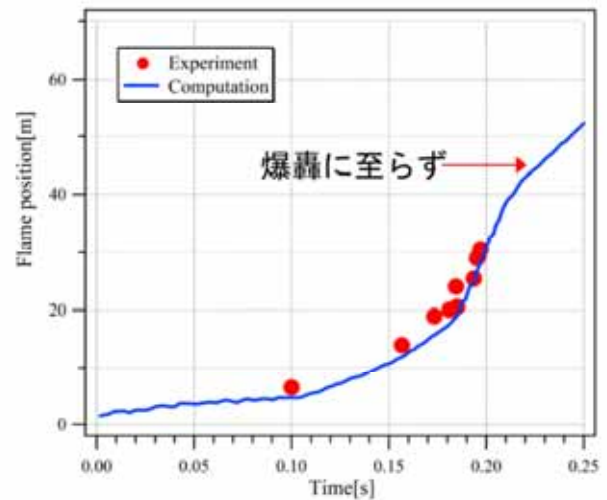


図5 火炎面に位置に関する実験とシミュレーションの比較

爆轟を起こさない実験ケースについてもシミュレーションを実施しました。図4に火炎が爆轟波に遷移する様子を温度分布の時系列で示しています。また、火炎の位置に関する実験\*2)値との比較を図5に示しています。火炎の伝播速度が加速しますが、このケースでは爆轟にはなり切らずに火炎が進行します。このケースについても実験値との一致は良好であることが分かりました。

上記した2例のシミュレーションは、全長80m、高さ2.3m、奥行き2.5mの施設における爆轟遷移の実験\*2)を対象にし、通常のPCクラスタ環境を用いた場合に約1日程度の計算時間で爆轟の再現シミュレーションが可能であることを示すものです。

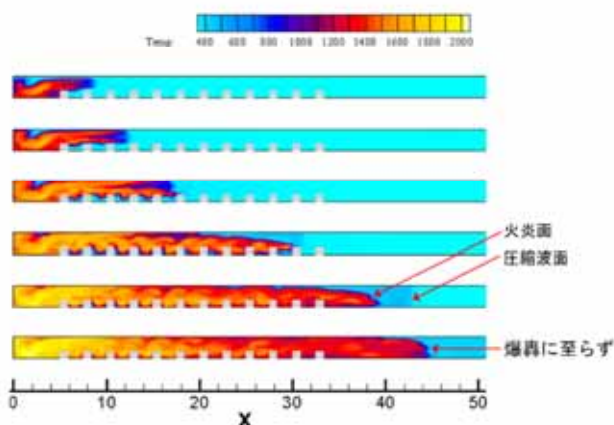


図4 中心断面内の各時刻における温度分布

## 【航空宇宙】回転デトネーションのシミュレーション [A/FOCUS-i]

## 1. 解析対象

回転デトネーションを利用した高エネルギー変換機器

## 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i

## 3. 背景

近年、回転デトネーション現象を利用した水素などの可燃気体を利用した高効率エネルギー変換機器に係る研究が進められおり、回転デトネーションエンジンもその中のひとつとして位置づけられています。ラバールノズルのように一度流れを絞ってから拡大流路を設けることをしなくても超音速噴流が得られるため、流入口から流出口までの長さが短く構造が簡単化できることが長所として挙げられます。

こうしたデトネーションエンジンについては、爆轟波面を細かく解像する手法は確実に計算要素数の増大を伴い、計算時間も膨大になることが避けられません。一方、爆轟の計算に関する解析手法に関しては比較的最近の手法\*1)を取り入れることにより、PC クラスタ環境において比較的短時間で回転デトネーションを再現することが可能であることが分かりました。

## 4. 解析モデル

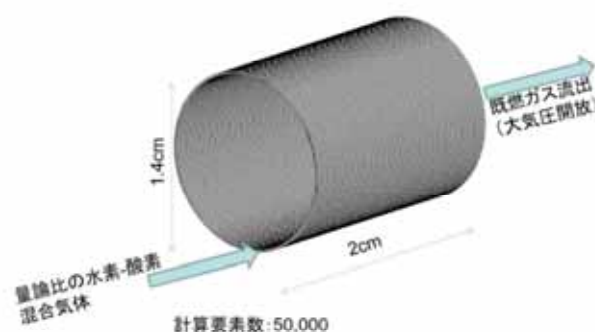


図1 計算対象の概形

## 5. 解析結果

表1 解析に関する主要な項目

項目	
対流項	3次精度TVD+AUSMDVスキーム
粘性項	無し
時間進行法	3段階TVD Runge-Kutta(TVD R-K3)法
時間刻み	約 $2.5 \times 10^{-8}$ s (CFL=0.1)
計算時間	回転デトネーションが1回転で約6000タイムステップ
格子サイズ	$\Delta \sim 0.2$ mm
計算要素数	50,000
層流火炎速度	H <sub>2</sub> 濃度依存の実験式
爆轟遷移	着火遅れ時間のデータベース依存のモデル
着火遅れ時間	自社制作
既燃気体の化学種分率	NASA-CEA

本計算の対象の全長は2cmですが、格子サイズは0.2mmとし全体の格子数を5万要素程と大幅に抑えて計算することが可能です。爆轟波面の内部構造を解像する必要のない計算手法を採用しているため、さらに大規模長さスケールの数値解析が可能です。

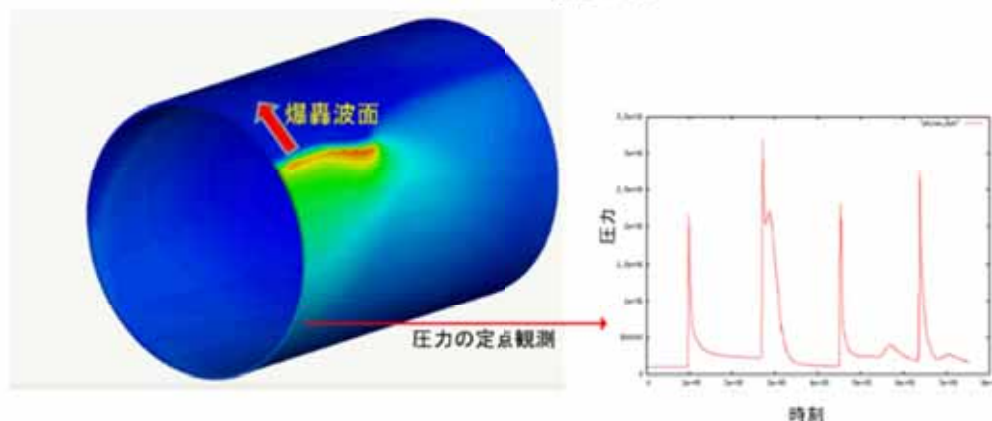


図2 火炎面に位置に関する実験とシミュレーションの比較

## 【航空宇宙】 Euler計算に関する他コードとの予測性能比較 [A/FOCUS-i]

## 1. 解析対象

NACA0012 airfoil

## 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i

## 3. 背景

圧縮性流体の基礎方程式である Navier-Stokes 方程式を解く際には、非粘性流の Euler 方程式に粘性項を付加して解く方法が一般的です。このため、ベースとなる Euler 方程式に関する予測精度はいずれにせよ重要であり、代表的な検証事例を翼周りの解析結果の比較とともに本項で示します。

## 4. 解析モデル

解析に使用した計算格子の例を示しています。本ソフトウェア Advance/FOCUS-i は OpenFOAM 形式の格子フォーマットをベースにしています。一方で下図に示すような plot3d 形式（構造格子）を本ソフトウェアの前処理（pre-focus）を実行して import し、流れの計算で使用することも可能です。

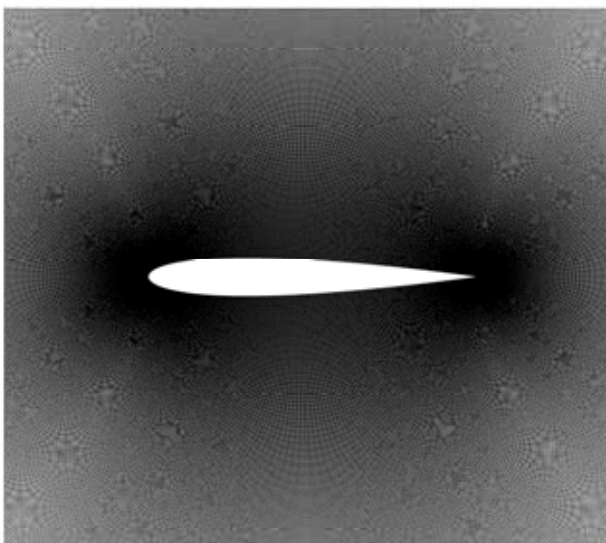


図1 翼周りの計算格子例

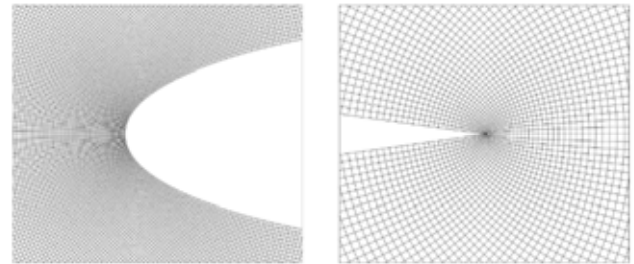


図2 前縁点付近と後縁近傍のクローズアップ

表1 気流の条件

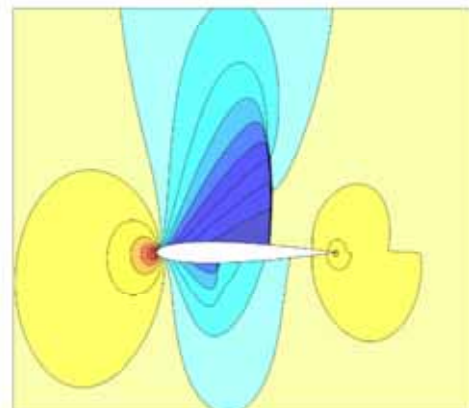
マッハ数 $M_\infty$	迎角 $\alpha$
0.8	$1.25^\circ$

表2 使用した解析機能

解析機能	
対流項	AUSMDV + MUSCL-TVD
時間進行法	LU-SGS
時間刻み	CFL=10,000
計算要素数	4,194,304セル(=2048 <sup>2</sup> )

## 5. 解析結果

以下に計算結果を示しています。この計算は参考文献\*1)の諸条件に基づいており、揚力係数と抗力係数を米国の諸計算コードと比較を実施し、これらの値を表3に掲載しました。空力係数は互いに2桁程度まで良く一致することが分かり、本ソフトウェアの基本的な予測性能の正しさが検証されました。

図3 翼周りの密度分布  
(マッハ数  $M=0.8$ , 迎角  $\alpha=1.25^\circ$ )



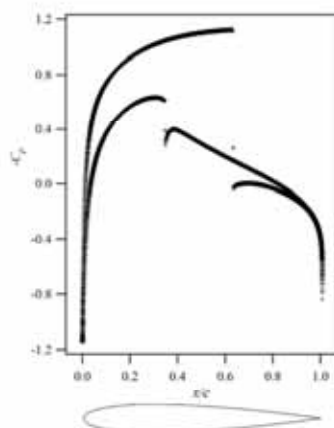


図 4 表面圧力分布

表 3 種々の計算コードとの比較

(他のコードの値は\*1に記載の文献から転記)

コード名	揚力係数	抗力係数
Advance/FOCUS-i	0.353632850	0.022240461
FL082	0.356208937	0.022684938
OVERFLOW v2 lt	0.351662793	0.022453440
CFD3Dv6	0.348226045	0.022501430
CFD3Dv6 + Vortex	0.351596613	0.022674853

※ 1) Vassberg J. C. and Jameson A., “In Pursuit of  
Grid Convergence for Two-Dimensional Euler  
Solutions,” JOURNAL OF AIRCRAFT, Vol. 47, No.  
4, July–August 2010.

## 【航空宇宙、産業機械】 OREX周りの極超音速流 [A/FOCUS-i]

## 1. 概要

OREX 周りの極超音速流に関する検証計算を行いました。

## 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i

## 3. 解析条件

高度	$U_\infty$	$T_\infty$	$P_\infty$	$T_w$	$M_\infty$
90km	7450m/s	186.9K	0.169Pa	540K	27

図 1

## 4. 解析機能

解析機能	
対流項	FVS-type + MUSCL-TVD
7化学種反応モデル	Blottner's model( $O_2$ , $N_2$ , $O$ , $N$ , $NO$ , $NO^+$ , $e$ )
2温度モデル	NASA-polynomial
振動緩和モデル	Millikan-White with Park' model
粘性係数	Blottner's model & Wilke's formula
熱伝導係数	Eucken's formula & Wilke's formula
相互拡散係数	粘性係数とSchmidt数から計算
化学種の拡散係数	相互拡散係数と化学種のモル分率から計算

図 2

## 5. 検証計算

h	$U_\infty$	$T_\infty$	$P_\infty$	$T_w$	$M_\infty$
90km	7450m/s	186.9K	0.169Pa	540K	27

計算要素数 152,561セル

図 3

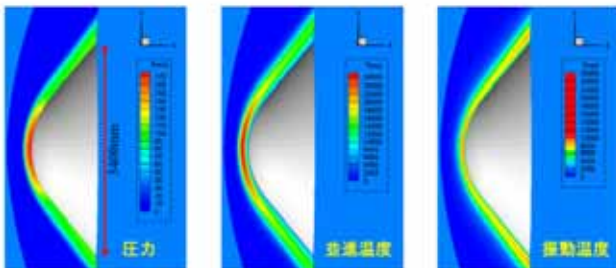


図 4

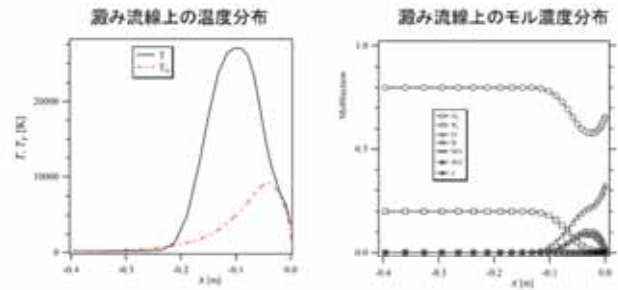


図 5

- 並進温度は衝撃波の背後で 27,000K に達するが、振動温度は 9,000K にしか到達せず、非平衡性が顕著に現れている
- 希薄気体であることにより衝撃波は有意な厚みを持って捉えられていることが並進温度の立ち上がり方から窺える。

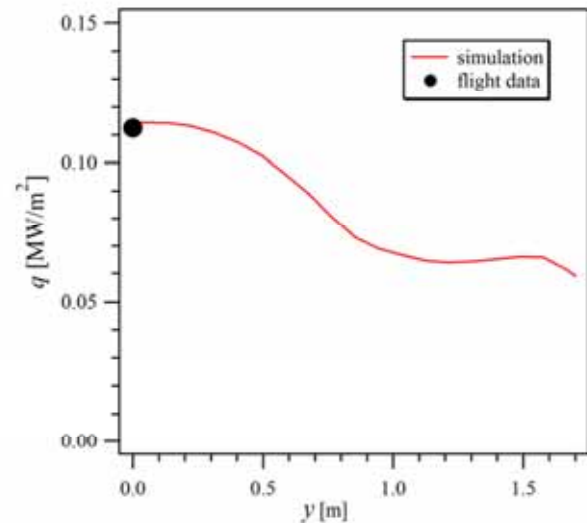
物体表面上の加熱率分布<sup>[1]</sup>

図 6

- OREX 表面の空力加熱に関して、澱み点におけるフライトデータ<sup>[1]</sup>との一致は良好であることが確認できる。

## 6. 文献

[1] 航空宇宙技術研究所 SP-29, “高エンタルピー流れ企画セッション及びワークショップ”, 1996.

## 【航空宇宙、産業機械】 Rouse-McNownの実験に係る検証計算 [A/FOCUS-i]

### 1. 概要

Rouse-McNown(1948)の実験[1]を対象として定量的な検証例を示す。

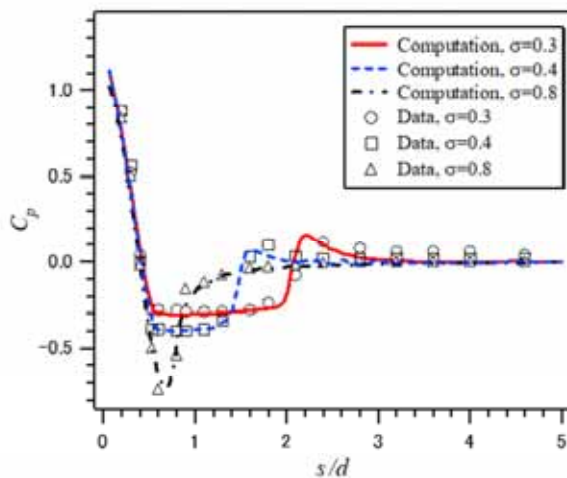
### 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i

### 3. 解析の計算条件

- ◆ 直径 0.0254m(1 inch)の球頭円筒形状
- ◆ 水流速度 4.317m/s
- ◆ キャビテーション数  $\sigma=0.3, 0.4, 0.8$
- ◆  $\sigma=0.3(p_{\infty}=5,198Pa)$
- ◆  $\sigma=0.4(p_{\infty}=6800Pa)$
- ◆  $\sigma=0.8(p_{\infty}=10500Pa)$

### 4. 表面圧力の実験と計算の比較



- ◆  $\sigma=0.8$  のノンキャビテーションの実験を再現
- ◆  $\sigma=0.3$  と  $0.4$  のそれぞれの場合において、低圧沸騰領域でキャビテーションの発生を確認
- ◆ Advance/FOCUS-i により実験値[1]を再現することを定量的に確認

### 5. 文献

[1] H. Rouse and J. S. McNown. "Cavitation and Pressure Distribution, Head Forms at Zero Angle of Yaw", Studies in Engineering, Bulletin 32, State University of Iowa. (1948)

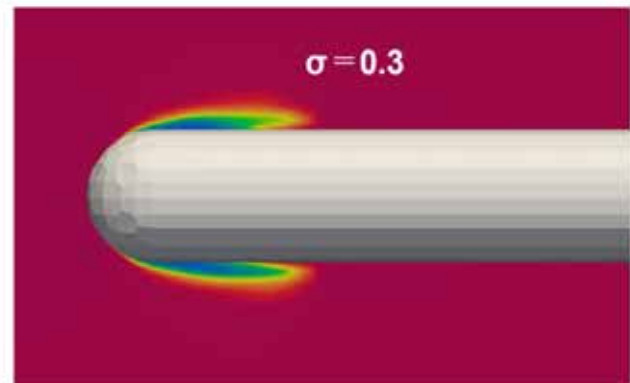


図 1 水中のキャビテーション発生の様子（キャビテーション係数  $\sigma=0.3$ ）



## 【航空宇宙、産業機械】気液二相流（キャビテーション流）の解析例 [A/FOCUS-i]

### 1. 解析対象

Hrubes(2001)の実験[1]を対象とした気液二相流（キャビテーション流）に関する検証例を示す。

### 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i

### 3. 解析の計算条件

Hrubes(2001)の実験[1]ベース

- ◆ 水の相対速度
  - $V=1500\text{m/s}$
  - $V=970\text{m/s}$
- ◆ 貯水槽内の圧力 0.15MPa
- ◆ 長さ約 8cm の bullet 形状
  - 底面と弾頭の直径比=11

### 4. 解析結果

#### 4.1. テストケース 1

$V=1540\text{m/s}$ (Mach=1.03)

(周囲圧 0.15MPa、水深 5m 相当)

- ◆ 物体前方の衝撃波は密度不連続が目視可能%
- ◆ 後流は、キャビテーションバブルが光の透過性に影響し黒く映る%
- ◆ シミュレーションは、密度コンターと水蒸気（キャビテーション）コンターで顕著な空間勾配の存在する箇所が実験写真 [図b](#)と符合する%

%

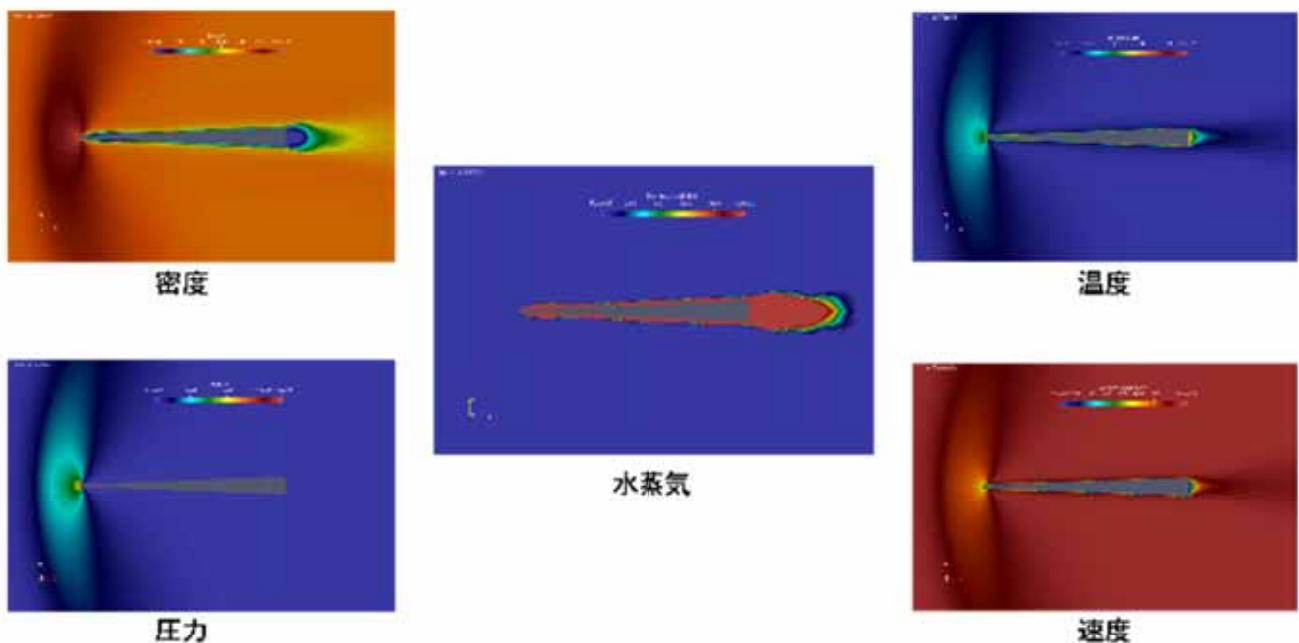


図1

#### 4.2. テストケース 2

$V=970\text{m/s}$  (周囲圧 0.15MPa、水深 5m 相当)

- ◆ 物体前方の衝撃波は密度不連続が目視可能
- ◆ 後流は、キャビテーションバブルが光の透過性に影響し黒く映る

- ◆ シミュレーションは、密度コンターと水蒸気（キャビテーション）コンターで顕著な空間勾配の存在する箇所が実験写真[1]と符合する

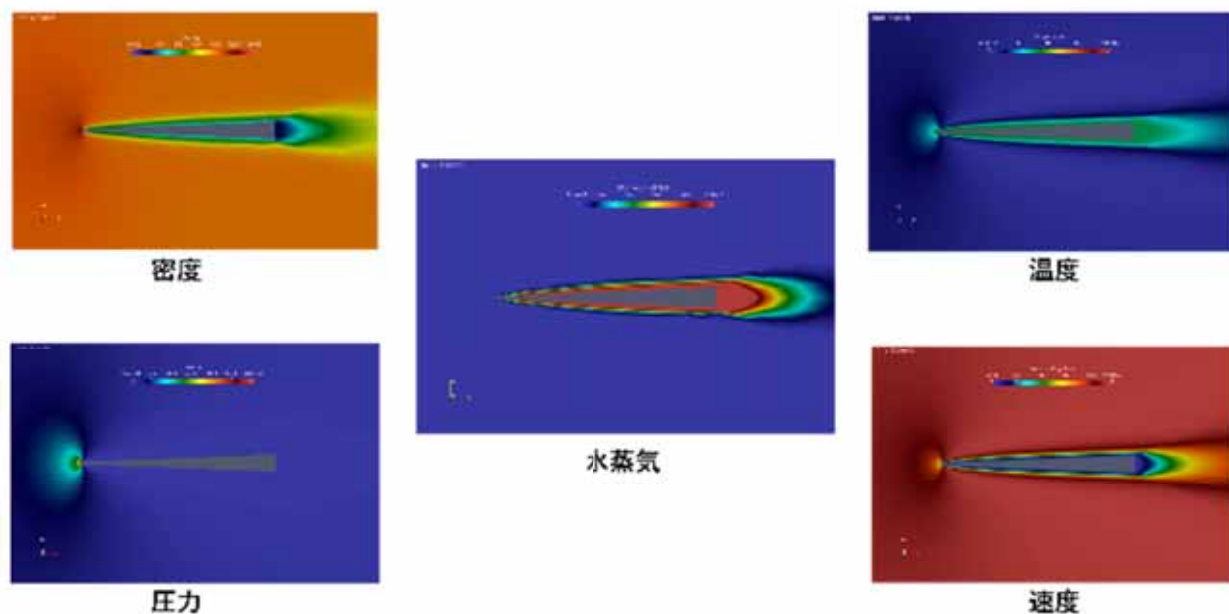


図 2

- ◆ いずれの場合も物体がキャビテーションで覆われるスーパーキャビテーション状態となり、実験撮影[1]と合致する

#### 4.3. 解析例：密度分布（周囲圧 1.5atm）

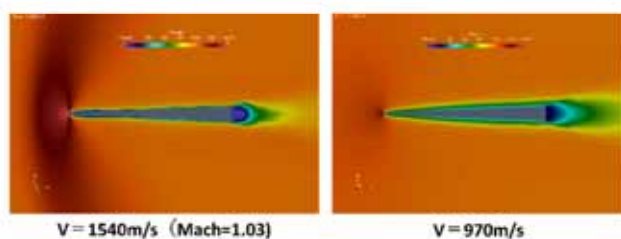


図 3

亜音速、遷音速、超音速のそれぞれにおいて水中における飛翔体周りの流れ場を解くことが可能

#### 4.4. 解析例：水蒸気分布（周囲圧 1.5atm）

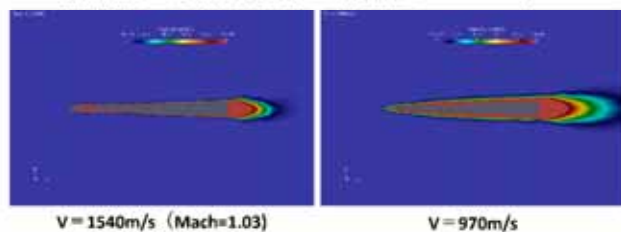


図 4

- ◆ 超音速移動の場合には衝撃波後の圧力上昇のために凝縮が促進され物体周囲の気相の分布が薄い
- ◆ 亜音速の場合( $V=970\text{m/s}$ )、速度が大きいほど先端での静圧低下の効果により気相分布が増大する

#### 5. 文献

[1] J. D. Hrubes, "High-speed imaging of supercavitating underwater projectiles," Experiments in Fluids Vol. 30, No.1, pp. 57–64 (2001).

## 【航空宇宙、産業機械】移動重合格子による球の水面への突入解析(超高速、 $V=1000\text{m/s}$ で斜め入射) [A/FOCUS-i]

### 1. 解析の概要

移動重合格子による移動物体周りの流体解析機能と気液二相流解析機能を併用した例を紹介します。重合格子機能では、静止した背景格子を先に用意し、移動物体周りの計算格子をサブ格子として別途用意します。物体の移動に際しては、移動格子の外縁領域と背景格子の間で情報交換がなされます。移動格子の移動経路は並進と回転を組み合わせることが可能です。

### 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i

### 3. 解析条件

静止した水面に秒速  $1000\text{m/s}$  の球形状が斜めに衝突するケースを解析しました。

### 4. 解析結果

1 列目は気相液相の両者を含む全密度で可視化例であり、重合格子が移動する様子も重ねて表示しています。球の後方に空気巻き込み(エアレーション)による空洞が形成されるのが見てとれます。また、液相には密度の圧縮性を僅かに許す状態方程式[1]が対応するため、密度は最大で  $1200\text{kg/m}^3$  程になることも分かります。

2 列目は水蒸気の体積分率の様子です。気相の中を通過する際に生じる衝撃波により球の周囲は加熱されており、球が着水する瞬間に水面が瞬時に沸騰したときの水蒸気が球の後方に貯留します。その後に水中の球の後方は低圧沸騰を起こし、キャビテーションによる気相発生が見られます。よって、エアレーション部分とキャビテーションによる水蒸気が複雑な経緯を経て混合し、球の後方に形成されることが分かります。

3 列目は圧力分布です。気相中を落下の際には、球の前方に衝撃波が形成され、水面と衝突する手前で既に高压状態となっており、水面に衝突すると桁違いに高压な状態が形成され、大気圧の 1000 倍程まで上昇することがわかります。また、水中に没した後も、球の前方は圧縮されるために 400K 以上の高温になっているのが見てとれます。このように、気液界面と気相と液相の間を対象物体が移動する際の、圧力の高低差が非常に大きな流動現象を予測することが本ソフトウェアでは可能です。



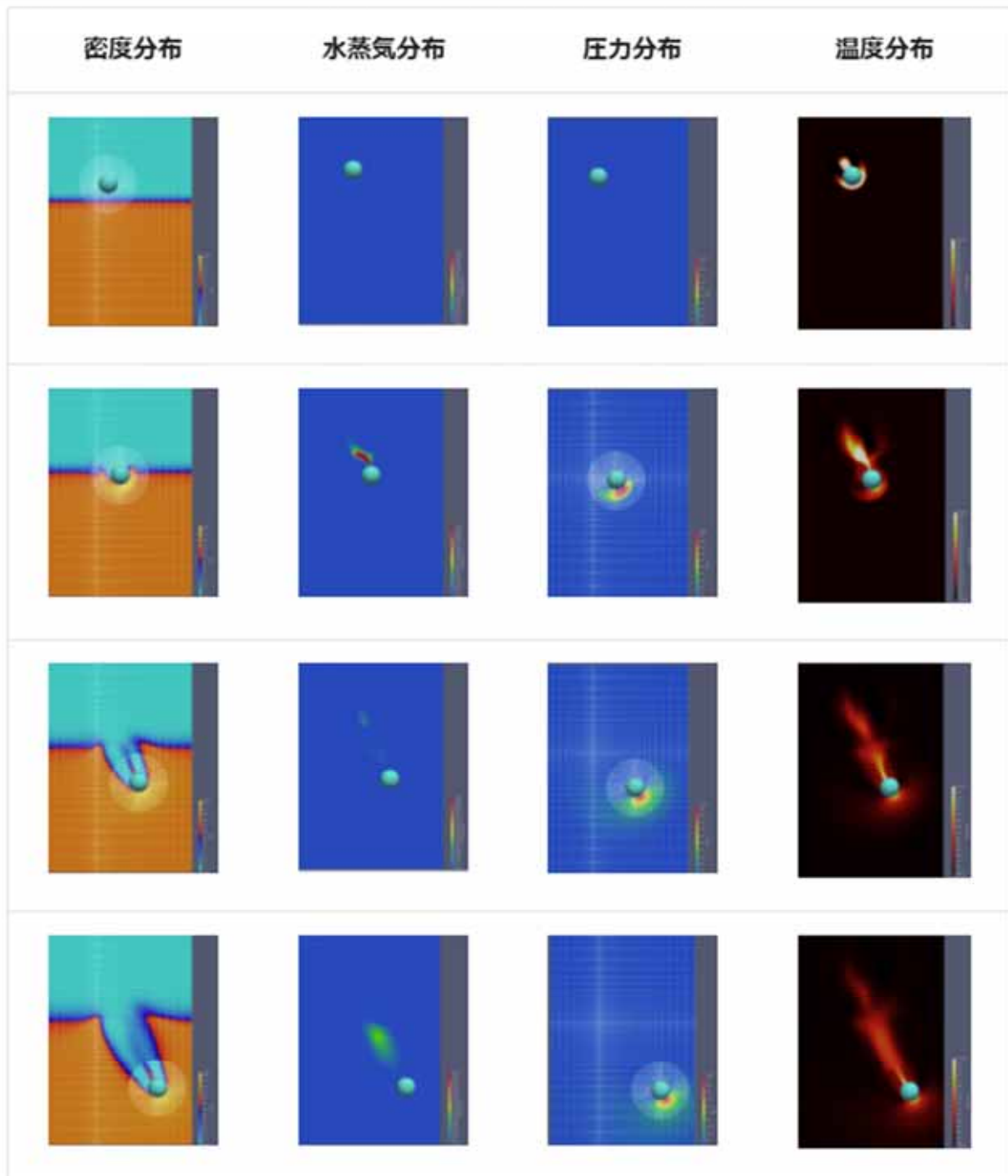


図 1

## 5. 参考文献

- [1] Le Métayer, O., Massoni, J., and Saurel, R.,  
 “Elaborating Equations of State of a Liquid and Its  
 Vapor for Two-Phase Flow models,” Interna-tional  
 Journal of Thermal Sciences 43 (2004), pp. 265–276.

## 【航空宇宙】 URANS(k- $\omega$ SST)と SST-DDESによる円柱周りのレイノルズ数効果の検証解析 [A/FOCUS-i]

### 1. 解析対象

種々のレイノルズ数での円柱周りの層流/乱流剥離を伴う非定常現象

### 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソフトウェア Advance/FOCUS-i

### 3. 背景

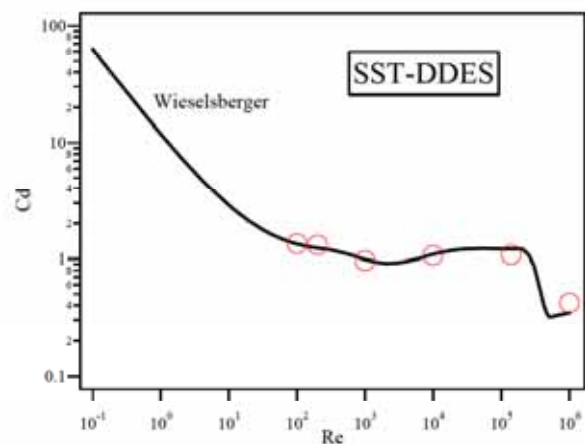
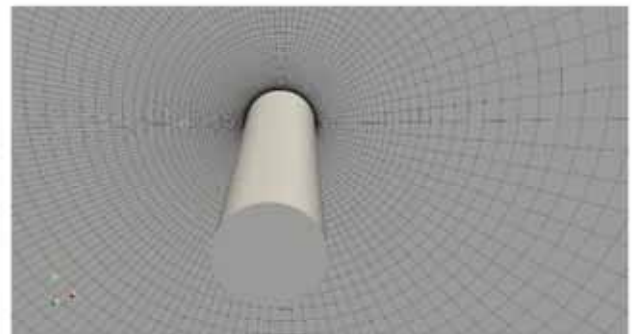
1. RANS は定常 RANS(Steady RANS)と非定常 RANS(Unsteady)に分類されます。
2. URANS では、格子解像度が充分あっても高レイノルズ数における乱流の高周波成分の再現は困難です。
3. 乱流モデルにおける乱流特性長さ以下の空間変動成分がアンサンブル平均の中に埋没するためです。
4. DES または DDES では格子スケールと乱流特性長さを常に比較し、空間平均モデルとして解かれる領域と RANS モデルで解かれる領域を分けるアルゴリズムであり、高いレイノルズ数での非定常乱流挙動と平均的特性の両方に対して高い予測精度が期待できます。
5. 円柱周りの抗力係数について検証した事例を示します。

### 4. 解析モデル

1. RANS モデルは k- $\omega$  SST モデルを使用しました。
2. SST-DDES は k- $\omega$  SST モデルの k の方程式における Destruction 項を修正した乱流モデルを用いました。
3. 流体解析に用いた計算格子は円柱周りに 128 点、奥行き方向に 64 点、壁面から遠方方向に 128 点の要素数で構成される 6 面体格子としました。
4. 奥行方向の計算領域は円柱の直径 D の 4 倍と

しました。

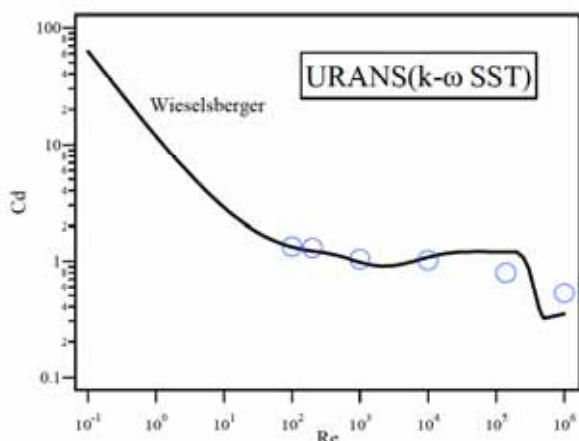
5. 円柱の中心から遠方境界までの距離は円柱の直径 D の 20 倍としました。
6. 壁面から第 1 格子点までの最小格子幅は、 $Re=100$  と  $Re=200$  の場合は  $\Delta \eta/D=0.002$  とし、 $Re=10,000$  の場合は  $\Delta \eta/D=0.001$  とし、その他は  $\Delta \eta/D=0.00001$  としました。



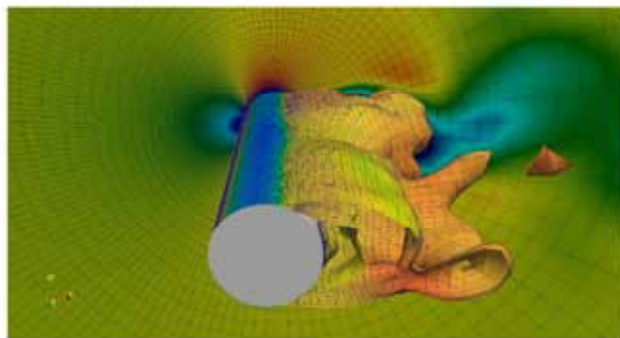
1. レイノルズ数は  $Re=100, 200, 1000, 10,000, 140,000, 1,000,000$  の 6 ケースです。
2.  $Re=100, 200$  は渦粘性がほぼ 0 で層流剥離とカルマン渦放出が特徴的な流れ場です。
3.  $Re=140,000$  の場合は層流剥離を起こし、乱流付着します、いわゆる臨界レイノルズ数の状態であり、レイノルズ数が上がるにつれて抗力係数が若干増加します。
4.  $Re=1,000,000$  以降では乱流剥離をし、剥離渦は速やかに小渦に変化しながら大規模スケ

ールの渦列も構成するという特徴を有し、乱流境界層の存在のために剥離点が円柱の最大投影面よりも後方で生じ、抗力が急減少します、いわゆる drag crisis の領域を再現することを確認しました。

5. SST-DDES モデルはこれらの全てを網羅的に解くことが可能であり、抗力係数は実験と良く一致するのが見てとれます。

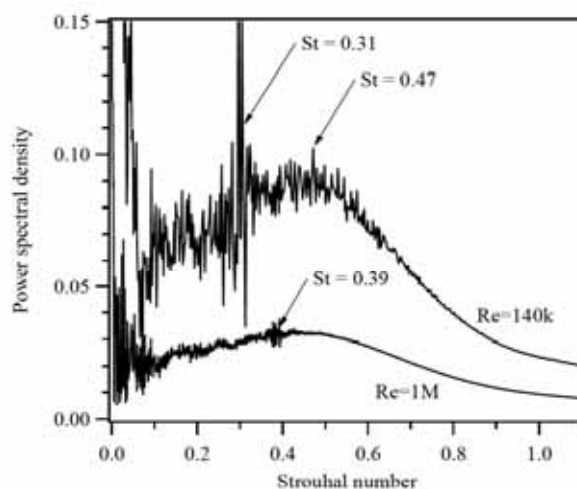


1. URANS の結果は、特にレイノルズ数が  $Re=140,000$  以降の drag crisis 前後から予測精度が低下します。
2. その  $Re$  数以降では、乱流モデルにおける乱流特性長さ以下の空間変動成分がアンサンブル平均の中に埋没しやすく、一般に言われている通り、URANS の非定常乱流解析に関する脆弱性が現れています。



1. SST-DDES モデルによる、 $Re=1,000,000$  の流れのスナップショット。
2.  $z=0$  平面での速度の絶対値の可視化。
3. 乱流エネルギーの等値面に圧力でカラーリ

ング処理したものを重ね合わせて3次元性を可視化。



1. 円柱に掛かる抵抗係数をベースにした周波数解析では、 $Re$  数が 14 万の場合は  $St \sim 0.16$  の 2 倍にピークが見られます。
2.  $Re$  数が 100 万の場合は、Roshko[1]の実験の抵抗係数で観察された  $St \sim 0.4$  の付近に周波数帯域にパワースペクトルが密集しているのが分かり、本シミュレーションは高いレイノルズ数における乱流剥離に起因する高周波成分の時間応答も解析可能であることを示しています。

## 5. 参考文献

- 1 Roshko A., "Experiments on the Flow Past a Circular Cylinder at Very High Reynolds Number," Journal of Fluid Mechanics. 1961. Vol. 10. No. 3. pp. 345-356.



## 【建築土木、産業機械】座屈解析機能 [A/FSTR]

## 1. 概要

座屈とは、構造物に荷重を加えたときに、材料の降伏よりも低いレベルで大きく変形してしまう現象です。特に細長い形状や薄い板形状では、座屈が発生しやすいです。このような構造物では材料の降伏強度のほかにも座屈の発生を考慮する必要があります。

CAE での座屈の解析には、大きく分けて線形座屈解析と非線形座屈解析の 2 種類があります。線形座屈解析とは、座屈前の変位量が小さく、応力、ひずみ値などが荷重に比例すると仮定した条件での座屈解析のことです。Advance/FrontSTR v6.3 では線形座屈解析機能を実装しました。

## 2. 使用ソフトウェア

構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR

## 3. 線形座屈解析機能紹介

## 3.1. 理論式

数学的には、座屈がおきるときは、構造物の剛性が特異になります。ここでの線形座屈解析は、臨界座屈係数と、関連した座屈モード形状を求める固有値問題を解きます。そのため、線形座屈解析は座屈固有値解析とも呼ばれます。

構造物の全体剛性マトリクスは一般的に以下の式で表すことができます。

$$K = K_L + K_G \quad \cdots (1)$$

ここで  $K_L$  と  $K_G$  はそれぞれ線形剛性マトリクスと幾何学剛性マトリクスと表しています。線形座屈解析では、幾何学剛性マトリクスは外力  $q_0$  と比例すると仮定します、すなわち

$$K_G(\lambda q_0) = \lambda K_G(q_0) \quad \cdots (2)$$

そのため、線形座屈解析は下記の特異値問題を解くことになります。

$$(K_L + \lambda K_G(q_0))x = 0 \quad \cdots (3)$$

その非零解が存在する条件は

$$p(\lambda) = |K - \lambda K_G| = 0 \quad \cdots (4)$$

となり、固有値問題に帰着します。

## 4. 座屈解析の事例

## 4.1. 梁の座屈解析

梁要素で様々な支持条件下の座屈解析を実施し、解析結果出力の座屈荷重を理論値と比較しました。

## 4.1.1. 解析条件

主な解析条件を表 1 に、解析ケースと支持条件を表 2 に示します。梁には一様な圧縮荷重を負荷しました。

表 1 解析条件

項目	値
梁要素の種類	EULER 梁
ヤング率	$E = 7.1 \times 10^{10} [\text{Pa}]$
断面積	$A = 1.257 \times 10^{-3} [\text{m}^2]$
断面 2 次モーメント	$I = 1.26 \times 10^{-7} [\text{m}^4]$
長さ	$L = 10 [\text{m}]$
要素分割	10 分割
基準荷重	1000 [N]

表 2 解析ケースと支持条件

解析ケース	端点 1	端点 2	式(5)の n
case1	完全拘束	完全拘束	4
case2	完全拘束	ピン支持	2.046
case3	ピン支持	ピン支持	1

## 4.1.2. 解析結果

軸方向に圧縮荷重を受けるオイラーの式における座屈荷重は式(5) で与えられます。n は支持条件によって決まる定数です。

$$P = \frac{n\pi^2 EI}{L^2} \quad \cdots (5)$$

数値解析で得られた座屈荷重をオイラーの座屈荷重と比較した値を表 3 に示します。

理論値と解析結果により導出した座屈荷重はよく一致しました。

また 図 1 に示す座屈変形図の出力により各解析ケースにおける座屈変形モード形状が確認できました。

表 3 座屈荷重の比較

解析ケース	理論値 [N]	解析結果 荷重係数	解析結果 座屈荷重[N]
case1	880.6	0.883	882.9
case2	1801.7	1.806	1806.4
case3	3522.3	3.532	3532.5



図 1 変形モード形状

## 4.2. 薄肉円筒シェルの座屈解析

薄肉円筒シェルの座屈解析を実施し座屈形状を確認しました。

### 4.2.1. 解析条件

解析条件を 表 4 に示します。モデルの端部は固定端とし、軸方向の圧縮荷重を負荷しました。

表 4 解析条件

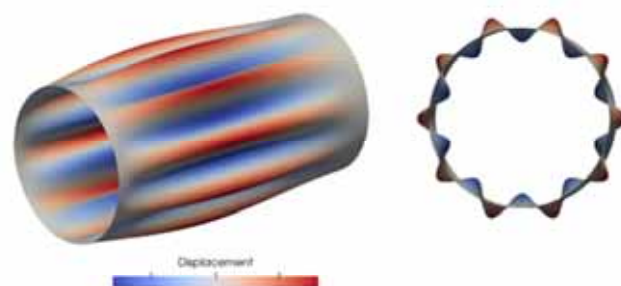
項目	値
要素タイプ	四辺形シェル要素
円筒半径	$R = 100$ [in]
板厚	$t = 0.25$ [in]
長さ	$L = 400$ [in]
径厚比	$R/t = 400$
ヤング率	$E = 3.0 \times 10^7$ [lbf/in <sup>2</sup> ]
ポアソン比	$\nu = 0.3$

### 4.2.2. 解析結果

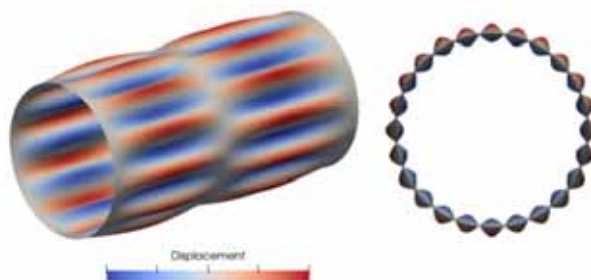
解析結果で得られた座屈荷重を 表 5 に座屈モード変形図を 図 2 に示します。

表 5 座屈荷重

出力モード No.	円周方向の 全波数 n	軸方向の 半波数 m	座屈荷重 [lbf/in <sup>2</sup> ]
1	10	1	$2.35 \times 10^5$
13	12	2	$3.51 \times 10^5$



[図 2] モード 1, n=10, m=1



[図 3] モード 13, n=12, m=2

過去の文献[1][2] などから、概ね  $R/t$  が 400 以上では弾性座屈とみなされており、古典的座屈理論値による座屈応力値は式(6) で与えられます。

$$\sigma_{cl} = \frac{1}{\sqrt{3(1-\nu^2)}} \cdot \frac{Et}{R} = 0.605 \frac{Et}{R} \dots (6)$$

本式から算出される座屈応力値は座屈応力の下限の推定などに利用され、式(6)による算出値は  $4.54 \times 10^4$  [lbf/in<sup>2</sup>]であり、解析結果の座屈応力値はそれよりも高い値となりました。

薄肉円筒の座屈応力値は解析モデルの分割数や境界条件などが結果に影響する事が知られていることから数多くの研究がなされ、設計に利用するには慎重に検討を行う必要があります。

## 【自動車・運輸、航空宇宙】 Advance/JIANTを用いた回路の最適設計 [A/JIANT]

### 1. 解析対象

Advance/JIANT と回路シミュレータ LTSpice を利用して、マルチバイブレータモデルのパルス発信回路の矩形波を最適化します。

具体的には、Advance/JIANT を利用して、回路設計に必要な

- ・最適な電源電圧
- ・ベース側抵抗
- ・エミッタ側抵抗
- ・コンデンサ容量

の4つのパラメータを求めます。

ここで、「最適な」指標とは、

- ・デューティ比が目標に近いこと
- ・特性周波数が目標に近いこと
- ・目標とするパルスとの残差二乗平均が小さいことを意味します。

### 2. 使用ソフトウェア

品質工学ツール Advance/JIANT

### 3. 対象モデル概要

トランジスタ2つで作成できる、もっとも単純な非安定（常に発振を続ける）の発振回路です。  
Rbase=R2=R3, C=C1=C2 のとき、

$$f = \frac{1}{T} = \frac{1}{\ln(2) \cdot 2RC} \approx \frac{0.721}{RC}$$

のパルスを発信します。

R1, R4 は発振周期にはほぼかわりませんが、発振パルスの波形に影響します。Remit=R1=R4 とすることで、パルスの矩形波も対称となります。

このケースでは Rbase, Rt, C を入力パラメータとし、R4 にかかる電位差 V(t) から計算したパラメータから評価を行います。

### 4. 設計基準

#### 4.1. 入力パラメータ

表 1

表示名	キー名	単位	標準値
電源電圧	V0_cnv	-	5
ベース側抵抗	Rbase_cnv	-	4000
エミッタ側抵抗	Remit_cnv	-	100000
コンデンサ容量	C_cnv	-	0.0000000068

#### 4.2. 製品パラメータの水準設定

表 2 に示しました。

#### 4.3. 評価パラメータ

表 3

表示名	キー名	単位	データ同化係数
デューティ比	Duty	個	-
特性周波数	Frequency	個	-
残差二乗平均	Residual	個	-

#### 4.4. 評価の方法

FFT による評価を行うため、こちらのモデルでは Python を使用して評価値を計算します。

まず  $V(t)$  に対して numpy で FFT を行い、最も強度の高い周波数成分  $f_{max}$  と、その初期位相  $t_0$  を導出します。

目標パルス関数  $V_{obj}(t)$  を、目的周波数  $f_{obj}$ 、初期位相  $t_0$  で作成します。

$V_{obj}$  と  $V$  の残差二乗平均  $E_V$  は、 $f_{max} \rightarrow f_{obj}$  であるとき、 $V$  が完全なパルス波形に近づくほど小さい値になります。

JIANT で評価するパラメータは  $f_{max} \rightarrow f_{obj}$  からの乖離率  $E_f$  と  $E_V$  の、パルス自体の Duty 比とします。



表 2

No.	表示名	キー名	単位	水準1	水準2	水準3	水準4	水準5	水準6	水準7	水準8	水準9	水準10
1	ベース側抵抗	Rbase_env	-	60000	70000	80000	90000	100000	110000	120000	130000	140000	150000
2	エミッタ側抵抗	Remit_env	-	4100	4200	4300	4400	4500	4600	4700	4800	4900	5000
3	コンデンサ容量	C_env	-	6E-08	6E-08	6E-08	6E-08	7E-08	7E-08	7E-08	7E-08	7E-08	7E-08

## 5. 評価結果

Advance/JIANT のより、多水準直交表による計算から得られた要因効果図により、4つの設計パラメータの指標に対する感度を求めることができました。

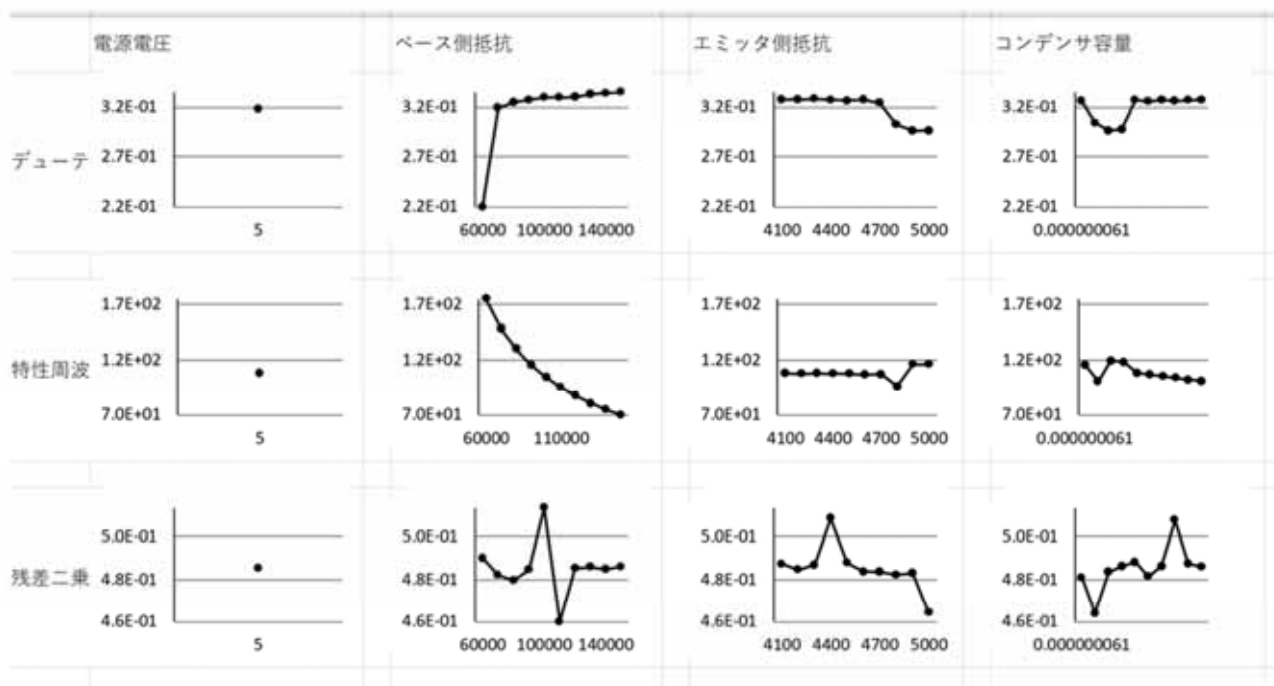


図 1

## 【半導体】5 段 CMOS リングオシレータの過渡解析 [A/TCAD]

## 1. 解析対象

CMOS リングオシレータ

## 2. 使用ソフトウェア

3 次元 TCAD システム Advance/TCAD

## 3. 背景

Advance/TCAD では複数デバイスと金属配線からなる系全体を一つのモデルとしてデバイスシミュレーション可能です。ここでは、5 段の CMOS インバータから構成させるリングオシレータの発振過程の過渡解析の事例を示します。

## 4. 解析モデル

図 1 に、5 段の CMOS インバータのデバイスシミュレーションモデルの俯瞰図を示します。これをリングオシレータとして動作させるには、インバータの出力をインバータの入力に接続する必要があります。Advance/TCAD の回路との連成機能を使用してこの接続をモデル化しています。

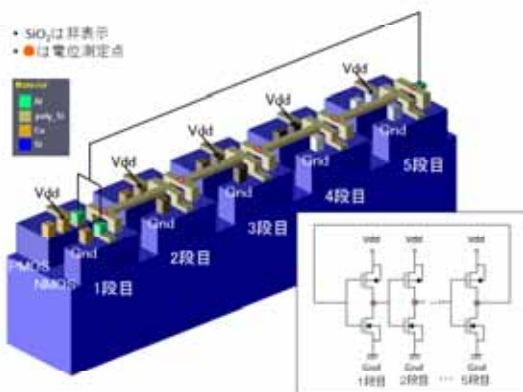


図 1 5 段 CMOS リングオシレータの解析モデル

また、CMOS トランジスタを接続する金属配線は低抵抗の半導体材料で模擬しており、NMOS トランジスタ、PMOS トランジスタ、および金属配線からなる系全体を 1 つのモデルとしてデバイス解析を行っています。

モデルの形状の詳細を図 2 に示します。PMOS、NMOS のゲート長は共に 200nm であるが、ゲート幅については PMOS を 1000nm、NMOS を 500nm としました。また、不純物プロファイルは図 3 に示す通りです。

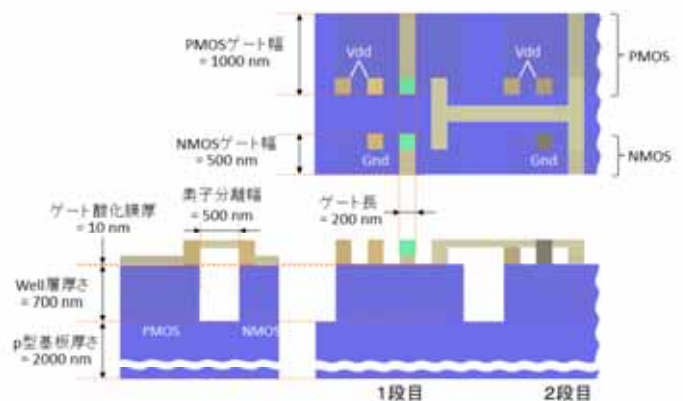


図 2 解析モデルの形状

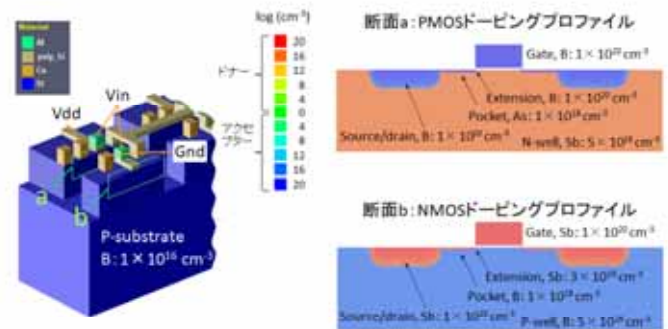


図 3 解析モデルの不純物プロファイル

## 5. 解析結果

電源 OFF 状態のリングオシレータに対して、VDD に 2V をステップ状に印加した直後からの各インバータの出力部（図 1 の赤丸）の静電ポテンシャルの時間変化を解析しました。図 4 に結果を示します。

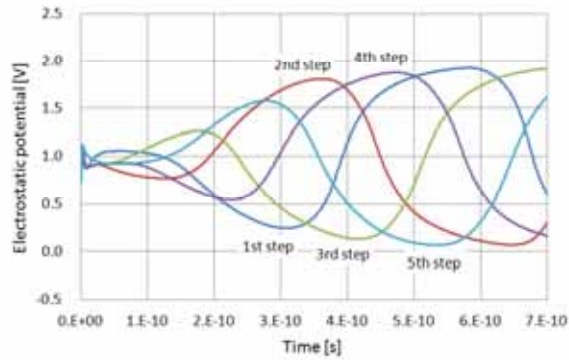


図 4 インバータ出力部の静電ポテンシャルの時間変化

各段の静電ポテンシャルが、一定間隔で周期をずらしながら振動し、徐々に振幅が大きくなる様子が再現できました。



## 【半導体】DRAM ソフトエラーのデバイスシミュレーション [A/TCAD]

## 1. 解析対象

DRAM

## 2. 使用ソフトウェア

3次元 TCAD システム Advance/TCAD

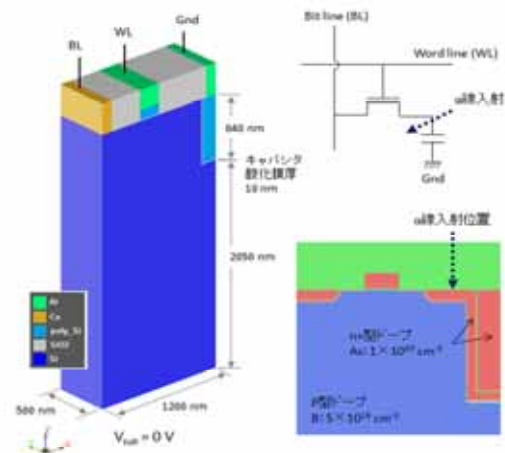
## 3. 背景

Advance/TCAD では、電子・正孔対の生成分布を入力ファイルとして自由に設定することが可能です。ここでは、DRAM への  $\alpha$  線入射による電子・正孔対の発生を仮定し、DRAM のソフトウェアが起きる様子を再現しました。

## 4. 解析モデル

DRAM の解析モデルを図 1 左に示します。 $\alpha$  線入射前の初期状態として DRAM にビット 1 が書き込まれた状態、つまりキャパシタが正に帯電した状態を得るために、まずは図 2 に示すように、ビット線 (BL) やワード線 (WL) を変えながら非定常計算を実施します。

この状態において図 1 右に示す位置に  $\alpha$  線が入射する場合を解析します。 $\alpha$  線はキャパシタの n+ 型ドープ領域と Si 基板の p 型ドープ領域の間の空乏層に Si 表面に垂直に入射されます。

図 1 DRAM の解析モデルと  $\alpha$  線入射位置

## 5. 解析結果

$\alpha$  線の入射による電子・正孔対の発生をシミュレーションしました。Advance/TCAD では電子・正孔対の発生率の空間分布をユーザーが指定する必要があるが、これを以下のように見積もりました。まず一般的な  $\alpha$  線のエネルギーを 1~10MeV 程度とします。保護膜を通過して 0.1MeV までエネルギーが減衰した  $\alpha$  線が Si 表面に到達すると仮定します。この  $\alpha$  線が Si に入射すると仮定し、Si での電子・正孔対の生成エネルギー 3.6eV、Si の電子的阻止能  $2.094 \times 10^3 \text{ MeV/cm}$  から、28000 個の電子・正孔対が 478nm の深さまでに 22ps 間の時間で生成されると見積もりました。この 22ps 間の過渡解析を実行後の電子、正孔密度分布と静電ポテンシャル分布を図 3 に示します

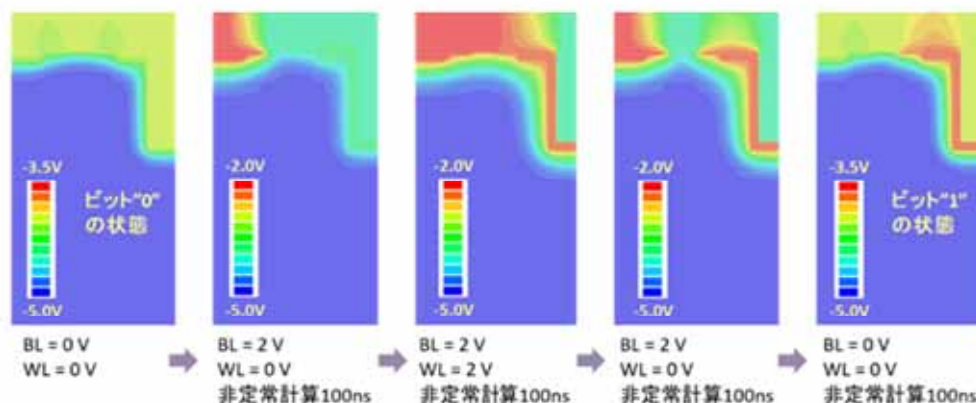


図 2 DRAM へのビット "1" 書き込み時の静電ポテンシャル分布

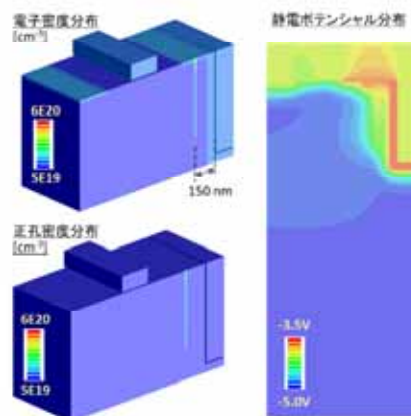


図3 DRAMの解析モデルとα線入射位置

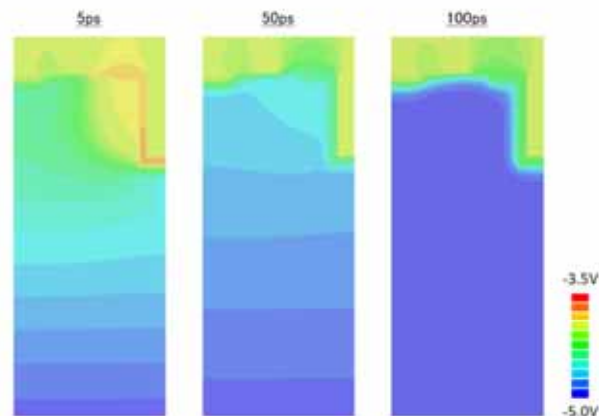


図4 α線通過後 1、50、100ps 後の静電ポテンシャル分布

次に継続してα線通過後の100ps間の過渡解析を実施しました。この間は、電子・正孔対は生成しておらず、移流・拡散の様子を見ることになります。図4に5、50、100ps後における静電ポテンシャル分布を示します。

5、50ps後の分布で、基板のSi領域が正電位となっていることが判かります。また、この間、キャパシタの正電位が小さくなっています。このことから空乏層に発生した電子・正孔対のうち、電子がキャパシタのn+領域に、正孔が基板電極に向かって移動していることが判かります。

また100ps後の分布は、図2の左に示したビット0の状態とほぼ同じ分布になっています。つまり発生した電子の大半がn+領域に移動してキャパシタの正の帯電が消滅しDRAMがビット0の状態に変化したことが判かります。また、発生した正孔の大半は基板電極へ移動したことが判かります。

## 【半導体】SRAM ソフトエラーの 3 次元デバイスシミュレーション [A/TCAD]

### 1. 解析対象

SRAM

10nm としました。ゲート酸化膜厚以外の高さ方向のサイズは両構造で同じとしました。

### 2. 使用ソフトウェア

3 次元 TCAD システム Advance/TCAD

### 3. 背景

半導体デバイスの微細化が進むにつれ、デバイスが高速化し、記憶容量が増大していく反面、 $\alpha$  線などの高エネルギー粒子によるメモリデバイスのソフトエラーが発生しやすくなります。特に SRAM ではその傾向が顕著です。本事例では、Advance/TCAD による SRAM ソフトエラーの 3 次元デバイスシミュレーションを実施し、ソフトエラーの入射エネルギー依存性およびデバイスサイズ依存性を解析します。

図 2 に  $L=200\text{nm}$  のモデルのレイアウトを示します。Tr1~6 はトランジスタの識別記号であり図 1 の記号に対応しています。NMOS トランジスタ Tr1 と Tr6 はアクセストランジスタであり、それ以外の 4 つのトランジスタは、Tr2 と Tr4、Tr3 と Tr5 がそれぞれ一組となってインバータを形成しています。

図 3 にデバイスシミュレーション用モデルの俯瞰図を示します。 $L=100\text{nm}$ 、 $L=200\text{nm}$  のモデル共通で、Si 表面から基板電極までの深さを  $5700\text{nm}$ 、素子分離の深さを  $700\text{nm}$  としました。 $L=100\text{nm}$  のモデルの基板、p-well、n-well の不純物濃度は  $L=200\text{nm}$  のモデルの 2 倍に設定しました。

### 4. 解析モデル

今回の解析では、ゲート長 ( $L$ ) が  $100\text{nm}$  と  $200\text{nm}$  の 2 種類の構造の SRAM を対象としました。各部の平面方向のサイズの 2 つの構造間の比率は、ゲート長と同じ比率 (1 : 2) としました。 $L=100\text{nm}$  と  $200\text{nm}$  のゲート酸化膜厚は、それぞれ  $5\text{nm}$  と

$\alpha$  線がシリコンに入射すると、光電効果により電子・正孔対が発生します。発生箇所がインバータの OFF 状態のトランジスタのドレイン側拡散層付近である場合にソフトエラーが発生しやすい。そこで本解析では、図 3 に示すように、ビット“1”の状態の SRAM における、OFF 状態の NMOS ト

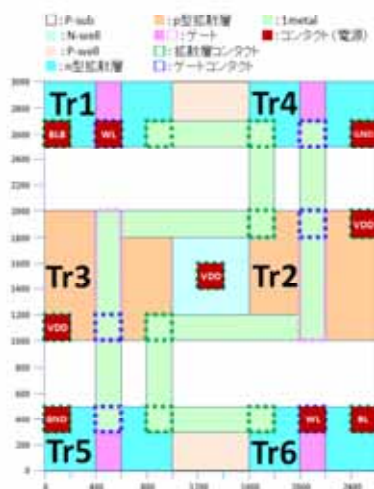


図 1 SRAM モデル ( $L=200\text{nm}$ ) のレイアウト

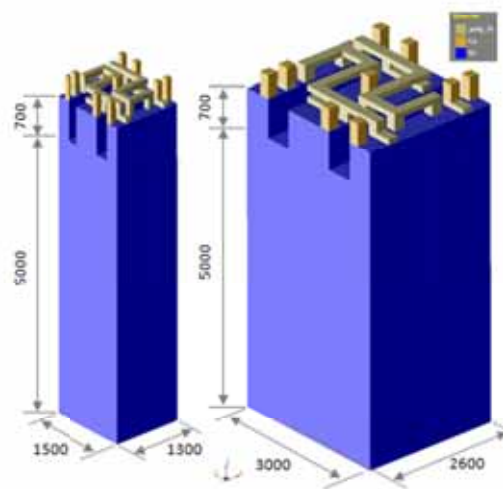


図 2 SRAM のデバイスシミュレーションモデル (左:  $L=100\text{nm}$ 、右:  $L=200\text{nm}$ 。手前の角が Tr5。SiO2 は非表示。単位は nm)



ランジスタ Tr5 のドレイン側拡散層付近に  $\alpha$  線が入射したとして電子・正孔対を発生させます。

今回、 $L=100\text{nm}$  のモデルでは入射エネルギー (E) が  $E=0.057\text{MeV}$  と  $E=0.696\text{MeV}$  の場合について、また  $L=200\text{nm}$  のモデルでは  $E=0.696\text{MeV}$  と  $E=0.865\text{MeV}$  の場合について解析を実施しました。電子・正孔対発生量は入射エネルギーと 1 個の電子・正孔対を生成するのに必要な平均エネルギー  $3.6\text{eV}$  から単純な除算で求めました。また侵入深

さは Si の電子的阻止能  $2.094 \times 10^3 (\text{MeV}/\text{cm})$  から単純な除算で求めました。

以上のように算出した個数の電子・正孔対をビット “1” の SRAM に対して侵入深さまで配置しました。例として、 $L=200\text{nm}$  のモデルに  $0.696\text{MeV}$  のエネルギーの  $\alpha$  線が入射した直後の電子密度分布を図 4 に示します。

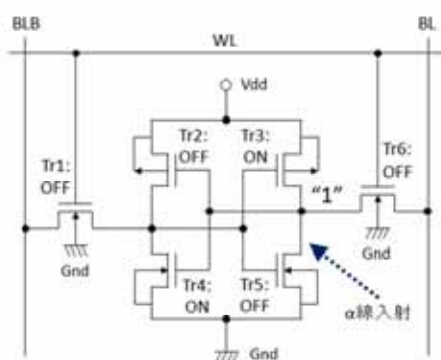


図 3 SRAM 回路図 (ビット “1” 状態の Tr5 拡散層に  $\alpha$  線が入射)

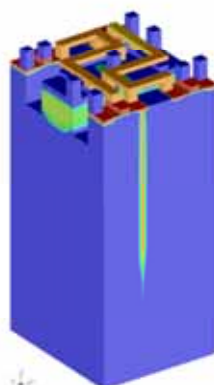


図 4 SRAM モデル ( $L=200\text{nm}$ ) の  $\alpha$  線入射直後の電子密度分布

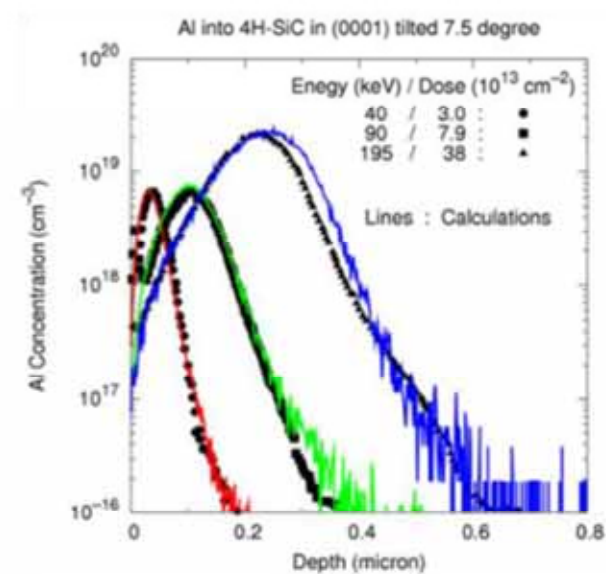
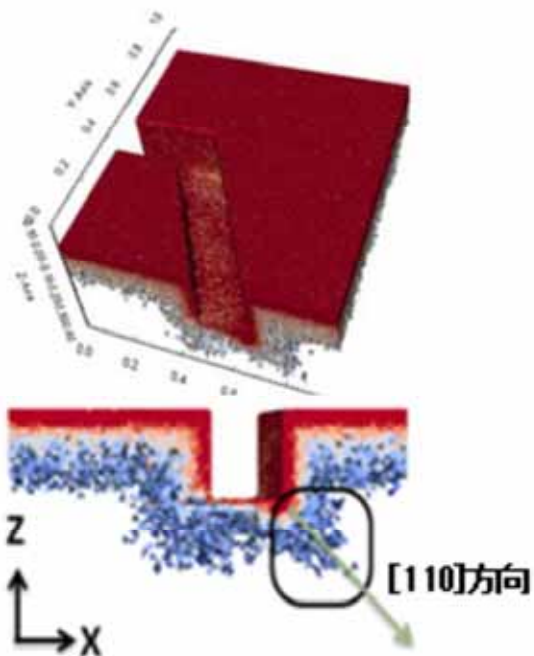
## 【半導体】イオン注入計算事例 [A/TCAD]

## 1. 概要

Advance/TCAD ではデバイス単体の特性だけでなく回路全体の特性を、3次元デバイスシミュレーションで一括解析することが可能です。これにより従来の回路モデルを中心とした解析と比較して、より高精度な解析が可能となります。

## 2. 使用ソフトウェア

3次元 TCAD システム Advance/TCAD

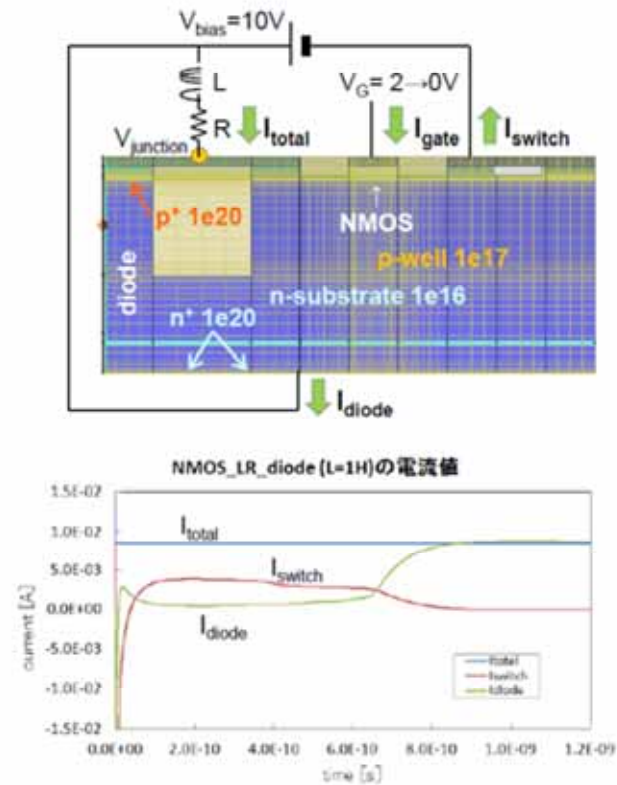


## 【自動車・運輸、エレクトロニクス】モータ制御デバイス解析 [A/TCAD]

### 1. 使用ソフトウェア

3次元 TCAD システム Advance/TCAD

### 2. 概要





## 【エレクトロニクス】回折格子とプラズモン増強 [A/ParallelWave]

## 1. 解析対象

金属を含む回折格子

- 波長 400nm の光(y 方向の直線偏光)を上部から照射します。

## 2. 使用ソフトウェア

電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave

Al にはドルーデモデルを用いて負の誘電率を設定します。

## 3. 解析モデル

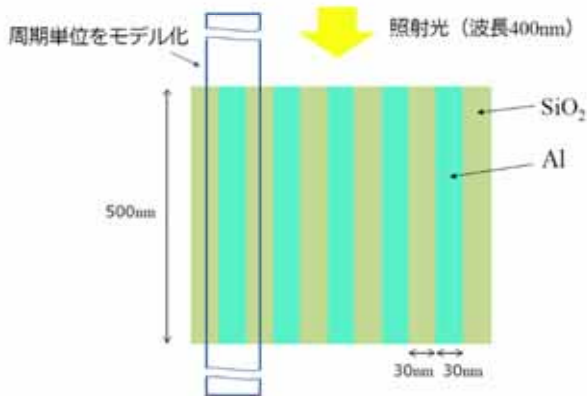


図 1

- Al と SiO<sub>2</sub> からなる回折格子。
- 周期構造なので、周期単位の部分だけモデル化します。
- 奥行き方向は、無限に連続する疑似 2 次元モデルとします。

## 4. 解析結果

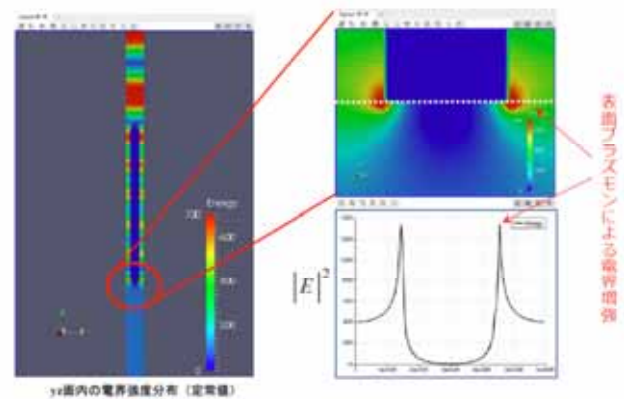


図 3

- 計算結果として、光の電界強度分布を示します。
- 回折格子下端の Al エッジ部分で、表面プラズモンによる電界増強が確認できます。

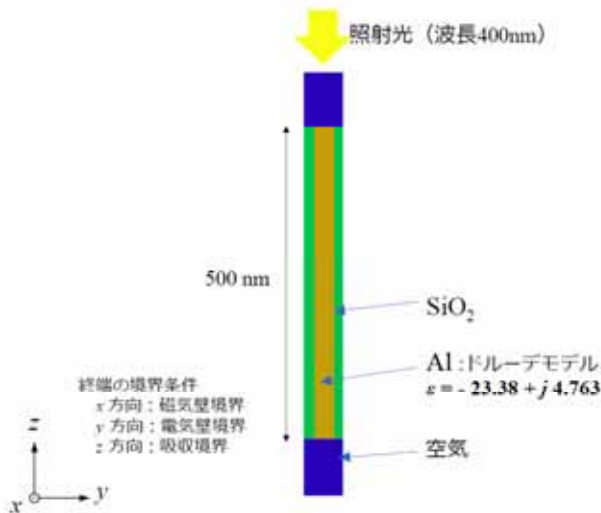


図 2 計算モデル

## 【エレクトロニクス】薄型太陽電池 [A/ParallelWave]

### 1. 解析対象

薄型太陽電池

### 2. 使用ソフトウェア

電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave

### 3. 解析モデル

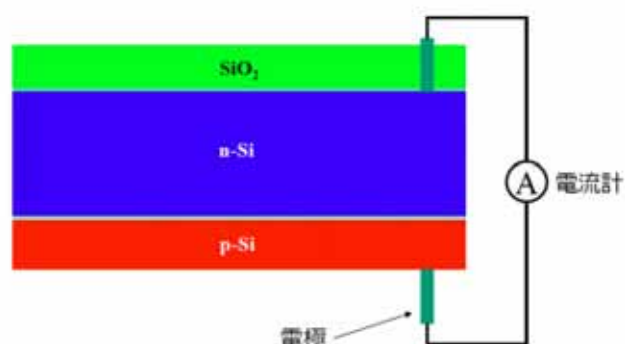


図1

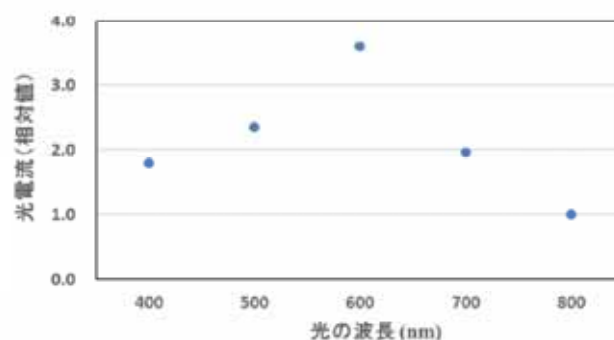


図3 発生した光電流

- 上左図(波長 400nm)と上右図(波長 700nm)に光波シミュレーションで得られた光吸収分布を示します。この光吸収分布をデバイスシミュレーションに入力します。
- デバイスシミュレーションで計算した光電流を波長ごとに示します。

- A/ParallelWave と A/TCAD を連成して太陽電池を解析することができます。
- 太陽電池モデルでは、n 型と p 型の Si で構成されます。
- 上下に電極を設定して、電極間の電流を計算します。

### 4. 解析結果

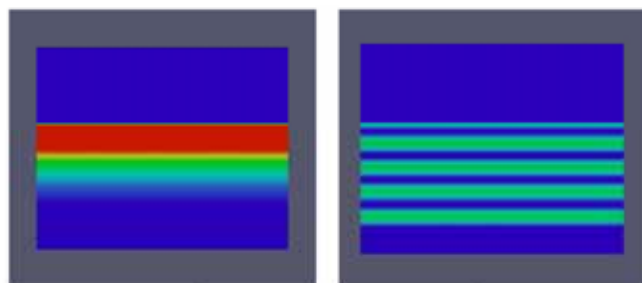


図2 光波シミュレーションの結果。  
光の吸収分布(定常値)

## 【エレクトロニクス】垂直色分離型センサー [A/ParallelWave]

## 1. 解析対象

垂直色分離型センサー

## 2. 使用ソフトウェア

電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave

## 3. 解析モデル

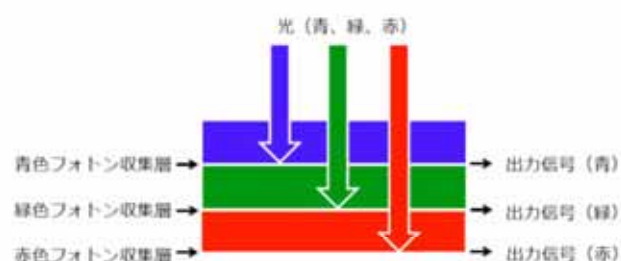


図1

- A/ParallelWave と A/TCAD を連成してセンサーを解析することができます。
- 垂直色分離センサーでは、垂直方向に3つの光子収集層があります。
- 光の3原色(青、緑、赤)の基板侵入深さの違いを利用して、色分離を実現します。
- まず、A/ParallelWave で光波シミュレーションを実行します。3種類の波長(青、緑、赤)で計算しました。光の強度分布としてガウス分布を設定しました。
- 次に、A/TCAD でデバイスシミュレーションを実行して、光電流を計算します。

## 4. 解析結果

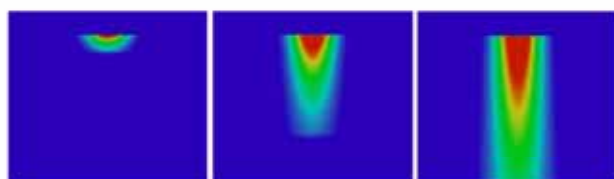


図2 光波シミュレーションの結果。光の吸収分布(定常値)

- 左図から、青色光、緑色光、赤色光の光吸収分布の結果。波長が長くなるに伴い、深い領域まで光吸収が分布しています。
- これらの光吸収分布を A/TCAD のデバイスシミュレーションに入力します。

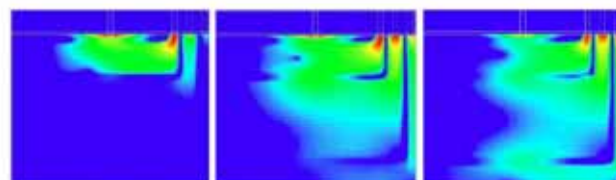


図3 デバイスシミュレーションの結果。Si内部の電流密度分布

- 左図から、青色光、緑色光、赤色光の電流密度分布の結果。
- 波長が長くなるに伴い、深い領域に位置するp/n接合で光電流が発生しています。



## 【エレクトロニクス】 マイクロレンズ付き受光素子 [A/ParallelWave]

### 1. 解析対象

マイクロレンズ付き受光素子

### 2. 使用ソフトウェア

電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave

### 3. 解析モデル

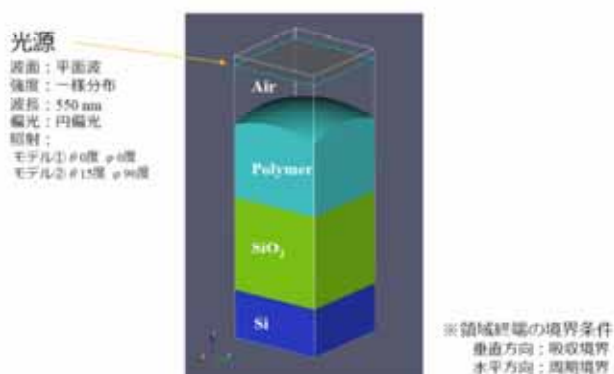


図 1

- Polymer/SiO<sub>2</sub>/Si の積層構造でマイクロレンズ付き受光素子を模擬しています。
- 光源としてモデルの上部から平面波を入射。入射光は波長 550nm で一様分布です。また、円偏光を設定しています。
- 水平方向の境界条件は周期境界であり、垂直方向は吸収境界を課しています。
- モデルでは、2 種類の入射方向を設定しました。垂直入射と斜め入射 ( $\theta=15$ ,  $\phi=90\text{deg}$ )。

### 4. 解析結果

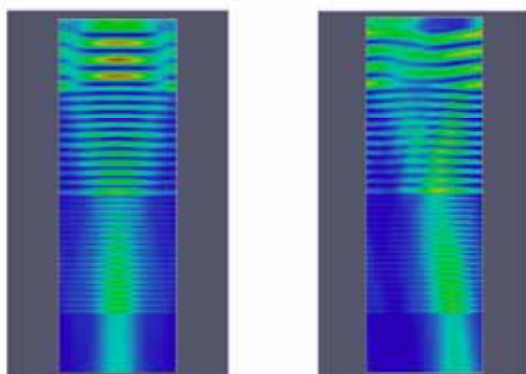


図 2 光の強度分布 (定常値)

## 【材料・化学、半導体】表面反応の解析事例 [A/FFred]

## 1. 使用ソフトウェア

流体解析ソフトウェア Advance/Flow/red

## 2. CVD プロセスの解析事例

CVD (Chemical Vapor Deposition) プロセスの解析事例として、 $\text{SiF}_4$  (四フッ化ケイ素) と  $\text{NH}_3$  (アンモニア) のガスを吹き付けて、基板表面上に Si と N が沈着する過程を解析しました。

## 2.1. 解析条件の概要

表 1

項目	設定
初期設定	四フッ化ケイ素 50%
雰囲気気温度	300℃
基板表面温度	1440 度
化学反応モデル	反応モデル (ガス反応: 33 反応式, 17 化学種, 表面反応: 6 反応式, 6 化学種)
反応速度	CHEMKIN®

## 2.2. 解析結果

## 2.2.1. 解析モデル

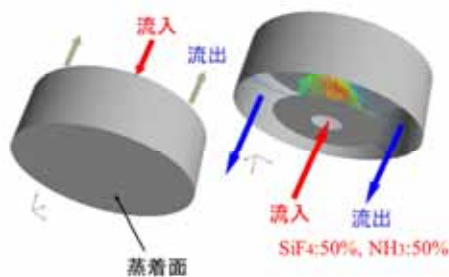


図 1

## 2.2.2. 蒸着面における Si 膜厚分布

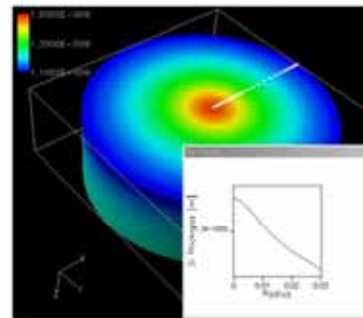


図 2

## 2.2.3. Si 膜厚分布

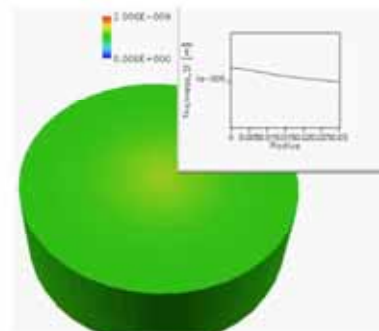


図 3

## 2.2.4. 蒸着速度分布

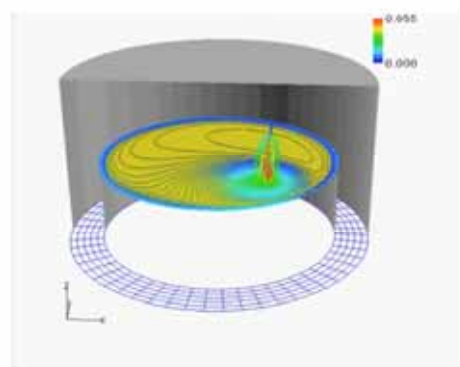


図 4

## 3. 乾燥過程の解析事例

塗料に窒素ガスを吹き付けて乾燥させる過程を解析しました。

### 3.1. 解析条件の概要

#### 3.1.1. 解析モデル

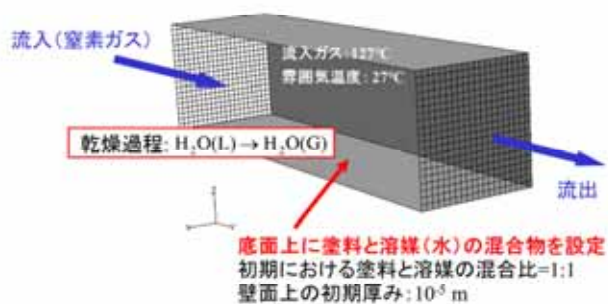


図 5

#### 3.1.2. 解析結果

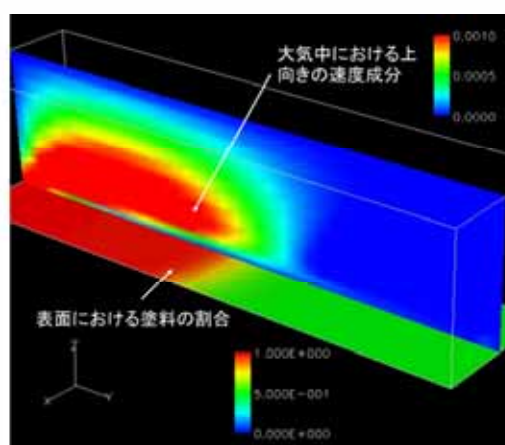


図 6

### 4. 適用例

- 半導体製造、金属膜形成およびそれらの装置開発 (CVD, ALD プロセス解析)
- 塗布・乾燥過程 (均一塗装, 膜厚コントロールなど)
- 壁面液滴生成過程 (センサー等の機器表面上の結露防止, 形状最適化など)



## 【建築土木】多孔性媒質を考慮した流れ場の評価 [A/FFred]

## 1. 解析概要

流体計算を行うために、多孔性物質を詳細に表現しつつ計算格子を作成することは困難です。解析において植栽・防風壁・フィルタなどが存在する場合は有効な多孔質モデルを用いることが適切です。本解析では FrontFlow/red に組み込まれた多孔性物質モデルを用いたシミュレーションを行い、結果を実測値と比較します。

解析領域は図1のような2次元領域で、流入側から2mの位置に多孔性物質として、厚さ0.5m、高さ2mの植栽壁を設置します。

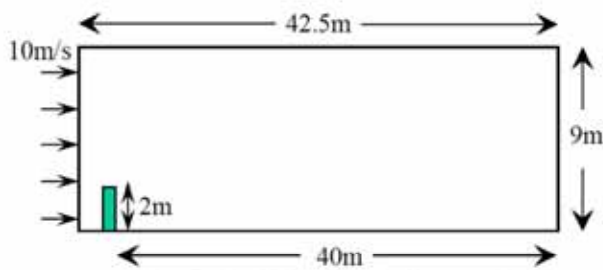


図1 2次元解析領域（植栽壁は緑の領域）

## 2. 使用ソフトウェア

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red

## 3. 計算条件の概要

シミュレーションの計算条件を以下のように設定します。

## 3.1. 境界条件

表1

境界	境界条件
流入	10[m/s]の一様流速
流出	開放
下端	滑り無し壁
上端	滑り壁

## 3.2. 初期条件

表2

項目	設定
流速 [m/s]	(u,w) = (10,0)

## 3.3. 物性値

表3

項目	設定
空気の密度 [Kg/m³]	1.2
粘性係数 [Pa・s]	1.82 x 10 <sup>-5</sup>

## 3.4. 時間積分

表4

項目	設定
時間刻み[s]	0.001
計算ステップ数	2000

植栽の効果は多孔質媒質のべき乗則モデルとして与え、運動量方程式に

$$S_i = -C_0 |\vec{v}|^{C_1} \vec{v}_i$$

という生成項を加えることで与えます。ここで  $\vec{v}_i$  は速度方向の単位ベクトルであり、 $C_0$  と  $C_1$  はユーザー定義のパラメータです。（本計算ではそれぞれ、 $C_0=50$ 、 $C_1=1$  と与えました。）

## 4. 解析結果

定常解に達したときの圧力分布と風ベクトルを図2に示します。圧力分布はカラーマップで示されており、規格化速度  $U/U_0$  に対する等値線を引いています。流れは植栽壁を回り込むように流れているものの、一部植栽壁を通過するものもあります。

植栽壁回りの流速分布の詳細は図3に示されていて、計測値([1]を参照)と比べることでモデルが現実的な結果を与えていることが分かります。

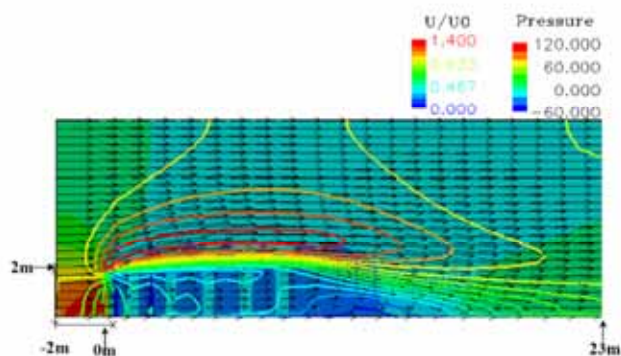


図 2 計算結果断面図(-2m ≤ x ≤ 23m の領域)

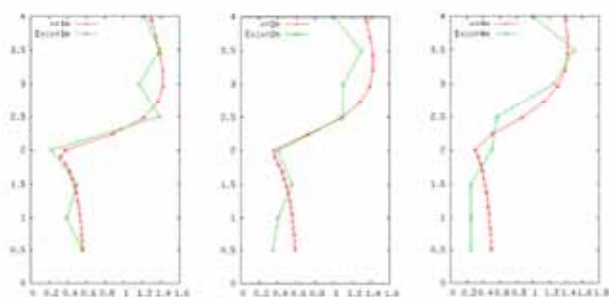


図 3 植栽周辺の高さ方向速度分布

(赤:計算結果、緑:実測値)。

分布は左より順に x=1, 2, 4 m 線上で引かれている。

## 5. 適用例

暴風壁と同様に、フィルターを通過する流れやファンを通過するときの影響を近似的に扱う場合に適用できます。

## 6. 参考文献

[1] 風工学研究所編著, 2005 年, 「ビル風の基礎知識」 p76,77, 鹿島出版会

## 【環境／防災】地震による地盤の変動を解析するプログラム [A/FSTR]

## 1. 解析対象

Advance/FrontSTR の地盤の変動解析を行う機能 Advance/FrontSTR/GEOS の機能詳細と、地震による地表の変位解析事例をご紹介します。

## 2. 使用ソフトウェア

構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR

## 3. 機能詳細

## 3.1. プログラムの概要

地震の発生によって、地表がどう動き、地盤がどのようなひずみを受けるかを解析するシステムが開発されました。このシステムは、例えば地震によって港などの海岸の水位がどう変わるかを見積もるために使えます。また、裏山が地震でどんなひずみを受けるかを予測する目的に使えます。今後は、断層運動による地震の揺れ、地震前後にゆっくりと進行する変動なども解析できるように、プログラムの強化を進めてまいります。

## 3.2. 解析システムの特長

- ・有限要素法によって精度の高い計算をします。
- ・列計算によって高速な処理ができます。
- ・スプリット・ノード法により、要素をゆがめずに断層を柔軟に取り込みます。
- ・無限要素の導入によって、小さな領域の計算で精度の高い予測結果を得ます。
- ・解析には地球内部の現実的な構造が使われます。

## 3.3. 弊社は以下の問題に対応が可能です

- ・解析プログラムの販売
- ・各種の目的に対応した解析プログラムの改造や開発
- ・具体的な地震を想定した地盤変動の見積もり
- ・具体的な施設などに対する周辺の地震活動の影響評価

## 3.4. 解析精度検証例題

本システムでは地盤モデル端部の境界条件に無

限要素を使用します。均質な地盤内部に断層すべりを与え、解析規模ごとの解の精度を比較するとともに無限要素の効果を検証しました。

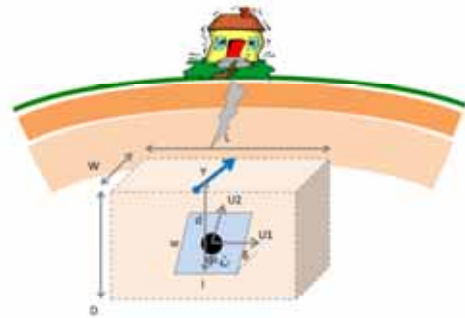


図1 地質地盤の有限解析モデル

- ・傾斜角： $\delta = 30^\circ$
- ・断層の深さ： $d=40\text{km}$
- ・地盤の材質： $E=100\text{GPa}$ ,  $\nu=0.25$
- ・断層面規模： $l=w=50\text{km}$
- ・断層すべり量： $U1=0\text{m}, U2=1\text{m}$

無限要素の導入によって、小さな領域の計算で精度の高い予測結果を得ます。

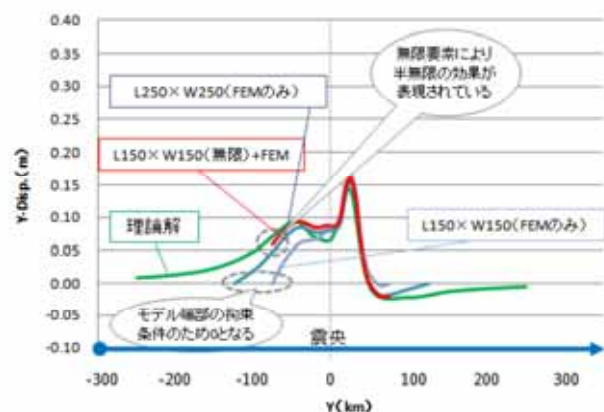


図2 すべり方向変位

## 3.5. 機能の詳細

日本周辺に発生する地震が日本列島に及ぼす影響を簡単に解析できます（日本以外の領域も解析可能です）。震源断層の位置、すべり量から地表面の変形や地盤内部の応力を求めることができます。解析手法としては大規模並列高速有限要素法



を採用し、解析モデルの自動作成機能も備えていることから、モデル作成～解析のすべての処理を短時間で、地震の影響を地下の複雑構造を考慮して解析できます。今まで実現できなかった大規模な3次元地盤解析も可能となります。

### 3.6. 解析対象

地盤領域（日本周辺についてはデータを内蔵しています）、震源 最大モデル規模：1億自由度（約3千万節点）



図3 システムフロー

表1

解析機能	<ul style="list-style-type: none"> <li>・線形解析(静応力)</li> <li>・split node による断層すべり機能</li> <li>・無限要素による半無限境界処理機能</li> </ul>
解析手法	<ul style="list-style-type: none"> <li>・領域分割；DDM(Domain Decomposition method)</li> <li>・ソルバー；前処理付反復法（Conjugate Gradient method）、直接法等</li> </ul>
要素タイプ	<ul style="list-style-type: none"> <li>・ソリッド（4面体、5面体、6面体）</li> <li>・無限要素（6面体）</li> </ul>
荷重条件	<ul style="list-style-type: none"> <li>・断層すべり（断層面形状；四辺形の組合せ、すべり量；3方向）</li> <li>・集中荷重、分布荷重、体積力、SPC（強制変位）</li> </ul>
データ生成、内蔵データベース	<ul style="list-style-type: none"> <li>・モデラー 自動メッシュ分割、断層面自動発生、材質の自動定義、半無限境界発生 地盤定数 定義</li> <li>・データベース（東経129°～146°、北緯29°～45°、深さ－10～90km）</li> </ul>

## 【建築土木、環境／防災】長大トラス橋の地震応答解析事例 [A/FSTR]

## 1. 解析対象

長大橋梁は重要な社会インフラですが、大規模地震時には、特に震源近傍に存在する橋梁において、その機能が損なわれるほどの損傷を受ける例も多くあります。適切な耐震補強の実施や、被災時の迅速な復旧には、地震動に対して対象となる橋梁がどのような挙動を示すかを知ることが不可欠です。そこで、ここでは長大トラス橋を対象とし、その地震時応答を有限要素法により解析した事例を紹介します。

## 2. 使用ソフトウェア

構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR

## 3. 解析概要

3 径間連続の長大トラス橋の上部工を梁要素およびシェル要素でモデル化し（図 1）、震源近傍の特徴を有する地震波を入力として直接積分法による時刻歴応答解析を行いました。梁要素にはすべて同一の材料定数、断面形状を仮定し、実在する橋梁を参考にその値を設定しました。また、時刻歴応答解析に先立ち固有振動解析を実施し、構造物の動的特性を把握しました。時刻歴応答解析においては、先に得られた 1 次および 3 次の固有振動数において減衰比が 2% となるような Rayleigh 減衰を設定しました。時間積分法は Newmark の  $\beta$  法 ( $\beta=0.25$ ,  $\gamma=0.5$ ) を採用し、時間ステップは 0.01 秒、解析時間は 150 秒としました。入力波形は図 2 に示す加速度波形を採用し、実際の計算に際しては加速度波形を適切なフィルタを通して積分することで得た変位波形を強制変位としてモデルの下端に入力しました。



図 1: 計算に使用した解析モデル（橋脚は解析対象外）

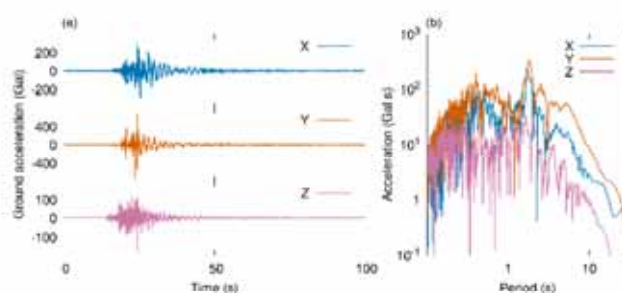


図 2: 入力として採用した地震動の (a) 加速度波形と (b) その Fourier 振幅スペクトル

## 4. 解析結果

・得られたモード形状からは、橋軸直角方向に大きく曲がるモードが最も低次のモードとなっており（図 3a）、次いで鉛直方向のモードとなっていることがわかります（図 3b）。なお、固有振動数は、1 次から順に、0.60, 1.22, 1.61, 2.24 Hz となりました。

・図 4 (a) に示す橋梁上端部での相対変位応答および図 4 (b) に示す絶対加速度応答からは、橋軸直角方向の成分が他の成分と比較して極めて大きくなっていることがわかります。これは、入力地震動の Fourier 振幅スペクトルにおいて、Y 成分が 1 次モードの固有振動数に近い振動数成分を多く含むことと整合しています。

・また、入力地震動では X 成分が Z 成分よりも大きな振幅を有するにもかかわらず、相対変位は X 成分が極めて小さく、Z 成分のほうが大きくなっています。これは、橋軸方向の振動モードは低次のモードとして表れていないことと符合します。

・図 5 に橋軸直角方向の振幅が大きな値をとる  $t=29.20$ s におけるスナップショットを示します。変形の形状からは 1 次モードが卓越していることがわかります。また、Mises 応力はスパン中央よりも支承近傍において大きな値となっています。

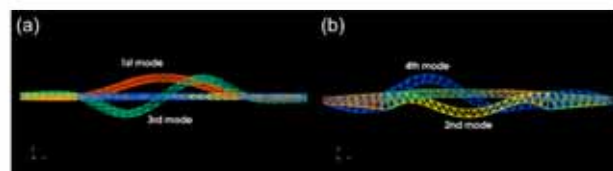


図 3: 得られたモード形状

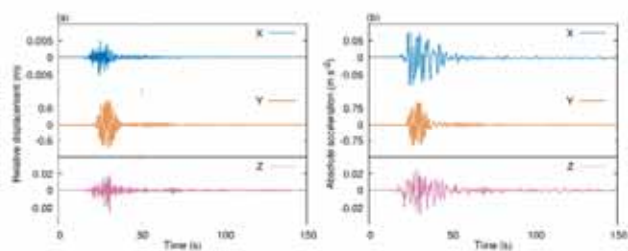


図 4：時刻歴応答解析により得られた橋梁上端部での相対変位応答および絶対加速度応答

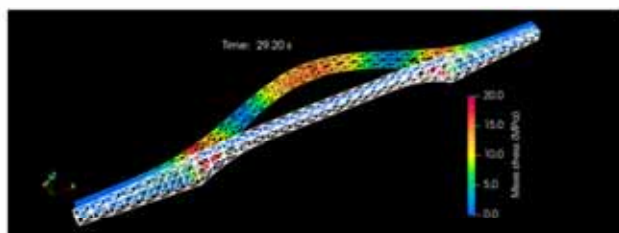


図 5：時刻  $t=29.20$  s におけるスナップショット  
(変形は 50 倍で描画)



## 【建築土木】梵鐘の構造音響弱連成解析 [A/FNoise]

## 1. 概要

構造物の振動により発生する騒音を数値解析する方法の一つとして、時刻歴応答の振動解析の結果を利用して周波数領域で音響解析を実施する構造音響弱連成解析があります。打突による梵鐘の振動を音源とした音響解析を事例として、構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR と音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise を用いた構造音響弱連成解析をご紹介します。

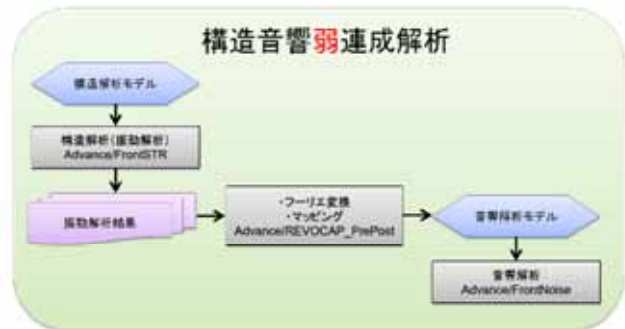


図1 構造音響弱連成解析の実施手順

## 2. 使用ソフトウェア

音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise

構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR

## 3. 構造音響弱連成解析の流れ

Advance/FrontNoise と Advance/FrontSTR を使用した構造音響弱連成解析の実施手順を図1に示します。Advance/FrontSTR で振動解析によって構造物表面の変位の時刻歴応答を取得します。音響解析は周波数領域で実施するため、変位の時刻歴応答を周波数応答に変換し、変位の周波数応答を音源として音響解析を実施します。

## 4. 構造解析 (Advance/FrontSTR)

Advance/FrontSTR を使用し、梵鐘を打突した後の自由振動解析を実施します。解析ではレイリー減衰を適用しました。

## 4.1. 解析モデル

解析モデルを図2に示します。形状は実際の梵鐘の断面図から概寸を読み取り、高さ91.5cm、口外径64cmの大きさの梵鐘としてスケリングしました。梵鐘は軸対称モデルとし、解析モデルは1/2対称モデルとしました。計算精度を高めるために、六面体要素を使用しました。

## 4.2. 構造材料物性

梵鐘の材料はリン青銅1としました。物性値を表2に示します。

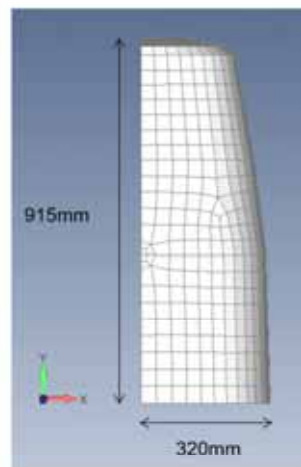


図2 構造解析モデル

表2 梵鐘の物性値

項目	値
ヤング率	$1.10 \times 10^5$ MPa
ポアソン比	0.33
密度	$8.80 \times 10^{-9}$ t/mm <sup>3</sup>

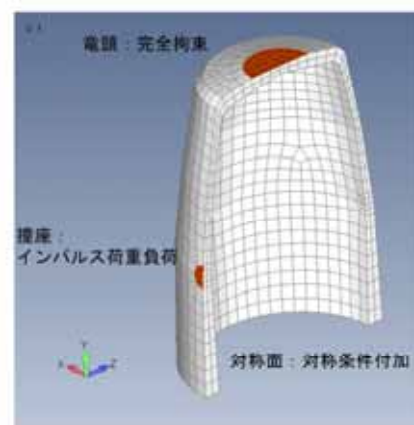


図3 境界・荷重条件

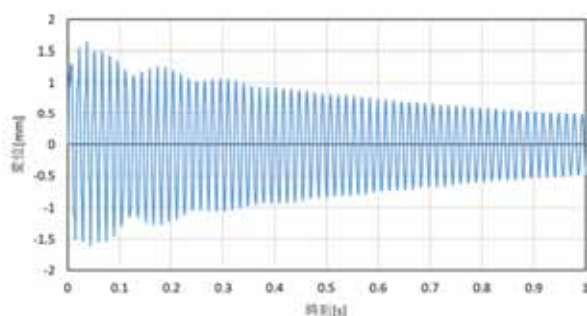


図4 代表点の打突方向変位時刻歴

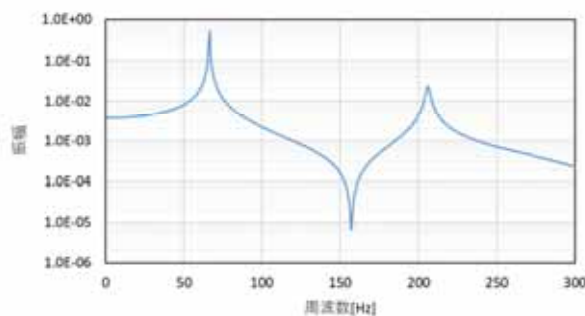


図6 代表点における変位振幅の周波数特性

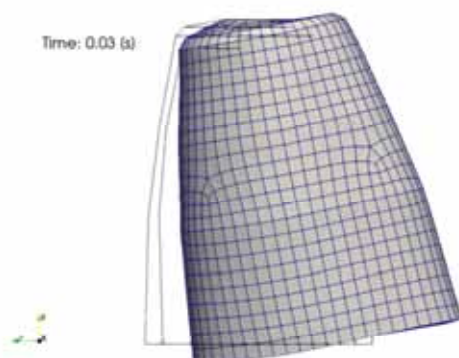


図5 梵鐘の100倍変形図

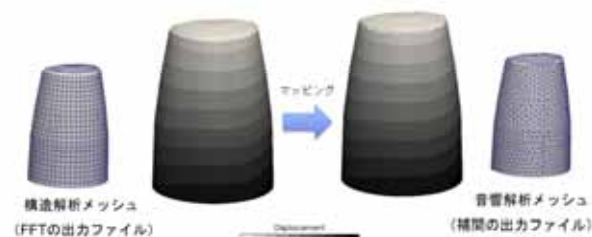


図7 変位のマッピング前後の変位の周波数応答の比較

#### 4.3. 境界・荷重条件

梵鐘を吊るす竜頭となる上面位置を完全固定とし、対称面は対称境界条件を設定しました。撞木によって打たれる撞座の領域にインパルス荷重を与え、自由振動としました。またレイリー減衰を適用しました。

#### 4.4. 構造解析結果

代表点における打突方向の変位時刻歴を図4に示します。最大変位が1.5 mm程度の変位時刻歴が得られました。梵鐘は図5の変形図のように打突方向に揺れを繰り返し、徐々に振動は減衰していきました。

### 5. フーリエ変換及びマッピング (Advance/REVOCAP\_Prepost)

#### 5.1.1. 使用ツール

振動解析結果のフーリエ変換とマッピングは、Advance/REVOCAP\_Prepost に付属するスクリプトを使用します。なお、スクリプトは Advance /FrontNoise および Advance/FrontSTR のユーザーにもご提供しております。

#### 5.2. フーリエ変換

Advance/FrontNoise の境界条件は、変位、速度、加速度に対応しています。今回の解析では、変位境界を使用します。構造解析で得られた変位の時刻歴応答をフーリエ変換し、変位の周波数特性を求めます。代表点における変位振幅の周波数特性を図5に示します。振幅のピークは65 Hzと205 Hzでした。

#### 5.3. マッピング

構造解析では、計算精度を高めるために六面体要素を使用しました。音響解析は、四面体一次要素で精度を担保できるため、形状の再現性の良い四面体要素を使用しています。要素の形状が異なるため、構造解析の境界面上で算出した変位の周波数応答を音響解析で使用するメッシュの境界面にマッピングする必要があります。マッピング前後の変位の周波数応答を図7に示します。構造解析モデルの変位が音響解析モデルに適正にマッピングされていることが確認できました。



## 6. 音響解析 (Advance/FrontNoise)

音響解析ソフト Advance/FrontNoise を使用して、周波数領域の音響解析を実施します。

### 6.1. 解析モデル

地面を原点として、地上部分の半径 3 m の 1/4 球を解析領域としました。梵鐘の下端部が地面から 1.5 m となるように、原点の直上に梵鐘を配置しました。作成した音響解析モデルを図 8 に示します。

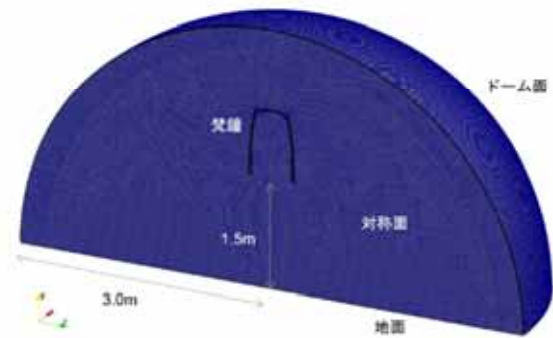


図 8 音響解析モデル

### 6.2. 音響材料物性

音響材料は空気とし、表 2 の物性値を与えました。

表 2 音響材料物性

項目	値
密度	1.225 kg/m <sup>3</sup>
音速	340.0 m/s

### 6.3. 境界条件

図 8 において、地面と対称面は完全反射境界、半球のドーム面には無限要素境界を定義しました。梵鐘の表面は構造解析から得られた変位の周波数特性を与えました。

### 6.4. 計算周波数

周波数域 5~300 Hz を 5 Hz 刻みで計算しました。

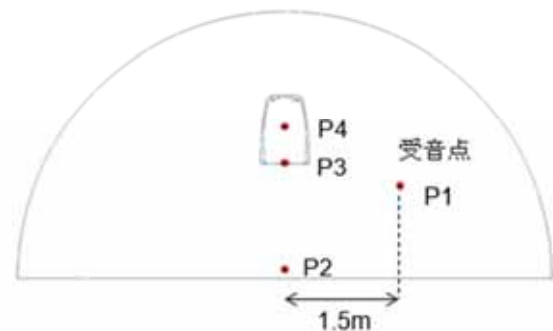


図 9 受音点の位置

## 6.5. 音響解析結果

### 6.5.1. 受音点における音圧レベルの周波数特性

受音点位置の位置を図 9 に、受音点における音圧レベルの周波数特性を図 10 に示します。構造解析の周波数応答と同様に、65 Hz と 205 Hz で音圧レベルがピークとなりました。櫻井ら[1]による日本のお寺の梵鐘の音楽的調査の結果では、低いピークで 41~129 Hz、次の高次部分音が 109~312 Hz と報告されており、本解析結果と一致しています。受音点の位置の違いについては、梵鐘中心の真下 (P2—P4) では、梵鐘の外側 (P1) よりも音圧レベルが低く、音圧レベルが急激に低下している周波数がありました。これは、梵鐘の真下では、音波が打ち消しあっているためです。

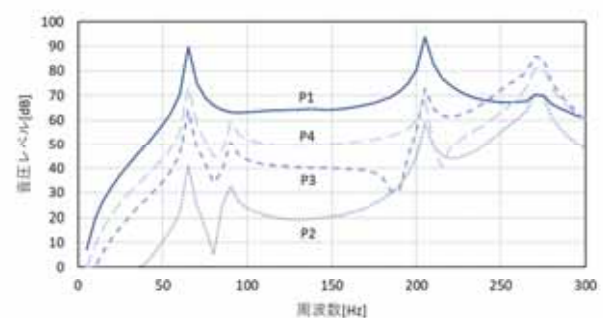


図 10 受音点における音圧レベルの周波数特性

### 6.5.2. 65 Hz と 205 Hz における音圧レベルの分布

音圧レベルがピークとなった、65 Hz と 205 Hz における音圧レベルの分布を図 11 に示します。どちらも撞座位置からほぼ対称に音が広がっていく様子を確認することができました。また、梵鐘の中心は周囲よりも音圧レベルが低下していることが確認できました。



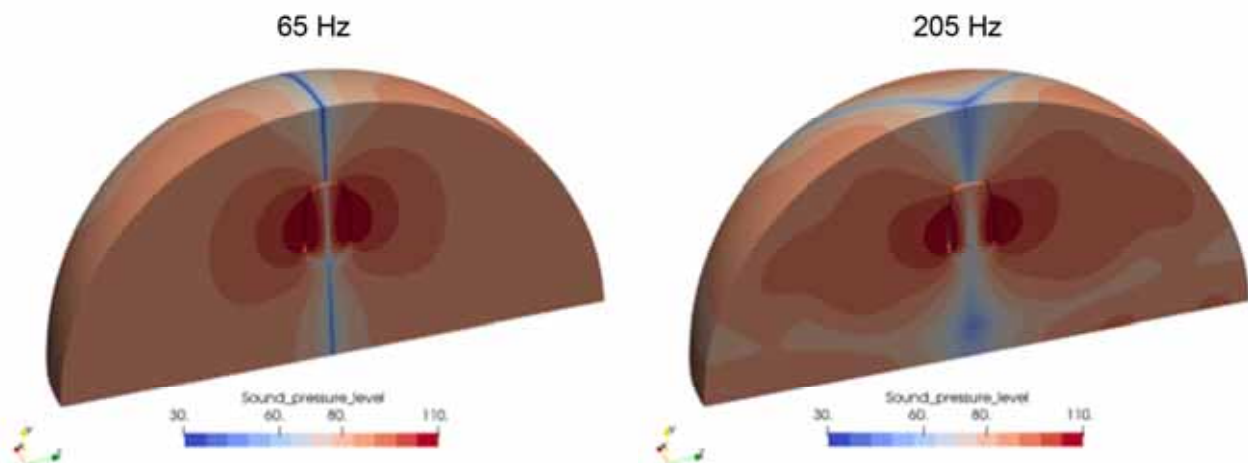


図 11 ピーク周波数における音圧レベル [dB] の分布

## 7. おまけ

梵鐘の中央真下の位置では、音波が打ち消しあって音が小さくなります。図 10 や図 11 の解析結果でも、梵鐘から離れた位置よりも、梵鐘の真下の位置の方が、音圧レベルが小さくなっていることが分かります。1922 年、日本を訪れていたアインシュタインは知恩院を訪問した際に、実際に梵鐘の真下に立ち、僧に梵鐘をついてもらって、梵鐘の真下では音が小さくなる現象を自ら体験したそうです。

## 参考文献

- [1] 櫻井他,日本の梵鐘の部分音と振動モードについて,人間環境科学 27 巻 3~13,2020

## 【建築土木、材料・化学】中性子残留応力解析 [A/iMacle]

## 1. 解析対象

鉄鋼や非鉄金属材料、セラミックス材料、金属基複合材料、小型部品から大型部品

## 2. 使用ソフトウェア

深層学習用ツール Advance/iMacle

## 3. 背景

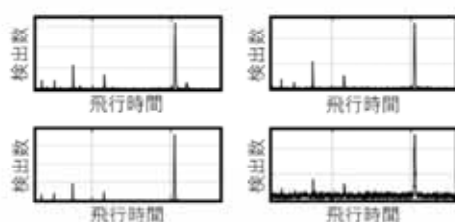
アドバンスソフトでは、当社独自の深層学習用ツール Advance/iMacle (アイマークル) を開発し、さまざまなデータに対し、人工知能 (AI) 技術を駆使して分析/知識化を行い、そこで創出した情報/価値によって、問題の解決を図ることを目的としたソリューションの提供を始めました。

Advance/iMacle の実証試験として、J-PARC (Japan Proton Accelerator Research Complex, 大強度陽子加速器施設, 茨城県東海村) の中性子ビームラインを利用した中性子回折実験により測定されたデータに対し、AI が一般的なデータ解析手法の代替手段と成り得るかについて検証することを試みました。

## 4. 解析モデル

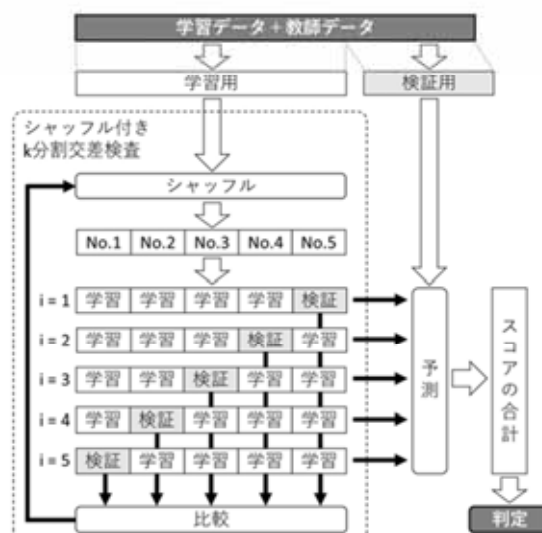
## 4.1. 使用するデータ

適用事例では、BL19 工学材料解析装置「匠」TAKUMI) で実施した中性子回折実験の測定データを使用しました。「北側検出器」か「南側検出器」、「分析試料」か「無ひずみ材」、「縦置き」か「横置き」、の異なる 8 パターンの選択条件で測定され、測定点として 10 箇所、深さ方向に最大 10 箇所の測定条件の異なる 616 個の飛行時間スペクトル (1 次元ヒストグラム) を使用します。その中性子飛行時間スペクトルの例を次図に示します。



## 4.2. 学習・検証方法

後述の解析結果①「他クラス分類」における学習・検証フローを右図に示します。ここでは、最初に学習データと教師データ (教師ラベル) からなるデータセットから一部のデータを隔離し、残りのデータに対してシャッフル付き k 分割交差検査法を用いて学習させました。複数の弱学習器を用いる場合、通常、ブースティングやバギングと呼ばれる手法がよく用いられるが、ここでは単純にシャッフル付き k 分割交差検査法で学習させた各学習器の予測 (分類であれば各クラスに分類される確率、回帰であれば予測値) の合計 (平均) を予測結果とすることで、過学習の防止と予測精度の向上を試みました。

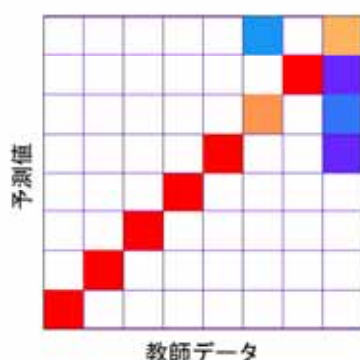


## 5. 解析結果

## 5.1. 「多クラス分類」の適用結果

多クラス分類の適用事例では、「北側検出器」か「南側検出器」、「分析試料」か「無ひずみ材」、「縦置き」か「横置き」、の 3 つの選択条件の組み合わせた 8 パターンを分類できるか、試みました。その結果を右図に示します。学習後の検証用データに対する予測結果は、横軸に教師データ (正解)、縦軸に学習器による予測値です。横軸 (正解) と縦軸 (予測値) はほぼ一致しており、正しい予測結果が得られました。実験データを目視することや、ルールベースによる解析でこの判別を行うこと

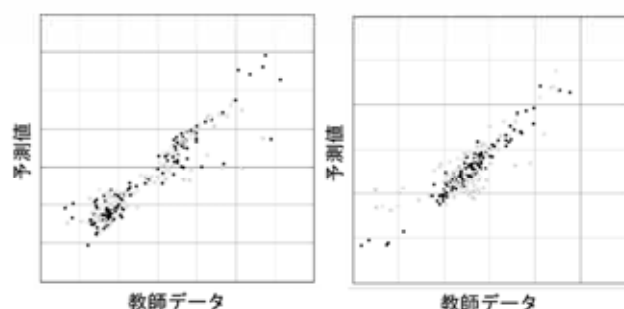
は難しい。適用事例では、非常に高い確率で正解しており、人間では認識が難しいデータの特徴を見出し、ニューラルネットワークが学習できていることを示しています。



## 5.2. 「回帰分析」の適用結果

### 5.2.1. 飛行時間

回帰分析の適用事例では、まず、簡単な解析結果を予測できるか、試みました。飛行時間スペクトルに対し、特定の回折ピークへのガウス関数フィッティングにより得られたピーク中心値を教師データとして回帰分析を行いました。その結果を右図に示します。横軸は教師データ（正解値）、縦軸は学習器による予測値です。黒点は学習に使用したデータに対する予測結果、白丸は学習に使用しなかった未知のデータに対する予測結果を示します。ある特定のピークの中心値という簡単な課題ではありますが、予測結果は概ね教師データを再現する傾向を示しています。



(左) 飛行時間、(右) 格子定数

### 5.2.2. 格子定数

次に複雑な解析手法であるリートベルト解析による結果を予測できるか、試みました。リートベルト解析とは、測定された飛行時間スペクトルに対し、結晶構造やピーク形状などに関するパラ

メータから計算される回折パターンを対応させ、最小二乗法によるフィッティングを行うことで、精密なパラメータを導出する解析手法です。ここでは、複数あるパラメータのうち、格子定数を教師データとしてニューラルネットワークに学習させ、予測させる回帰分析を行いました。その結果を右図に示します。横軸は教師データ（正解値）、縦軸は学習器による予測値です。黒点は学習に使用したデータに対する予測結果、白丸は学習に使用しなかった未知のデータに対する予測結果を示します。多くのパラメータの相関により求められる格子定数という難しいと考えられた課題がありますが、予測結果は概ね教師データを再現する傾向を示しています。大まかな予測であれば、解析コストを削減できる可能性があります。

### 5.2.3. 適用事例の考察

深層学習ツール Advance/iMacle 適用事例では、通常は自明である測定条件の判別予測や、解析で求めることができる物理量の予測について示しました。ディープラーニング的な手法をデータ解析に応用することで、従来のルールベースによるデータ解析とは異なる利点があることを示唆しています。

通常、実験で得られるデータには外乱によるバックグラウンドノイズや、測定機器に由来する装置関数など、様々な関数が畳み込まれており、フィッティングが困難なケースもあります。それに対して、ディープラーニングは関数形が未定義な状態で行うフィッティングと考えることができ、解決手段となる可能性があります。

一般的な実験では、データを増やすことは統計精度を高めることになり有益です。しかしながら、時間とともに試料の状態が変化するような、例えば水分の蒸発や吸着が実験結果に影響を与える場合においては、十分な統計量が溜まったら実験を終了し、次の実験に移る判断が重要です。この判断には大まかな解析で十分なケースが想定され、ディープラーニングに任せることで、効率化できる可能性があります。



## 【原子力】 Advance/FOCUS-iによる実建屋モデルを利用した爆燃・爆轟解析 [A/FOCUS-i]

### 1. 解析対象

実建屋のモデルにおいて、仮に水素爆発の条件を設定したケースで、Advance/FOCUS-iを活用して爆燃・爆轟解析の試験解析を実施しました。

### 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i

### 3. 解析条件

No.	項目	解析条件
1	使用モデル	1F1原子炉建屋相当モデル 総格子数(38万)
2	計算領域	地下1階～地上5階
3	圧力	101,325 Pa
	温度	298.15K
	気体成分	水素：12.5%、空気87.5% (空気の構成は窒素：酸素=3.76：1)
4	乱流モデル	k- $\omega$ SST
5	層流火炎速度	Cantera+Metghalchi&Keck(1982)の経験式による補正
6	乱流火炎速度	Wrinklingモデル
7	化学種の熱物性	Cantera (反応メカニズムはUT-JAXAを使用)
8	既燃状態の化学種分率	Cantera (反応メカニズムはUT-JAXAを使用)
9	初期火球設定位置	5階シールドブラグ
10	初期火球サイズ	半径1m

図 1

### 4. 解析結果 (温度)

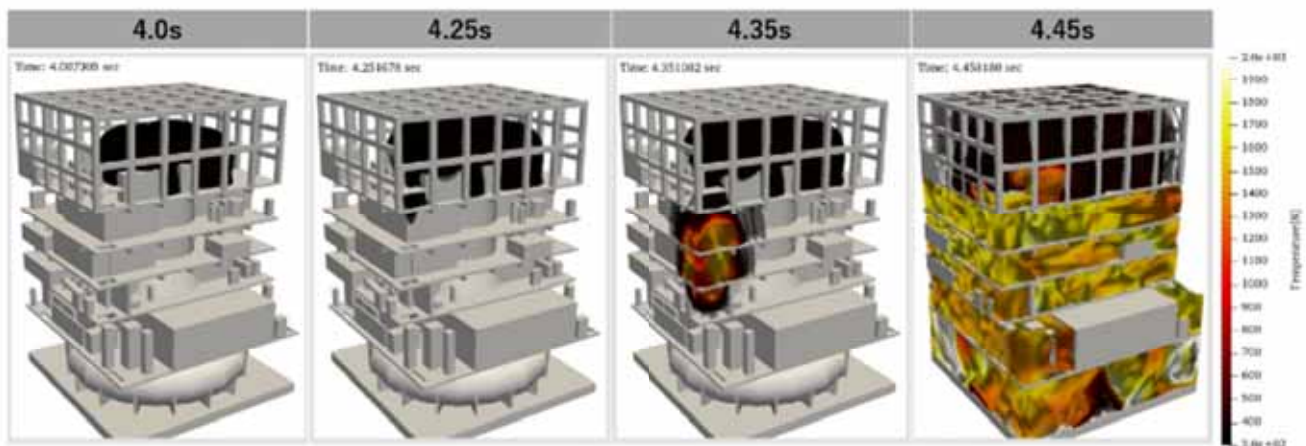


図 2

### 5. 参考文献

- [1]中森 一郎, 桐原 亮平, “爆轟遷移モデルを用いた密閉空間内の燃焼,” 第61回航空原動機・宇宙推進講演会, 2022.
- [2]大豆生田 駿, 松本 弦太, 前田 慎市, 中森 一郎, 小原 哲郎, “単一障害物を有する管内におけるデトネーション遷移過程の実験ならびに数値シミュレーション,” 第60回燃焼シンポジウム, 2022.
- [3]中森 一郎, 富塚 孝之, 高橋 淳郎, 大西 史倫, 小玉 貴司, 玉内 義一, 佐藤 直弥, 林 光一, 坪井 伸幸, “再処理工場の重大事故に係る重要現象に関する評価手法の高度化: 火炎面モデルに係る燃焼速度モデルと起爆項モデルを用いた実スケール施設内での爆轟遷移の予測性能の検証,” 原子力学会春の年会 2023.
- [4]Ichiro Nakamori, Takayuki Tomizuka, Atsuo Takahashi, Fumitomo Onishi, Takashi Kodama, Yoshikazu Tamauchi, Naoya Sato, A. Koichi Hayashi, and Nobuyuki Tsuboi, “Numerical Simulation on DDT in Real and Large Scale Combustion Chamber Using a Combustion Velocity Method and Ignition Model with a Detailed Chemical Reaction System,” The 29th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, 2023.
- [5]井上 悠, 大豆生田 駿, 松本 颯斗, 前田 慎市, 中森 一郎, 小原 哲郎, “単一障害物を有する流路におけるデトネーション遷移過程に関する実験および数値シミュレーション,” 2023年度衝撃波シンポジウム, 2024.
- [6]中森 一郎, 高橋 淳郎, 大西 史倫, 林 光一, “建屋スケール内における DDT 再現シミュレーションのための火炎面の燃焼速度モデルに関する改良,” 第63回航空原動機・宇宙推進講演会／北部支部 2024 年講演会ならびに第 5 回再使用型宇宙輸送系シンポジウム, 2024.

## 【エネルギー】液体管路系過渡解析 [A/FNet/Γ]

## 1. 解析目的

仮定の液体管路系でポンプトリップを想定し、温度変化を調べます。

## 2. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/  
FrontNet/Γ

## 3. 解析モデル・条件

下図のように、高低差のある複数の循環ループによって炉心が冷却されている仮定の管路系を考えます。液体 Na ループのポンプトリップを想定して温度の時間変化を調べます。

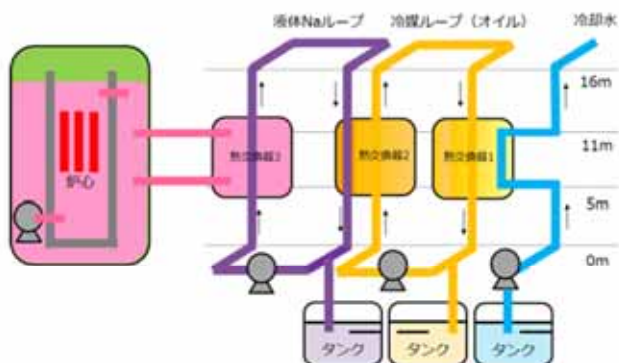


図1 管路系モデル

## 4. Advance/FrontNet/Γ GUI による設定画面

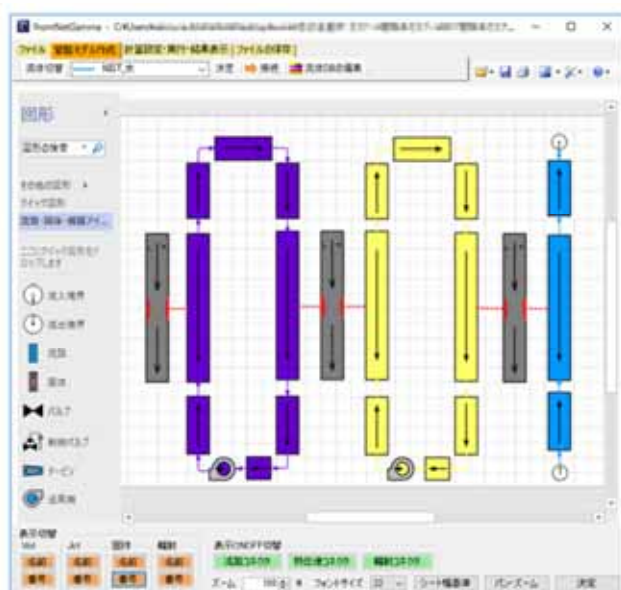


図2 Advance/FrontNet/Γ GUI による計算モデル

## 5. 解析結果

図3に定常状態の流量と温度をまとめます。

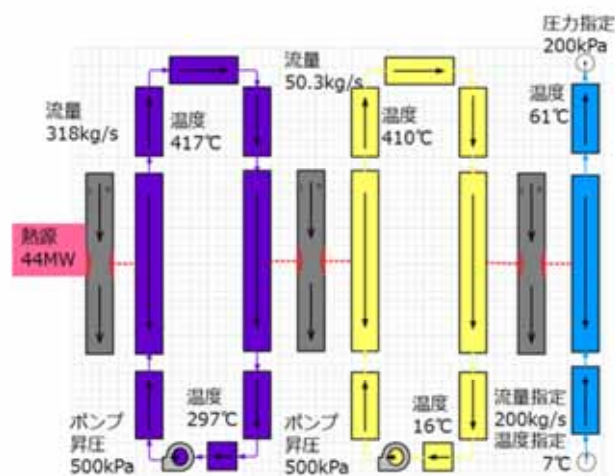


図3 定常状態

図4にポンプトリップ後の温度分布、図5に各部の温度の時間変化、図6に流量の時間変化をまとめます。トリップから約3分で液体Na系の温度が最高温度798℃となりました。

トリップ直後、流量は急激に減るが構造物の熱輸送が遅れることから温度変化にピークがみられます。ポンプトリップ後も高低差による循環流量が存在しています。

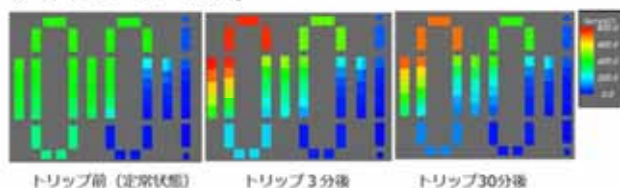


図4 トリップ後の温度分布

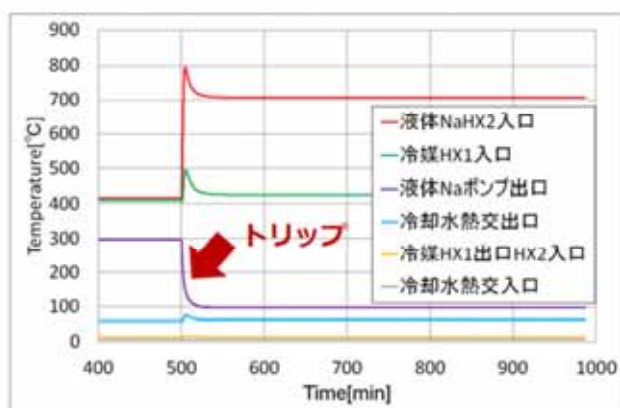


図5 温度の時間変化

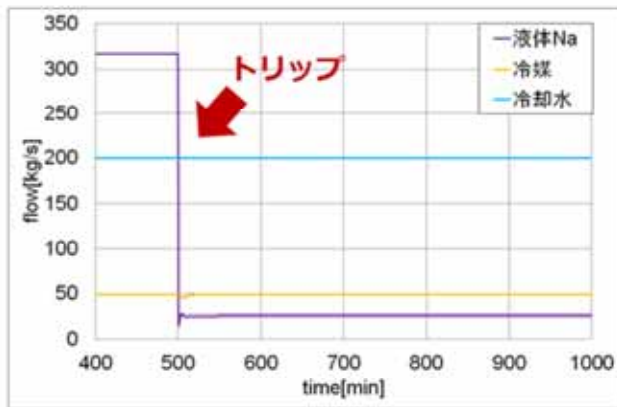


図 6 各部の流量の時間変化

## 6. 参考またはご協力

液体ナトリウム物性：

[http://www.rist.or.jp/atomica/data/dat\\_detail.php?Title\\_No=03-01-02-08](http://www.rist.or.jp/atomica/data/dat_detail.php?Title_No=03-01-02-08) 林田均他, “高速炉主配管用音波温度計のナトリウム試験”, サイクル機構技術, No.5 (1999).

伝熱管形状： JIS B 8249:1999 多管円筒形熱交換器 <http://kikakurui.com/b8/B8249-1999-01.html>



## 【原子力】 過酷事故時の原子炉格納容器・原子炉建屋内の水素分布解析 [A/BAROC]

### 1. 概要

福島第一原子力発電所の事故を背景に過酷事故時の原子炉建屋内の詳細な熱流動解析が求められています。そこで、過酷事故時における原子炉格納容器・原子炉建屋内の水素や水蒸気分布、水蒸気凝縮、セシウム挙動などの物理現象の詳細解析を目的に3次元圧縮性流体解析手法に基づくAdvance/BAROCコードを自社開発し、福島第一原子力発電所1号機相当(以下1F1)の解析を実施しその適用性を確認しました。

### 2. 使用ソフトウェア

過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC

### 3. 想定シナリオ

想定したシナリオは全交流電源喪失後、炉心溶融に伴い原子炉格納容器トップフランジからシールドプラグを経由して原子炉建屋内5階オペレーションフロアに水素と水蒸気が流入する条件としました。現象時間24時間とし、4.4時間まで一定量で流入し、それ以降流入を停止した。流入気体温度は1,000Kとしました。なお原子炉建屋内の初期水蒸気濃度は相対湿度60%相当のモル分率を算出し入力条件として与えました。

### 4. 解析条件と解析モデル

解析に使用した解析条件とモデルを表1と図1に示します。なお解析に使用したモデルは公開情報[1]の各階平面図から1F1相当モデルを作成しました。図面より、5階から4階へ下りる階段は2か所、機器ハッチも2階から5階まで設置されていることを確認しました。解析では5階の機器ハッチを閉とし、2階から4階までの機器ハッチは開としました。なお、入手した図面では内部の構造物の高さ情報が不明なため、本モデルにおいて設置する構造物の高さは各フロア高さの半

分と仮定して設定しました。作成したモデル形状をSTLファイルに変換し、Advance/BAROCに取りこみ解析を実施しました。

表 1 解析条件

No	項目	内容
1	気体成分	窒素 77.5%、酸素 20.6%、水蒸気 1.9%、水素 0%
2	初期条件	圧力: 101,325Pa 温度: 298.15K
3	流入条件	水素: 134kg 210kg 400kg 水蒸気: 5,250kg 流入気体温度: 1,000K
4	境界条件	流速境界条件: スリップ 温度境界条件: 外気は 298.15K 固定、内部構造物は断熱
5	水蒸気凝縮	バルク凝縮、壁面凝縮を考慮
6	状態方程式	Soave-Redlich-Kwong (SRK) 式
7	乱流モデル	k-ε モデル
8	総格子数	633,600(格子分割幅約 0.5m)
9	時間刻み幅	最大 Courant 数 1,000 自動制御
10	現象時間	24 時間

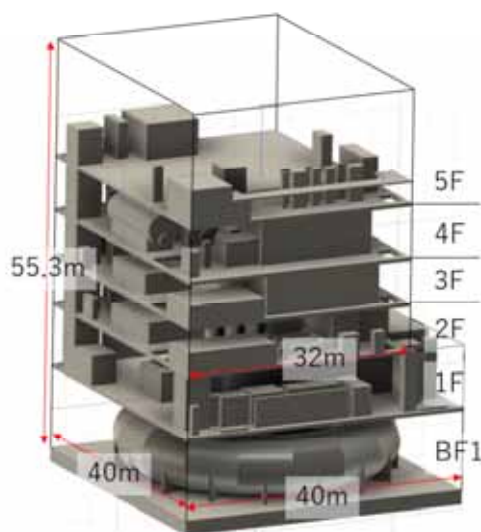


図 1 1F1 原子炉建屋相当モデル

## 5. 解析結果

Advance/BAROC で解析した結果を図 2～図 4 に示します。図 2 より現象時間の経過とともに原子炉建屋内に水素が拡散していく様子が分かります。図 3 に各時間における最大水素濃度を示します。現象時間 24 時間時点の最大水素濃度は 8.9%であり、先行研究[1]の結果 8.3%と概ね一致

する結果が得られました。図 4 に解析により得られた現象時間 24 時間時点の 5 階の水素濃度と水蒸気濃度、空気濃度から三元図[2]を作成しました。三元図より、水素量が多くなると爆燃領域から爆轟領域へ近づく事が分かります。但し、今回解析した 3 条件は全て爆燃領域でした。

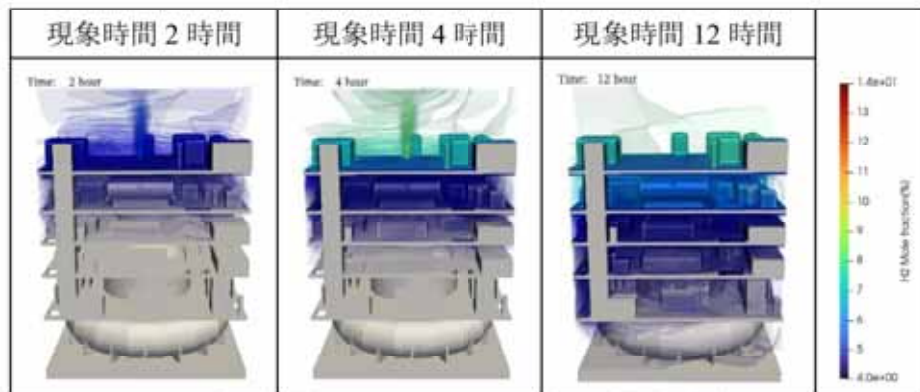


図 2 各現象時間における原子炉建屋内水素濃度分布図

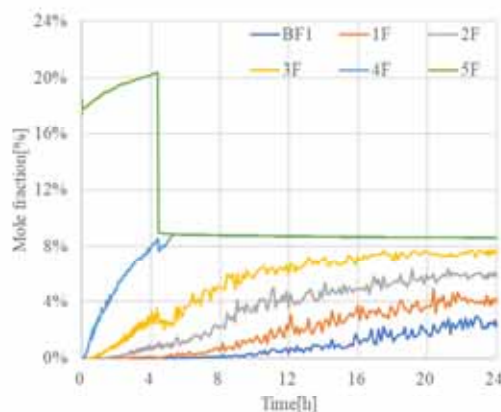


図 3 各時間における最大水素濃度

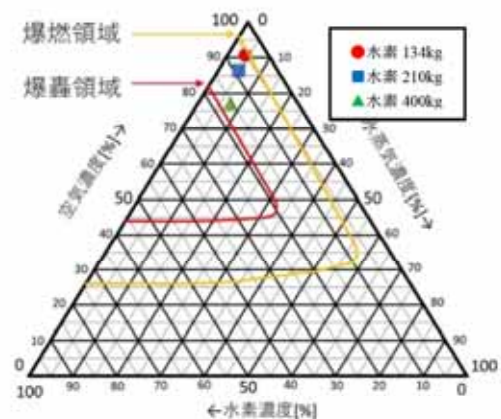


図 4 水素・水蒸気・空気の三元図[2]

## 6. まとめ

自社開発した Advance/BAROC 解析コードの有効性を確認するために実施した福島第一原子力発電所 1 号機原子炉建屋相当の過酷事故時における原子炉建屋内の水素濃度分布解析について報告しました。得られた解析結果は建屋内の 5 階に放出された水素が 4 階との開口部を通過して 4 階およびその下階にも流れ込む挙動を示すとともに先行研究と同等の水素濃度が得られました。流入開始から 24 時間後の水素濃度、水蒸気濃度、空気濃度が可燃領域にあることを示しました。

## 7. 参考文献

- [1] 福島第一原子力発電所事故発生後の詳細な進展メカニズムに関する未確認・未解明事項の調査・検討結果「第 6 回進捗報告」について(添付資料 1-10)(2022) 東京電力(株)。
- [2] Z.M. Shapiro, et al., WAPD-SC-545, U.S. Atomic Energy Commission, Pittsburgh, PA (1957).



## 【原子力】過酷事故時の原子炉格納容器・ 原子炉建屋内のセシウムの挙動解析 [A/BAROC]

### 1. 概要

福島第一原子力発電所の事故を背景に過酷事故時の原子炉建屋内の詳細な熱流動解析が求められています。そこで、過酷事故時における原子炉格納容器・原子炉建屋内の水素や水蒸気分布、水蒸気凝縮、セシウム挙動などの物理現象の詳細解析を目的に 3 次元圧縮性流体解析手法に基づく Advance/BAROC コードを自社開発し、福島第一原子力発電所 1 号機原子炉建屋相当の解析を実施しその適用性を確認しました。

### 2. 使用ソフトウェア

過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC

### 3. 想定シナリオ

想定したシナリオは全交流電源喪失後、炉心溶融に伴い原子炉格納容器トップフランジからシールドプラグを経由して原子炉建屋内 5 階オペレーションフロアに水素と水蒸気が流入する条件としました。現象時間 18 時間とし、4.4 時間まで一定量で流入し、それ以降流入を停止しました。流入気体温度は 1,000K としました。なお原子炉建屋内の初期水蒸気濃度は相対湿度 60%相当のモル分率を算出し入力条件として与えました。

なおセシウム挙動解析として、シールドプラグからの流入面積を 2 条件設定しました。

### 4. 解析条件と解析モデル

解析に使用した解析条件とモデルを表 1 と図 1 に示します。なお解析に使用したモデルは公開情報[1]より 1F1 の各階平面図から 1F1 相当モデルを作成しました。図面より、5 階と 4 階をモデル化しました。なお、入手した図面では内部の構造物の高さ情報が不明なため、本モデルにおいて設置する構造物の高さは各フロア高さの半分と仮定して設定しました。作成したモデル形状を STL

ファイルに変換し、Advance/BAROC に取りこみ解析を実施しました。

表 1 解析条件

No	項目	内容
1	気体成分	窒素 77.5%、酸素 20.6%、水蒸気 1.9%、水素 0%
2	初期条件	圧力: 101,325Pa、温度: 298.15K
3	流入条件	水素: 210kg、水蒸気: 5,250kg 流入気体温度: 1,000K
4	流入セシウム	気体流入位置からエアロゾル流入、粒径 $10\mu\text{m}$ 、質量流量 $0.01\text{ kg/s}$ 、粒子密度 $3,680\text{ kg/m}^3$ (CsOH を想定)
5	流入面積	ケース 1: $0.06\text{ m}^2$ ケース 2: $1.0\text{ m}^2$
6	エアロゾル沈着モデル	乱流沈着モデル
7	境界条件	流速境界条件: スリップ 温度境界条件: 外気は 298.15K 固定、内部構造物は断熱
8	水蒸気凝縮	バルク凝縮のみ考慮
9	状態方程式	Soave-Redlich-Kwong (SRK) 式
10	乱流モデル	k- $\epsilon$ モデル
11	総格子数	225,720
12	時間刻み幅	最大 Courant 数 1,000 自動制御
13	現象時間	18 時間

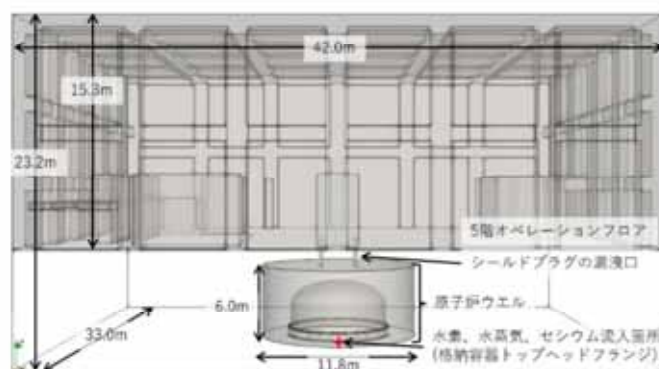


図 1 形状モデル

### 5. 解析結果

Advance/BAROC で解析した現象時間 4.03 時間時点のセシウム浮遊量と沈着濃度分布を図 2 に、



セシウム沈着量の時間変化を図 3 に示します。ケース 1 は流入面積が小さいため、シールドプラグから原子炉建屋への流速が大きい。ケース 2 は流入面積が大きいいため、シールドプラグからの流入量が多い結果が示されました。また図 3 よりケース 1 では現象時間 4.4 時間の流入停止後はセシ

ウムの沈着量は増加しないが、ケース 2 は流入停止後もセシウム沈着量が時間とともに増加しています。これは流入停止後に拡散や対流による流動が大きいためと考察します。

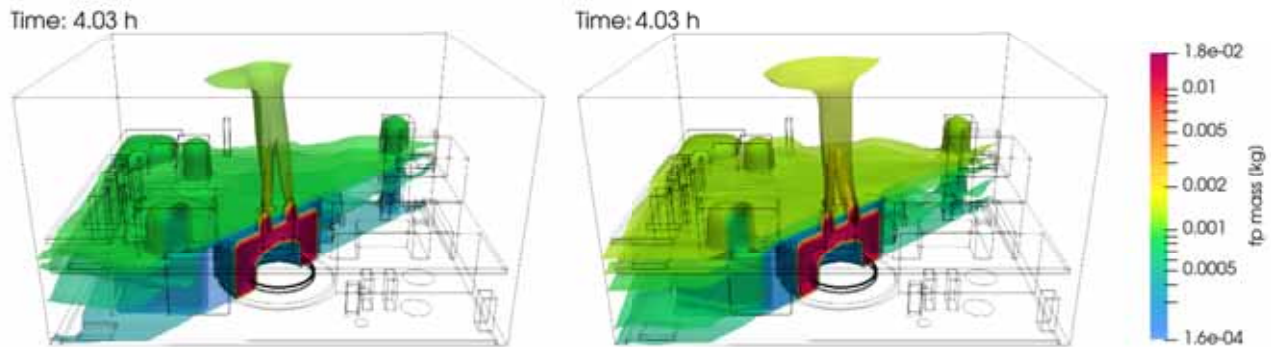


図 2 セシウム浮遊量と沈着濃度分布 左ケース 1、右ケース 2

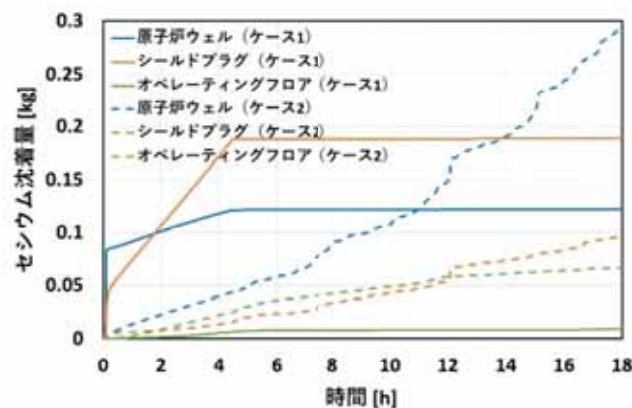


図 3 セシウム沈着量の時間変化

## 6. まとめ

本解析では、Advance/BAROC コードを用いて原子炉ウェルとオペレーションフロアでの流動に伴うセシウム挙動と壁への沈着挙動を評価しました。流入面積が小さいほど原子炉ウェルからオペレーションフロアへ流出するセシウムエアロゾルが少なく、シールドプラグ下面および流入孔に沈着するセシウムの量が多くなる傾向が確認されました。流入面積が小さいほど、流入が停止すると、原子炉ウェル、シールドプラグ、オペレーションフロアのセシウム沈着量がほとんど変化しないことが明らかになりました。

今後はシールドプラグモデルの詳細化や、セシウムエアロゾル粒子の沈着モデルの拡充、また FP

の流動や沈着に関する実機での調査結果や実験結果をモデルに反映すること等により、より精度の高い解析を行えるよう Advance/BAROC コードの開発と解析を進めていく予定です。

## 7. 参考文献

- [1] 福島第一原子力発電所事故発生後の詳細な進展メカニズムに関する未確認・未解明事項の調査・検討結果「第 6 回進捗報告」について(添付資料 1-10)(2022) 東京電力(株)。

## 【原子力】ISP-47 ThAI 試験国際標準問題に対する検証解析 [A/BAROC]

## 1. 概要

自社開発した過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC を用いて、ISP-47 ThAI 国際標準問題 [1] の圧力、温度、ヘリウム濃度、水蒸気凝縮などの 3 次元挙動を解析しました。

## 2. 使用ソフトウェア

過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC

## 3. ISP-47/ThAI 国際標準問題の解析

ISP-47 の目的は原子炉格納容器の熱水力分野で活用されている CFD コードの能力を評価する事で 15 の機関、13 の国、12 の解析コードについて評価を実施しています。Advance/BAROC のベンチマークとして、ISP-47/ThAI 国際標準問題の解析を実施しました。

## 4. 解析条件と解析モデル

公開情報[1]に基づき、直径 3.2m、高さ 9.2m、体積 60m<sup>3</sup> の円筒形状のモデルを作成し、円筒形状を約 10 万メッシュで格子分割した。作成したモデル断面図を図 1 に示します。1 メッシュのサイズは約 0.1m<sup>3</sup> とした。初期条件として圧力は大気圧、気体成分は空気、温度 293K とし、外壁から外気への放熱、水蒸気の凝縮を考慮しました。現象時間は 7,700 秒とし、圧力、温度、ヘリウム濃度、水蒸気凝縮などの 3 次元挙動を解析しました。

流入は 3 つのフェーズに分かれており、第 1 フェーズの 0~2,700 秒は濃度 100% のヘリウムガスが 5.5m 位置(図 1 A の位置)から上向きに 0.59g/s で流入します。第 2 フェーズの 2,700~4,700 秒は水蒸気が 5.0m 位置(図 1 B の位置)から上向きに 32g/s 流入します。第 3 フェーズの 4,700~5,700 秒は水蒸気が 1.8m 位置(図 1 C の位置)から中心方向に 35g/s で流入します。第 3 フェーズ以降の 5,700~7,700 秒の間は気体が流

入しない条件で解析を実施しました。

なお実験では速度計測用の凝縮水の水滴を生成するため、0~2,700 秒の間ヘリウムとともに 0.16g/s の水蒸気を 5.0m 位置(図 1 B の位置)から上向に流入しており、本解析でもこの現象を模擬しています。解析にかかった計算時間はシングルコアで 13 時間弱でした。

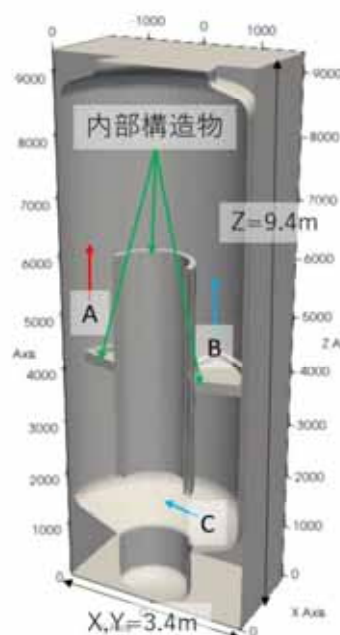


図 1 作成した解析モデル断面図

## 5. 解析結果

解析により得られた試験装置中央断面のヘリウム濃度分布を図 2 に示します。図の 1,000、2,000 秒は A の流入口よりヘリウムが流入し、試験装置上部でヘリウムが成層化している様子が分かります。また、3,000、4,000 秒では B の流入口より水蒸気が流入しても、ヘリウムの成層化が保たれています。しかし 4,700 秒以降 C の流入口より水蒸気が流入したことで、試験装置上部で成層化していたヘリウムが拡散し、試験装置内のヘリウム濃度は均一化しています。試験装置内のヘリウム濃度変化と他コードとの比較を図 3 に示します。他の解析コードの多くは B から水蒸気が流入する 2,700 秒以降は実験値との差異が大きい



Advance/BAROC で得られた結果は、4,700 秒迄おおむね一致します。しかし、それ以降は他コードと同様に実験値との差異が大きいです。図 4 に試験装置内の圧力変化と他の解析コードとの比較を

示します。解析結果は試験結果と比較し、他コード同様の結果が得られました。しかし、6,000 秒以降は試験結果と異なっており、これについては今後の課題とします。

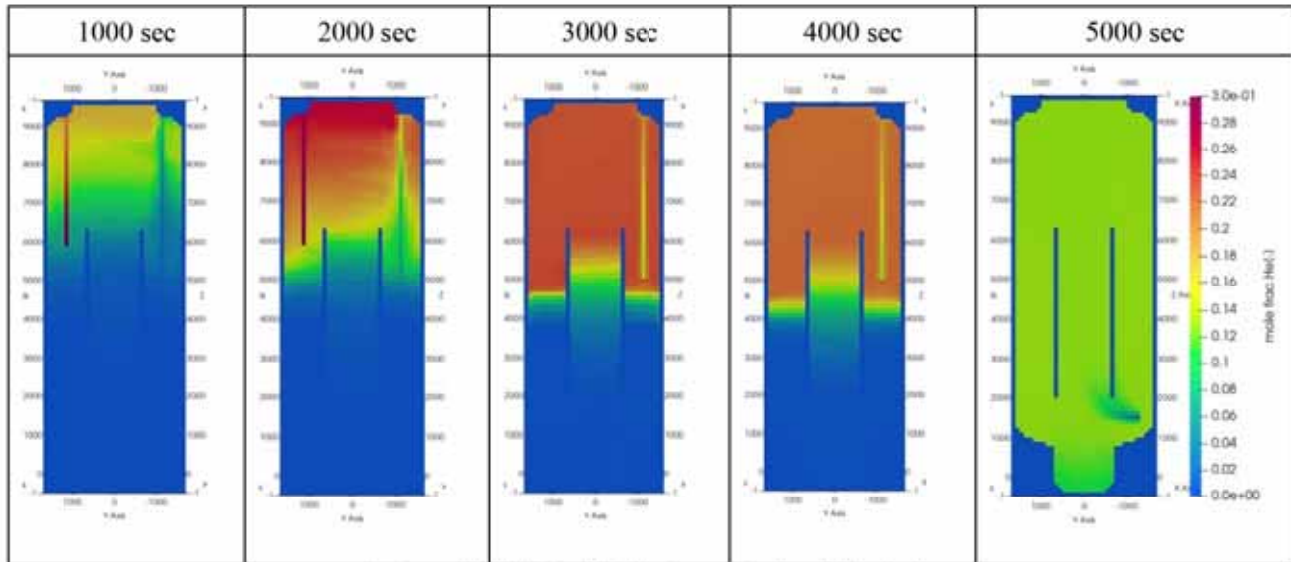


図 2 試験装置中央断面のヘリウム濃度分布

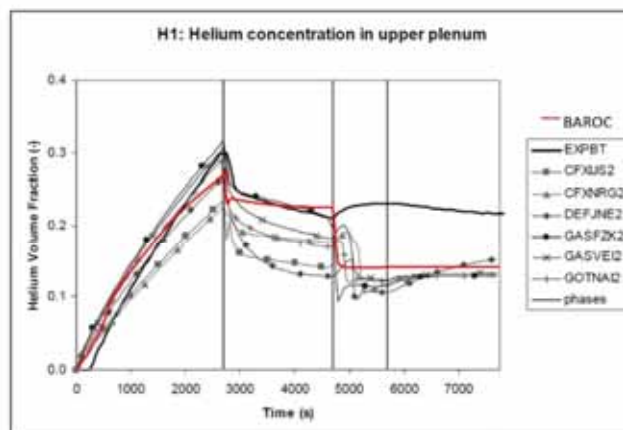


図 3 試験装置内のヘリウム濃度変化[1]

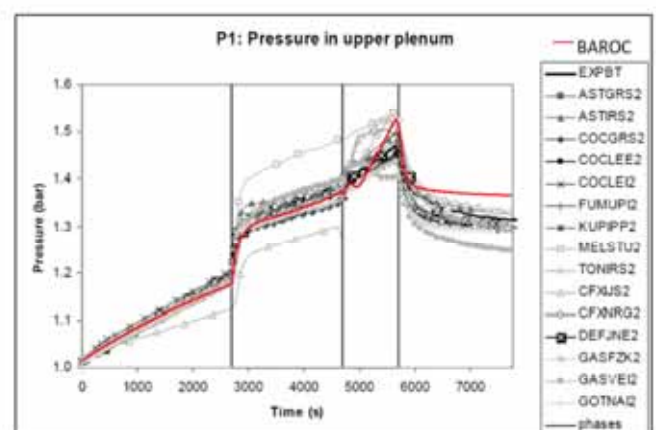


図 4 試験装置内の圧力変化[1]

## 6. まとめ

Advance/BAROC コードの性能・適用性の検証を目的とし ISP-47/ThAI 国際標準問題の試験解析を実施しました。その結果、現時点で他のコードと同等の性能を有している事を確認しました。

Advance/BAROC の解析結果は、4,700 秒までおおむね実験結果と合っているが、それ以降のヘリウム濃度は他コードと同様に均一化する点が明らかになりました。実験結果との差異については今後各種モデルの見直しを検討する予定です。また、原子炉建屋と同様に 3 次元形状の熱流動解析を

高速に計算可能なソフトであることを確認しました。ただし、凝縮が支配的な場合は時間刻み幅を大きくすると解析精度が低下する問題があるため引き続きコードの改良を実施していきます。

## 7. 参考文献

- [1] International Standard Problem ISP-47 on Containment Thermalhydraulics, Final Report, NEACSNIR(2007) .



## 【原子力】ブローアウトパネル作動時の 原子炉建屋内水素濃度分布解析 [A/BAROC]

### 1. 概要

自社開発した過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC を用いて、原子炉建屋内の水素濃度分布を解析[1][2]してきました。福島第一原子力発電所2号機原子炉建屋（以下1F2）ではブローアウトパネル（以下BOP）が1号機の水素爆発により開いていた事で水素爆発に至らなかったと考えられています。そこで Advance/BAROC に BOP の機能を追加し、原子炉建屋内の水素濃度について解析を実施しました。

### 2. 使用ソフトウェア

過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC

### 3. 想定シナリオと解析条件

想定したシナリオは全交流電源喪失後、炉心溶融に伴い原子炉格納容器トップフランジからシールドプラグを経由して原子炉建屋内5階オペレーションフロアに水素 210kg と水蒸気 5250kg が流入する条件としました。現象時間 6 時間とし、4.4 時間まで一定量で流入し、それ以降流入を停止しました。流入気体温度は 1,000K としました。なお原子炉建屋内の初期水蒸気濃度は相対湿度 60%相当のモル分率を算出し入力条件として与えました。

外壁と内壁の温度は壁構造物熱伝達モデル、水蒸気凝縮はバルク凝縮と壁面凝縮を考慮しました。

本解析では BOP を原子炉建屋 5 階に設置しました。作動状況に応じた原子炉建屋内の水素濃度分布を検討するために、下記 3 条件の解析を実施しました。

#### 【解析条件】

- ①BOP Close
- ②BOP Open
- ③BOP Opened by pressure

### 4. 解析モデル

公開情報[3][4][5]の各階平面図から 1F2 相当の解析モデルを作成しました。作成した解析モデルを図 1 に示します。また BOP の設置位置、サイズ、作動圧力を設定しました。図面より、5 階から 4 階へ下りる階段は 3 か所、機器ハッチも 2 階から 5 階まで設置されていることを確認しました。解析では 5 階の機器ハッチを閉とし、2 階から 4 階までの機器ハッチは開としました。これら情報に基づき、3D CAD を活用し、3 次元の原子炉建屋モデルを作成しました。なお、入手した図面では内部の構造物の高さ情報が不明なため、本モデルにおいて設置する構造物の高さは各フロア高さの半分と仮定して設定しました。作成したモデル形状を STL ファイルに変換し、Advance/BAROC に取りこみ解析を実施しました。

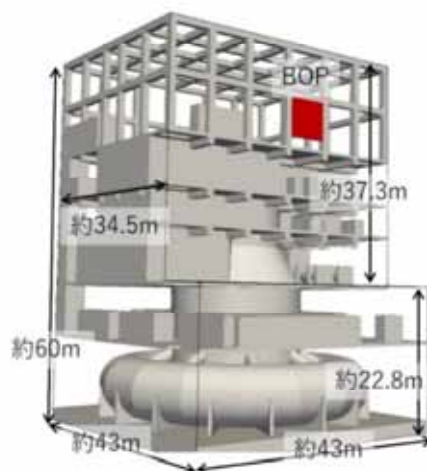


図 1 原子炉建屋モデルと BOP 設置箇所

### 5. 解析結果

現象時間 6 時間の原子炉建屋内の水素濃度分布図を図 2 に、原子炉建屋内 5 階、4 階の平均水素濃度を図 3 と図 4 に示します。①BOP Close では原子炉建屋 5 階のフロアの水素濃度が時間とともに上昇し、現象時間 4 時間時点で約 10%以上になります。②BOP Open、③BOP Opened by pressure の水素濃度は 2%程度で、①BOP Close と比べて低い

濃度を示しています。これは BOP が開くことで 5 階に滞留した水素が排出された結果と考えられます。  
階に滞留した水素を含む気体が BOP から排出さ

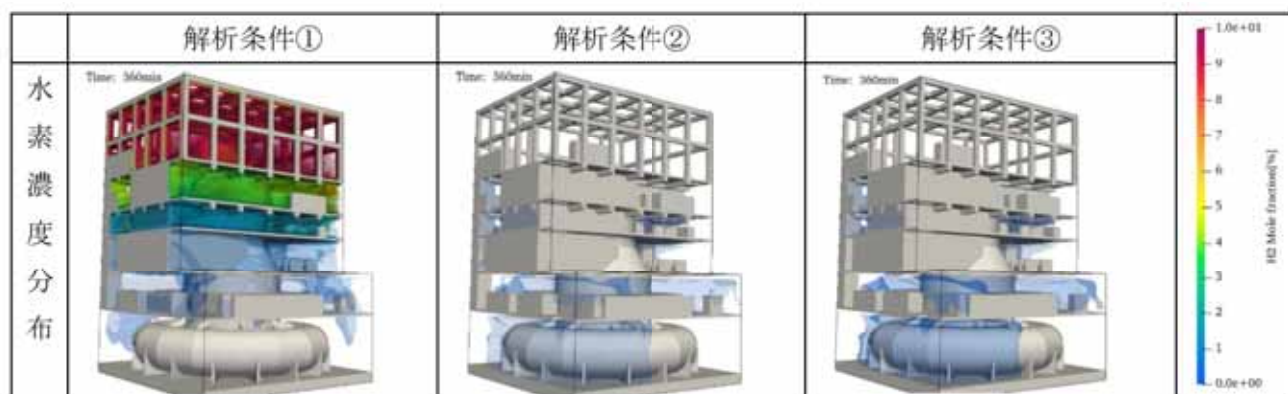


図 2 現象時間 6 時間の原子炉建屋内の水素濃度分布

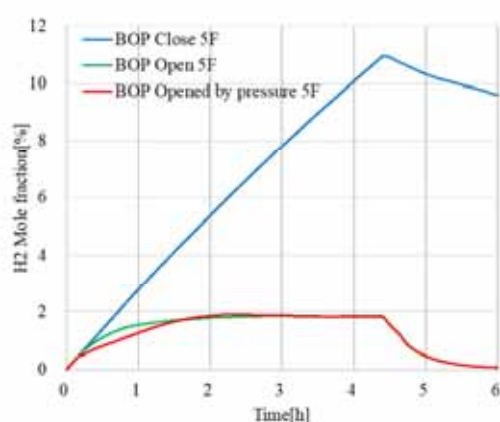


図 3 原子炉建屋内 5 階の平均水素濃度

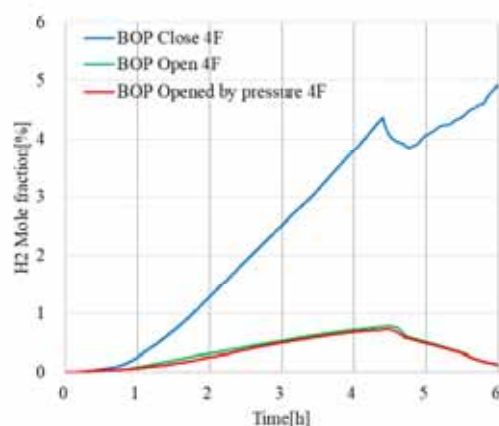


図 4 原子炉建屋内 4 階の平均水素濃度

これらの影響について検討します。

## 6. まとめ

本解析では BOP の開閉により原子炉建屋内に滞留している水素が水素爆発に至る濃度に達するか否かを検討しました。

②BOP Open と③BOP Opened by pressure の条件では、BOP から水素を含む気体が排出され、4 階と 5 階の平均水素濃度は低下しました。これらのケースでは原子炉建屋に水素・水蒸気が流入している 4.4 時間までの最高水素濃度は 2%以下、流入停止後の 6 時間で 0.1%まで低下しており、BOP が開くことで原子炉建屋内の水素濃度は大幅に低下する結果が得られました。

本解析では原子炉建屋からのリーク量を無視していること、内部構造物を断熱として扱ったこと、水蒸気が凝縮して生成される水滴挙動、水滴が落下して形成される床面の水層挙動、燃料プールからの蒸発・凝縮などを考慮しておらず、今後、

## 7. 参考文献

- [1] 大西他, アドバンスシミュレーション vol.29 (2022).
- [2] 大西他, アドバンスシミュレーション vol.31 (2024).
- [3] 福島第一原子力発電所事故発生後の詳細な進展メカニズムに関する未確認・未解明事項の調査・検討結果「第 6 回進捗報告」について (添付資料 1-10)(2022) 東京電力(株)。
- [4] 第 13 回東京電力福島第一原子力発電所における事故の分析に係る検討会 資料 4, 原子力規制庁(2020).
- [5] 国プロ「原子炉建屋内の遠隔除染技術の開発」2 号機原子炉建屋オペレーティングフロア調査計画について」, 東京電力(株) (2014)。



## 【原子力】過酷事故時の原子炉建屋内における セシウムエアロゾル挙動解析 [A/BAROC]

### 1. 概要

福島第一原子力発電所の事故を背景に過酷事故時の原子炉建屋内の詳細な熱流動解析が求められています。そこで、過酷事故時における原子炉格納容器・原子炉建屋内の水素や水蒸気分布、水蒸気凝縮、セシウム挙動（粒子凝集と重力沈降を考慮）などの物理現象の詳細解析を目的に3次元圧縮性流体解析手法に基づく Advance /BAROC コードを自社開発し、福島第一原子力発電所1号機原子炉建屋相当（以下 1F1）の解析を実施しその適用性を確認しました。

### 2. 使用ソフトウェア

過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC

### 3. 想定シナリオ

想定したシナリオは全交流電源喪失後、炉心溶融に伴い原子炉格納容器トップフランジからシールドプラグを経由して原子炉建屋内5階オペレーションフロアに水素と水蒸気とともにセシウムエアロゾルが流入する条件としました。現象時間24時間とし、4.4時間まで一定量で流入し、それ以降流入を停止しました。流入気体温度は1,000Kとしました。なお原子炉建屋内の初期水蒸気濃度は相対湿度60%相当のモル分率を算出し入力条件として与えました。主要な解析条件を表1に示します。

### 4. 解析条件と解析モデル

解析に使用したモデルは公開情報[2]の各階平面図から1F1相当モデルを作成しました。なお、入手した図面では内部の構造物の高さ情報が不明なため、本モデルにおいて設置する構造物の高さは各フロア高さの半分と仮定して設定しました。作成したモデル形状をSTLファイルに変換し、Advance/BAROCに取りこみ解析を実施しました。

表 1 解析条件

No	項目	内容
1	気体成分	窒素 77.5%、酸素 20.6%、 水蒸気 1.9%、水素 0%
2	初期条件	圧力：101,325Pa 温度：298.15K
3	流入条件	水素：210kg、水蒸気：5,250kg 流入気体温度：1,000K 計算開始から現象時間 4.4 時間 まで一定量で流入
4	流入 セシウム	気体流入位置からエアロゾル流入、粒径 10 $\mu\text{m}$ [1](標準偏差 3 $\mu\text{m}$ の対数正規分布)、質量流量 0.001 kg/s、粒子密度 3,680 kg/m <sup>3</sup> (CsOH を想定)
5	エアロゾル 挙動解析モデル	乱流沈着モデル 重力沈降モデル 粒子凝集モデル
6	境界条件	流速境界条件：スリップ 温度境界条件：外気は 298.15K 固定、内部構造物は断熱
7	水蒸気凝縮	バルク凝縮のみ考慮
8	状態方程式	Soave-Redlich-Kwong (SRK) 式
9	乱流モデル	k- $\epsilon$ モデル
10	総格子数	633,600(格子分割幅約 0.5m)
11	時間刻み幅	最大 Courant 数 1,000 自動制御
12	現象時間	24 時間

### 5. 解析結果

Advance/BAROC で解析した結果を図 1～図 3 に示します。重力沈降モデルと粒子凝集モデルの効果を独立に評価するため、重力沈降モデルと凝集モデルの両方を考慮しない条件をケース 1、重力沈降モデルのみを考慮した条件をケース 2、重力沈降モデルと凝集モデルの両方を考慮した条件をケース 3 の 3 通りの解析を実施しました。



図 1 に浮遊セシウム量と沈着セシウム量の時間変化を示します。ケース 1, 2 の沈着量の差はないが、ケース 2, 3 の沈着量の差は 24 時間後で約 100 倍となりました。

浮遊セシウムと沈着セシウムの粒径分布の時間変化を図 2 に示します。重力沈降モデルと粒子凝集モデルは両方とも考慮しています。時間経過とともに粒径が成長し、粒径分布は大きい側にシフトしていく傾向が確認されました。また、エア

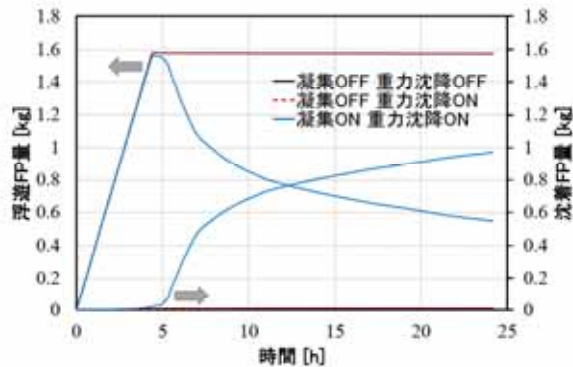


図 1 浮遊セシウム量と沈着セシウム量の時間変化

ロゾル粒子の数密度が大きく衝突速度が大きくなるため、粒径が成長しやすい傾向が確認されました。

図 3 に重力沈降モデル・粒子凝集モデル影響について解析した結果を示します。重力沈降モデルと粒子凝集モデルを考慮したケースは特に床面での沈着量が増加していることから、重力沈降モデルと粒子凝集モデルの効果が有効に機能していることが確認できます。

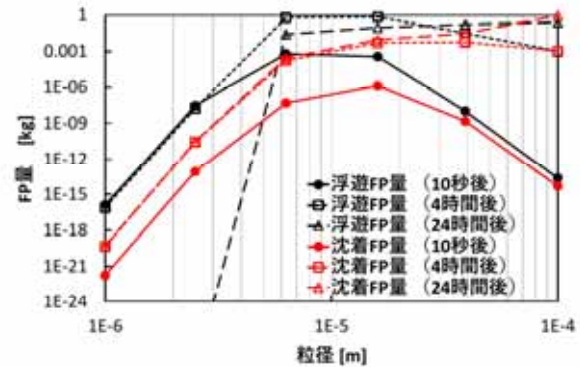


図 2 浮遊セシウムと沈着セシウムの粒径分布

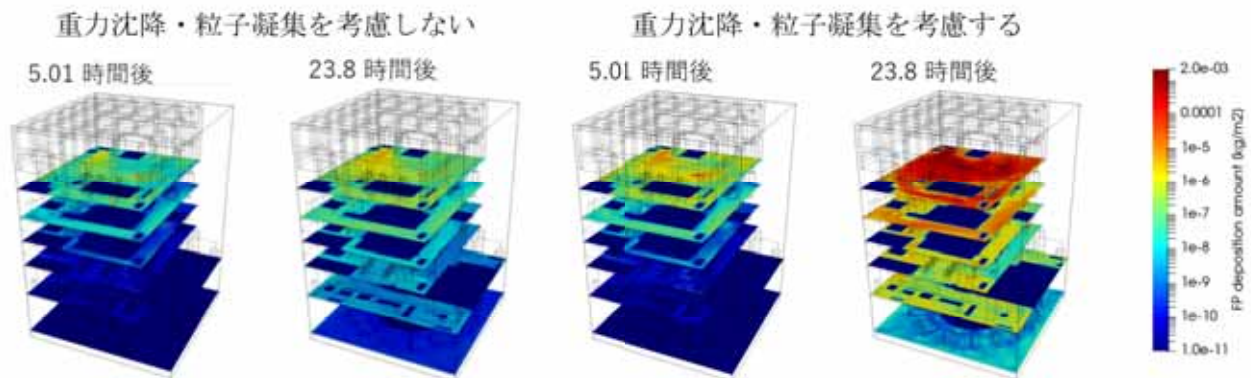


図 3 原子炉建屋各階床面でのセシウム沈着分布の時間変化

## 6. まとめ

Advance/BAROC コードにセシウムエアロゾルの重力沈降モデルと粒子凝集モデルを組み込み、IFI 相当のモデルを対象に過酷事故時のセシウムエアロゾルの挙動解析を行いました。重力沈降・粒子凝集モデルを使用することで、原子炉建屋の床面でセシウム沈着量が増加しており、追加したモデルが有効に機能していることが確認されました。しかし、実機解析に適用するためには、セシウムの組成やその物性値の特定や、今回組み込んだ重力沈降モデルや粒子凝集モデルのほか定

量的な検証が必要であり今後はそれらの点について検討したい。

## 7. 参考文献

- [1] R. E. Adams, T. S. Kress, M. L. Tobias, NUREG/CR1767 (ORNL/NUREG/TM-408) (1981).
- [2] 福島第一原子力発電所事故発生後の詳細な進展メカニズムに関する未確認・未解明事項の調査・検討結果「第 6 回進捗報告」について (添付資料 1-10)(2022) 東京電力 (株)。

## 【原子力】NSPP エアロゾル試験の検証解析[A/BAROC]

## 1. 概要

Advance/BAROC[1]は原子炉建屋と原子炉格納容器内の水素や水蒸気などの多成分ガスの3次元熱流動やFPエアロゾルの沈着を考慮した分布挙動を解析するために開発されたコードであり、これまでに福島第一原子力発電所を模擬した系での解析を行ってきました。本報ではBAROCのFPエアロゾル挙動モデルの定量的な検証のために、NSPP (Nuclear Safety Pilot Plant) エアロゾル実験を対象に解析を実施しました。

## 2. 使用ソフトウェア

過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC

## 3. 実験装置

NSPP-106 試験と NSPP-503 試験で使用された容器のサイズは高さ 5.49m、内径 3.05m の上下が丸まった円筒形状です[2][3]。NSPP-106 試験では容器外部のタンクからナトリウムを 473K に加熱してある容器内の BURN PAN へ注入し  $\text{Na}_2\text{O}$  エアロゾルを発生させています。NSPP-503 試験では容器上部から  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  エアロゾルを注入、容器下部の側面から水蒸気を注入し、容器内の雰囲気を一様にするために容器下部に設置したファンで攪拌しています。なお水蒸気は6時間まで流入しました。

## 4. 解析条件

表 1 と表 2 に各試験の解析条件を示します。エアロゾル流入量と粒径分布は、測定開始時点の実験値と一致するよう参考文献[4]を参考に決定しました。

表 1 NSPP-106 試験の解析条件

No.	項目	内容
1	解析モデル	高さ 5.49m、内径 3.05m、上下が半球状の円筒 32×32×58=59392 格子(有効)

		格子数 43832)
2	雰囲気	空気
3	初期温度	313.15 K
4	初期圧力	$1.09 \times 10^5$ Pa
5	エアロゾル流入時間	0～3 分
6	エアロゾル流入量	0.01 kg/s
7	エアロゾル粒子密度	$2270 \text{ kg/m}^3$ ( $\text{Na}_2\text{O}$ の密度)
8	エアロゾル粒径分布	平均粒径 10.8 $\mu\text{m}$ 、標準偏差 2.22 $\mu\text{m}$ の対数正規分布
9	解析時間	24 時間

表 2 NSPP-503 試験の解析条件

No.	項目	内容
1	解析モデル	NSPP-106 試験と同一
2	雰囲気	空気+水蒸気 (湿度 100%) (6 時間まで水蒸気を流入)
3	初期温度	383.0 K
4	初期圧力	$1.95 \times 10^5$ Pa
5	エアロゾル流入時間	0～17 分
6	エアロゾル流入量	0.00012 kg/s
7	エアロゾル粒子密度	$5240 \text{ kg/m}^3$ ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ の密度)
8	エアロゾル粒径分布	平均粒径 2.8 $\mu\text{m}$ 、標準偏差 1.6 $\mu\text{m}$ の対数正規分布
9	解析時間	24 時間

## 5. 解析結果

解析した結果を図 1 と図 2 に示します。浮遊エアロゾル濃度の解析は NSPP-106 試験結果と解析結果は概ね一致したが、NSPP-503 試験解析では差異があります。これは湿性沈着や沈着粒子の再浮遊を考慮していないことが一因と考察します。



浮遊エアロゾルの粒子径分布の時間変化において、現象時間初期では粒子の凝集により粒径が大きい粒子の割合は増加し重力沈降の影響を受けます。しかし現象時間が進むと粒径が大きい粒

子は減少し、粒径が小さい粒子がほとんど占めていることが確認できました。これは粒径が小さいことで重力沈降の影響が少ない結果と考えます。

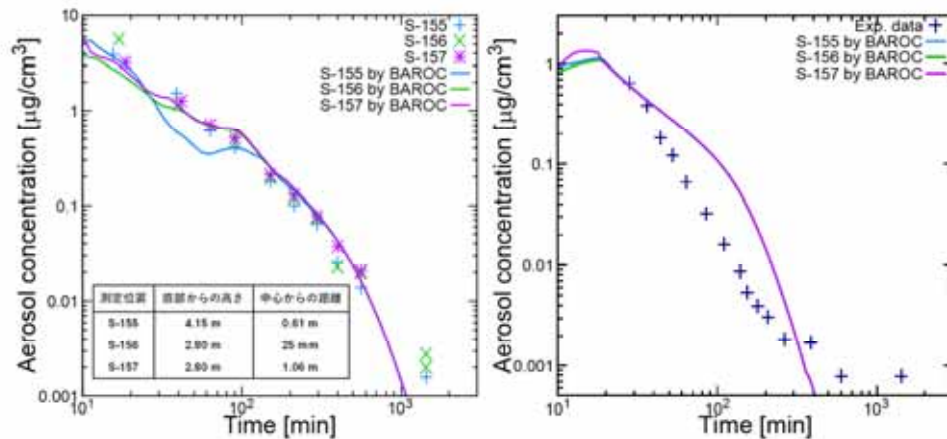


図 1 浮遊エアロゾル濃度時間変化 (左 NSPP-106, 右 NSPP-503)

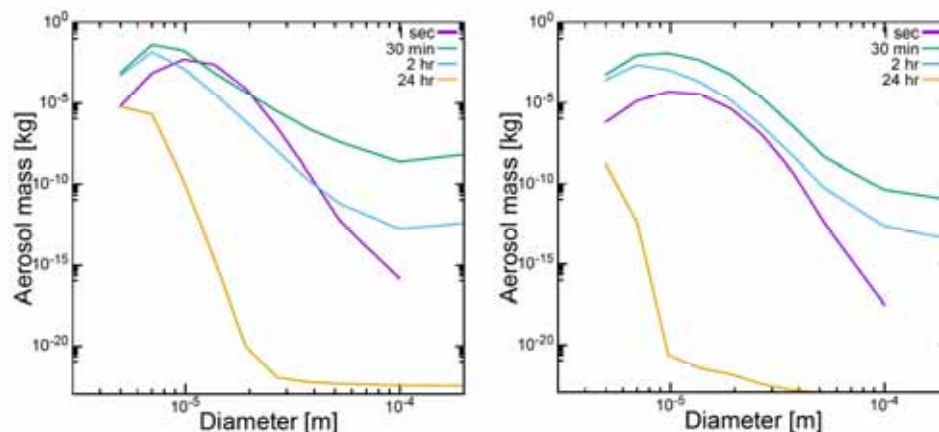


図 2 浮遊エアロゾルの粒子径分布時間変化 (左 NSPP-106, 右 NSPP-503)

## 6. まとめ

NSPP エアロゾル実験を対象にエアロゾル挙動モデルの定量的な検証解析を行いました。Advance/BAROC による解析では、エアロゾル粒子の発生メカニズムや容器内の雰囲気などを正確に模擬できていないが、エアロゾル濃度の時間変化は概ね実験に一致することが確認できました。

ただし、水蒸気が存在する条件ではエアロゾル濃度の時間変化において実験との乖離があるため、湿性沈着や再浮遊モデルの検討が必要と考えられます。福島第一原子力発電所のシールドブLAGやオペレーションフロアへの FP エアロゾルの沈着など、実機解析への適用を進める予定です。

## 7. 参考文献

- [1] 大西他, “過酷事故時の原子炉格納容器・原子炉建屋内の水素分布解析”, アドバンスシミュレーション, Vol.29 (2022).
- [2] R. E. Adams, T. S. Kress, M. L. Tobias, NUREG/CR1767 (ORNL/NUREG/TM-408) (1981).
- [3] R. E. Adams, M. L. Tobias, NUREG/CR4798 (ORNL/TM-10301) (1987).
- [4] 石神 努, 小林 健介, 梶本 光広, “放射性物質移行挙動解析コード ART を用いた NSPP エアロゾル実験の解析”, 日本原子力学会誌, 31(8), p.920 (1989).



## 【原子力】原子炉建屋内での水素爆燃・爆轟領域の可視化 [Advance/BAROC]

### 1. 概要

Advance/BAROC では爆燃領域と爆轟領域を水素と水蒸気、空気の三元図で示してきたが、実際原子炉建屋内のどの場所がこれらの領域に当たるのかは不明です。そこで、Advance/BAROC に原子炉建屋内の水素爆燃・爆轟領域を可視化する機能を追加し、1F2 相当モデルに用いてテスト解析を実施しました。

### 2. 使用ソフトウェア

過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC

### 3. 想定シナリオと解析条件

想定したシナリオは全交流電源喪失後、炉心溶融に伴い原子炉格納容器 X-29 貫通孔から原子炉建屋内 2 階に水素 1,300kg と水蒸気 150,000kg が 2.29kg/s の一定量で流入する条件としました。現象時間 18.35 時間とし、流入気体温度は 753K としました。なお原子炉建屋内の初期水蒸気濃度は相対湿度 60%相当のモル分率を算出し入力条件として与えました。

本解析では、外壁と内壁の温度は壁構造物熱伝達モデル、水蒸気凝縮はバルク凝縮と壁面凝縮を考慮しました。原子炉建屋からのリークは考慮しておらず、内部構造物を断熱としました。また、水蒸気が凝縮して生成される水滴挙動、水滴が落下して形成される床面の水層挙動、燃料プールからの蒸発・凝縮なども考慮せず解析を実施しました。

### 4. 解析モデル

公開情報の各階平面図から 1F2 相当の解析モデルを作成しました。作成した解析モデルを図 1 に示します。また図面より、5 階から 4 階へ下りる階段は 3 か所、機器ハッチも 2 階から 5 階まで設置されていることを確認しました。解析では 5 階の機器ハッチを閉とし、2 階から 4 階までの機器

ハッチは開としました。これら情報に基づき、3D CAD を活用し、3 次元の原子炉建屋モデルを作成しました。なお、入手した図面では内部の構造物の高さ情報が不明なため、本モデルにおいて設置する構造物の高さは各フロア高さの半分と仮定して設定しました。



図 1 原子炉建屋モデルと気体の流入箇所

### 5. 解析結果

現象時間 6, 12, 18 時間時点の爆燃・爆轟領域の可視化、水素濃度、水蒸気濃度を図 2 に示します。現象時間 6, 12 時間では爆燃・爆轟領域の図は全体的に青色であり原子炉建屋全体が爆燃領域である事が分かります。現象時間 18 時間まで進むと原子炉建屋内に赤色の爆轟領域が広がっていることが分かります。しかし、流入箇所近傍の原子炉建屋 2 階と、階段を通じた 3 階、4 階の一部は爆燃領域を示しています。現象時間 18 時間時点の水素濃度は 20mol%前後でしたが、水蒸気濃度は 25~40mol%程度でした。その結果水蒸気濃度が高い箇所では爆轟領域から爆燃領域に推移したと考察します。また、可視化する事で、格納容器から原子炉建屋内へ気体が流入する箇所から離れた場所でも水蒸気凝縮の効果により、水素濃度が高くなり、爆轟領域に遷移する場所があることを示唆できます。



図 2 各時間における各項目の原子炉建屋内の分布図

## 6. まとめ

本解析では Advance/BAROC に爆燃・爆轟領域の可視化機能を追加し、解析を実施しました。

その結果、原子炉建屋内でどの位置が爆燃・爆轟領域なのかを3次元的に可視化することが可能となりました。また、可視化する事で水蒸気凝縮の影響により流入箇所から離れた場所でも水素濃度が高く、爆燃領域から爆轟領域へ遷移する現象も示唆できました。ただし、本解析では考慮していない項目も多数あり、これらについては、今後の検討課題とします。

## 7. 参考文献

- [1] Z.M. Shapiro, et al., WAPD-SC-545, U.S. Atomic Energy Commission, Pittsburgh, PA (1957).
- [2] 大西他, アドバンスシミュレーション vol.31 (2024).
- [3] 福島第一原子力発電所事故発生後の詳細な進展メカニズムに関する未確認・未解明事項の調査・検討結果「第6回進捗報告」について(添付資料 1-10)(2022) 東京電力(株)。



## 【航空宇宙、産業機械】水素漏洩拡散シミュレーション [A/FOCUS-i]

## 1. 概要

水素漏洩拡散シミュレーションに関する検証例を示します。

## 2. 使用ソフトウェア

圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i

## 3. 解析の計算条件

項目	設定
粘性係数の決定法	Dual time stepping LU-SGS 法
疑似時間反復数	10 回
時間刻み	0.5sec
計算時間	38 分
格子サイズ	ベント管を除く領域で $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 5\text{cm}$
乱流モデル	k- $\omega$ SST モデル
流入水素の状態	1 気圧、298.15K、流入体積速度 0.02m/s
化学種	H <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , N <sub>2</sub>

## 4. 計算に使用した格子

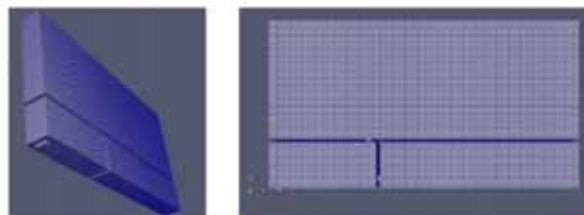


図 1

- 下側から 15.2cm × 30.4cm の流入口から濃度 100%の水素が流入し、その流入速度は実験[2]に合わせて 2cm/s としています。
- 実験[1]では天井と側壁にベントが 2 か所設けられており、それらのサイズもそれぞれが 15.2cm × 30.4cm です。
- 排気口の外側は空気で満たしており、本シミュレーションは解析対象の外側にも計算領域を設けました。
- こうすることにより、vent から水素が排気される際の圧力損失を含めて自然に流体解析ができ、流出境界条件に関わる煩雑さを回避することができます。

## 5. 水素漏洩拡散解析（実験値との比較）

実験[2]では 60 秒で水素流入が開始され約 300 秒で一定値（約 5%）に達します。

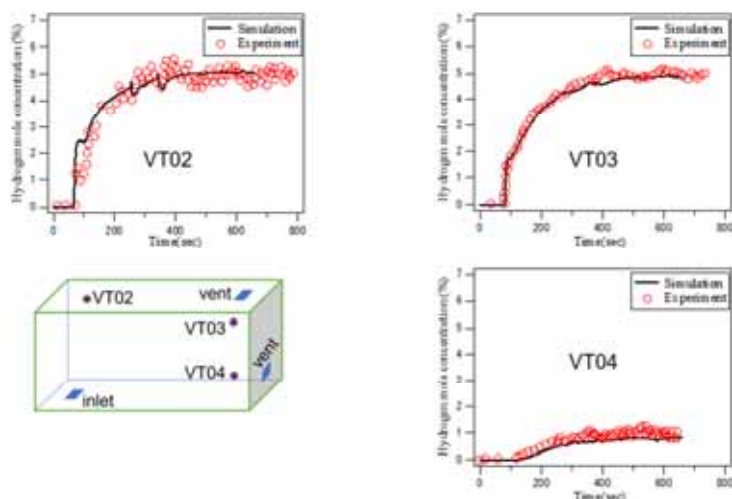


図 2



## 6. 中心断面内の水素濃度分布の非定常挙動

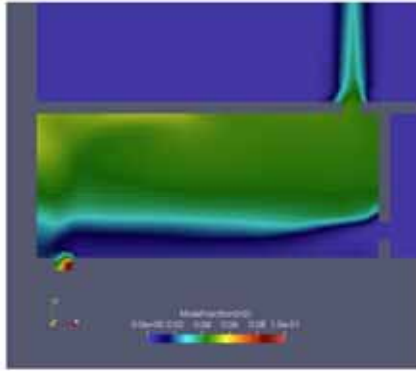


図 3

- 天井ベントから排気、側壁ベントから空気が流入する様子が見てとれます
- 側壁ベントから流入する空気と天井の水素が逆行し不安定層を形成しています
- 圧縮性流体専用のアルゴリズムに非定常計算のための前処理法を組み込み、マッハ 10 万分の 1 程度の低速流れに対応しています

## 7. シミュレーション結果

時刻はシミュレーション開始からの時間

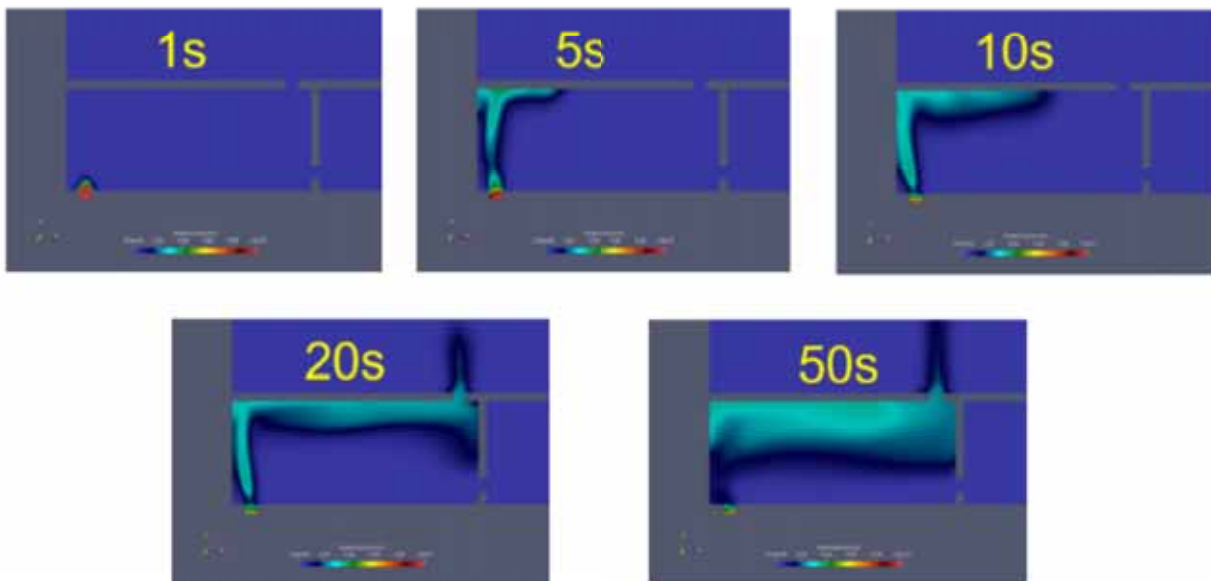


図 4

Advance/FOCUS-i ソフトウェアで採用する低マッハ数流れのための preconditioning を含む dual-time stepping アルゴリズムは、保存変数を保存型のまま解く手法を採用し、種々の保存則に関する誤差が少ない。また、マッハ数が  $M=0.1$  を遥かに下回る低速流から超音速流の範囲まで対応でき、多化学種と非定常 RANS シミュレーションにも対応でき、浮力を伴う物質拡散現象を正確にシミュレートすることができます。

## 8. 文献

[1] 月川久義, 金山寛, 松浦一雄, 井上雅弘:「部分開放空間に漏洩する水素の自然換気状態における非定常濃度変動の評価に関する検討」, 水素

エネルギーシステム, Vol.33, No.3, pp28-35 (2008).

[2] 井上雅弘, 月川久義, 金山寛, 松浦一雄:「室内における漏洩水素の拡散に関する実験的研究」, 水素エネルギーシステム, Vol.33, No.4, pp32-43 (2008).

## 【農業土木】可動堰のあるパイプラインの過渡解析 [A/FNet/Ω]

### 1. 解析対象

農業用パイプライン

### 2. 使用ソフトウェア

管路系液体過渡解析ソフトウェア Advance/  
FrontNet/Ω

### 3. 協力

コンサルタント会社様

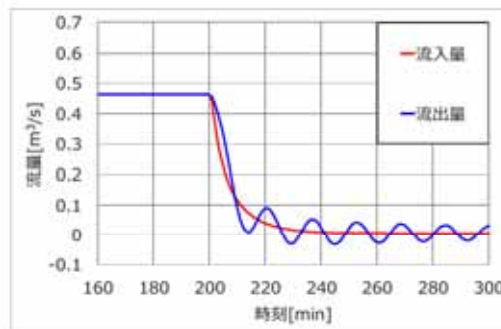


図3 堰の流入/流出量変化

### 4. 背景

農業用パイプライン(クローズド)の途中に可動堰があり、ある時刻にゲート高を高くした場合のパイプラインへの影響を調べます。

クローズドパイプラインにおいて、堰の流入側の配管の末端境界条件に堰の1次水槽水位境界、堰の流出側の配管の始端境界条件に堰の2次水槽水位境界を課し、定常状態を作成しました。堰の1次水槽と2次水槽の間は越流を考慮しました。

### 5. 解析モデル

図1 参照

定常状態において、堰のゲート標高を 0.9m 高くすると、越流がなくなり、2次水槽では水位が振動しながら収束に向かいました。管内の流量は振動しながらゼロに近づきました。

### 6. 解析結果

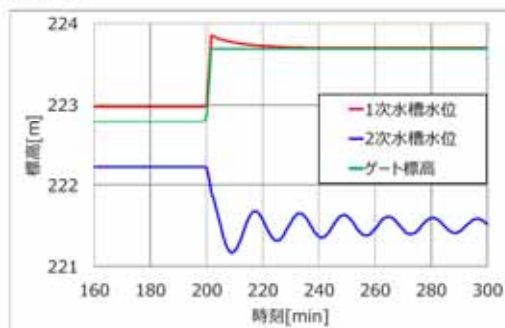
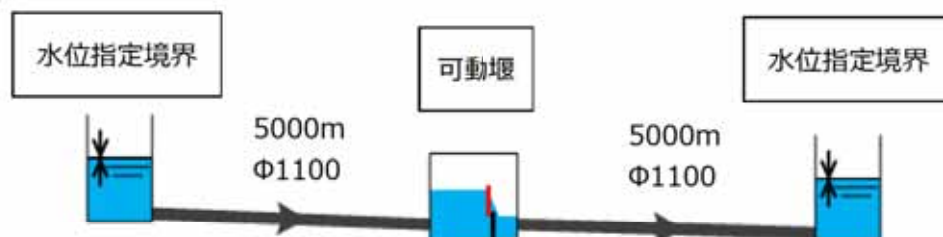


図2 ゲート標高と堰の水位の変化



- ・越流式は板谷・手島の式を使用
- ・時刻 200min にゲートを 0.9m 高くしました。

図1

## 【建築土木、エネルギー】地震時の冷却配管系の加振応答解析 [A/FNet/Ω]

## 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/  
Ω

## 2. 解析モデル・解析条件

図1のような冷却系配管に対し、東西南北方向に加振が起こった場合の過渡解析を行います。地震波の条件は図2にあるように最大約200gal（震度4から5弱相当）とし、東西・南北共通としました。

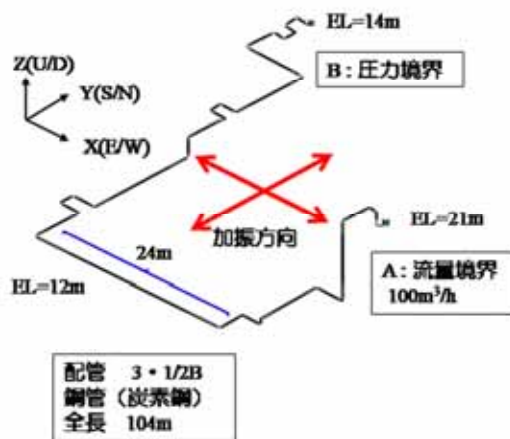


図1 プラントの解析モデル図

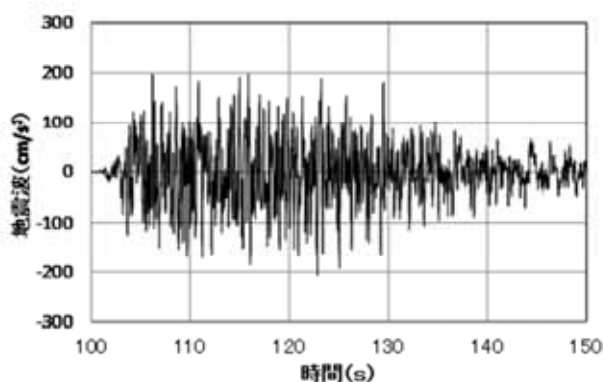


図2 地震波条件（出典：一般財団法人日本建築センターの模擬波（基盤波）データ）

## 3. 解析結果

図3に結果を示します。グラフ中の赤丸は液柱分離が起こっていることを示します。加振によって圧力が飽和蒸気圧に至り、液柱分離・再結合によって圧力上昇が起こっている様子が分かります。

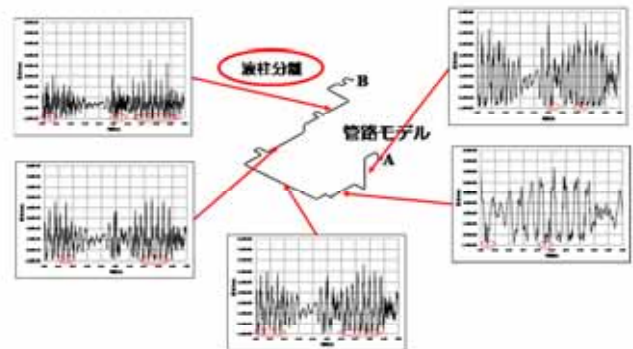


図3 計算結果  
（各部の管内圧力変動：110-120s）



## 【エネルギー】都市ガス管路網地震時の供給停止に伴う圧力振動過渡解析 [A/FNet/Γ]

### 1. 解析対象

小規模実験系および大規模都市ガス管路網

### 2. 使用ソフトウェア

管路系流体過渡解析ソフトウェア Advance/  
FrontNet/Γ

### 3. 協力

エネルギー会社様

### 4. 背景

地震時の都市ガス遮断時の圧力波収束時間を解析し、小規模実験との比較を行います。  
得られた結果を実規模系へと適用し、システム復旧時間の検討を行います。

### 5. 解析モデル

- ・管径 50A・管長 40m のポリエチレン管を 5 巻連結し、配管全長 200m。
- ・地震により地区ガバナとマイコンメーターが瞬時にガス供給を遮断する状況を配管両端のボール弁を急閉鎖することで表現。

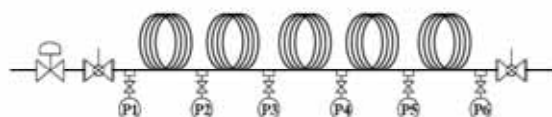


図1 小規模実験の配管系

### 6. 解析結果

小規模実験系では、Advance/FrontNet/Γの計算結果が実験結果をよく再現しました。

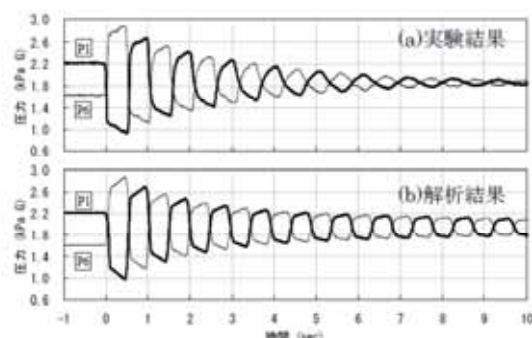


図2 小規模実験系の圧力計  
P1 と P6 の圧力時間変化

### 7. 応用解析

実規模系に応用し、システム復旧時間の検討に役立てることができました。



図3 実規模低圧導管網地域ブロック

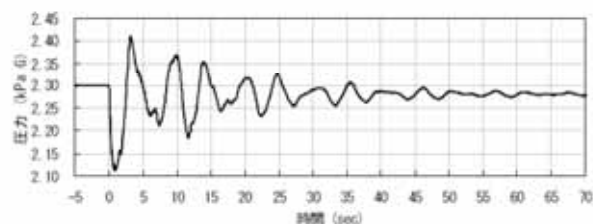


図4 実規模低圧導管網のガバナ位置の圧力時間変化

### 8. 参考文献

富永他、”地震時の供給停止に伴うガス導管網内の圧力振動解析”，土木学会予稿集(2010)。

## 【エネルギー】ガスパーズ解析の実測値との比較 [A/FNet/Γ]

## 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/  
FrontNet/Γ

## 2. 参考

出典: 染谷雄史他、"管路内での異種気体混合に関する研究"、日本流体力学学会(2007)

## 3. 解析モデルと条件

図1に示すように、左側から空気と二酸化炭素が流入口から合流して大気開放される系があります。最初、空気と二酸化炭素のモル分率が0.9:0.1で流れていますが、時刻4sに空気と二酸化炭素のモル分率が0.1:0.9となるような流入条件とします。

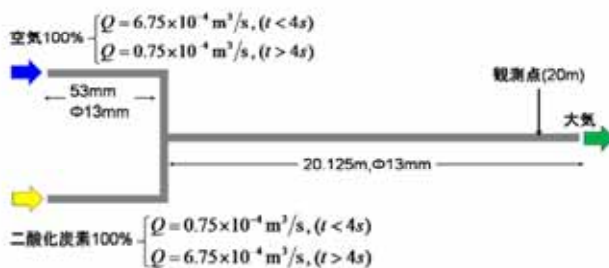


図1 解析モデルと解析条件

## 4. 解析結果

図2に観測点における二酸化炭素のモル分率の時間変化を示します。試験では流量の切り替え4sを含んだ7.5s後に二酸化炭素のモル分率が50%に変化しています。図では、二酸化炭素のモル分率が50%になる時間(試験の7.5s)を0sとしています。計算では、対流項の差分スキームとして界面をシャープに捉えるTVD制限リミタ付き差分法を採用しました。青線は乱流拡散を考慮しない場合、緑線は乱流拡散を考慮した場合の二種類を比較しています。乱流拡散を考慮した場合の計算が試験をよく再現していることが分かります。

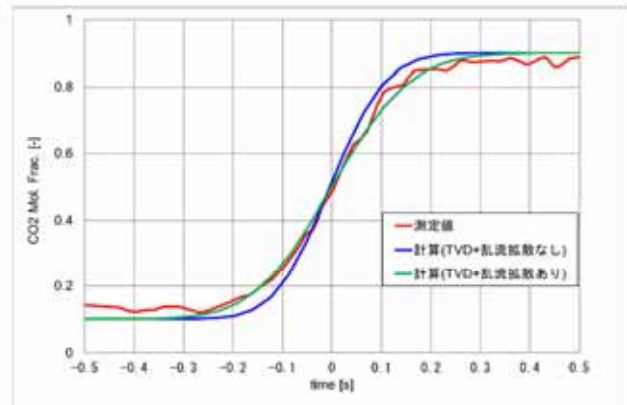


図2 計算結果  
(二酸化炭素のモル分率の時間変化)

## 【産業機械、エレクトロニクス】

## 超高圧と超低压が混在する管路系流体解析 [A/FNet/Γ]

## 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/  
FrontNet/Γ

## 2. 解析モデルと条件

図1のように両端にタンクが設置されている管路系にて、バルブを全開にして断熱圧縮の過程を計算します。初期条件は、N<sub>2</sub> タンクは超高圧の 30.1 MPa、O<sub>2</sub> タンクは低圧の 0.1 MPa と超低压の 1.0 Pa、 $1.0 \times 10^{-3}$  Pa の 3 ケースについて実施します。Advance/FrontNet/Γでは、実在物性用理想気体状態方程式を扱えるため、比較のために実在物性用のデータベース NIST/REFPROP、完全理想気体および実在物性用理想気体状態方程式を適用して計算結果の比較を行います。なお、NIST/REFPROP は、超低压が適用範囲外であるため、O<sub>2</sub> タンクの初期条件が超低压の計算ケースでは適用していません。

超低压では摩擦圧損が非現実的な過大評価となるため、文献(1)(2)を参考に Knudsen 数に応じて滑り領域を考慮した摩擦係数に乗じる係数を算出するモデルを作成しています。

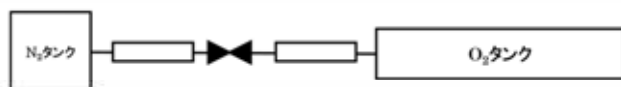


図1 計算モデル

## 3. 解析結果

計算結果を図2に示します。O<sub>2</sub> タンクが低圧のケースでは、0.35 s 程度で流れが定常になっていることが分かります。また、O<sub>2</sub> タンクが超低压のケースでも同様の結果が得られていることから、超低压の条件でも適切に計算できることが分かります。なお、O<sub>2</sub> タンクの圧力がとても低いことから、縦軸を対数として表示しています。各状態方程式の計算結果を比較すると、両ケースとも、完全理想気体方程式は実在物性用の方程式

と比べて圧力が高いこと、実在物性用の方程式はどのモデルも同じような圧力推移になっていることから、実在物性用の方程式は分子間力と分子の占める体積が計算に反映されていることが分かります。

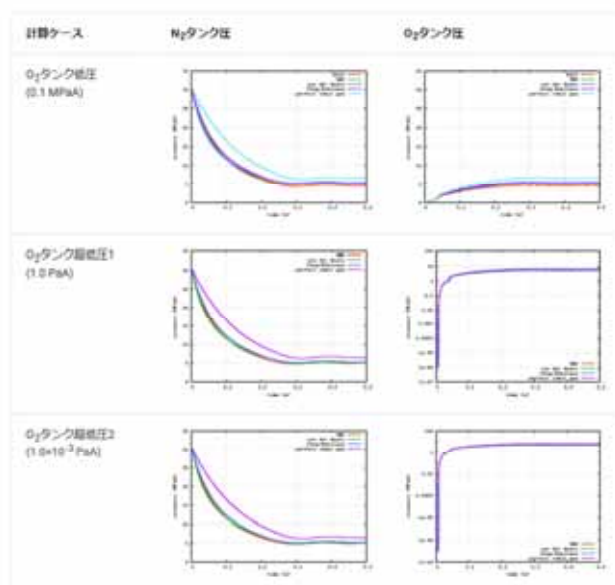


図2 各タンクの圧力変化

## 4. 参考

- (1)<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E5%B9%B3%E5%9D%87%E8%87%AA%E7%94%B1%E8%A1%8C%E7%A8%8B>
- (2)<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%AF%E3%83%8C%E3%83%BC%E3%82%BB%E3%83%B3%E6%95%B0>



## 【建築土木、エネルギー】水 - 空気置換管路系流体解析 [A/FNet/Γ]

## 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/  
FrontNet/Γ

## 2. 解析モデルと条件

空気で満たされた長さ 110 m の直管の入口から水を送り出します。概略図を図 1 に示します。ここで、空気と水は計算初期は静止状態であり、圧力は大気圧、温度は 300 K とします。また、過渡中は 300 K で温度一定とし、直管出口は大気開放とします。

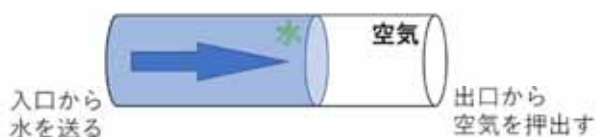


図 1 概略図

## 3. 解析結果

計算結果を図 2 に示します。細線が水の体積率で、太線が密度です。細線と太線はほぼ重なっており、水の密度が  $1000 \text{ kg/m}^3$ 、空気の密度が  $1.2 \text{ kg/m}^3$  であることから、時間が経つごとに水が出口に向かって移動していることが分かります。

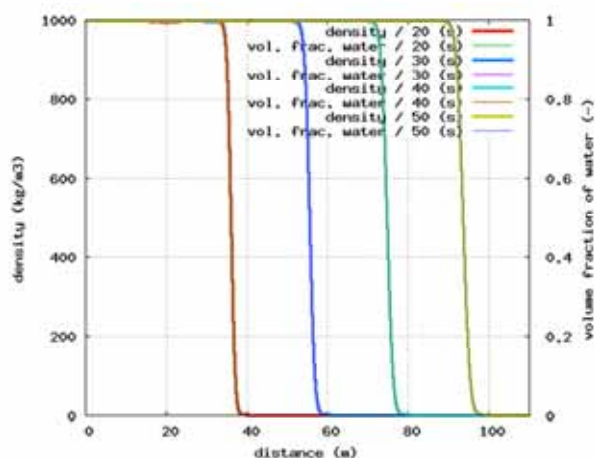


図 2 計算結果

## 【エネルギー】熱量変動解析(実機比較) [A/FNet/Γ]

## 1. 使用ソフトウェア

管路系流体解析ソフトウェア Advance/  
FrontNet/Γ

## 2. 計算条件

## 2.1. 計算対象の AFNΓ モデル

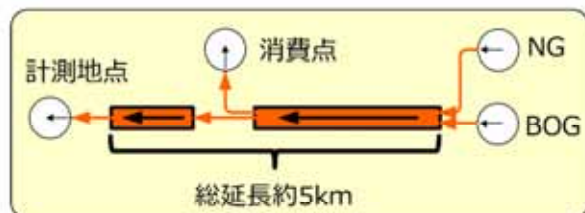


図 1

## 2.2. 流れ場の拡散モデル

$$D_{iN}^{flow} = \begin{cases} \text{Re} < 3000 & D_{iN}^{flow} = ud \frac{Sc \text{ Re}}{192} \\ \text{Re} \geq 3000 & D_{iN}^{flow} = ud \text{ Re}^{-\frac{1}{8}} \end{cases}$$

図 2

## 2.3. NG 流量 (実機)

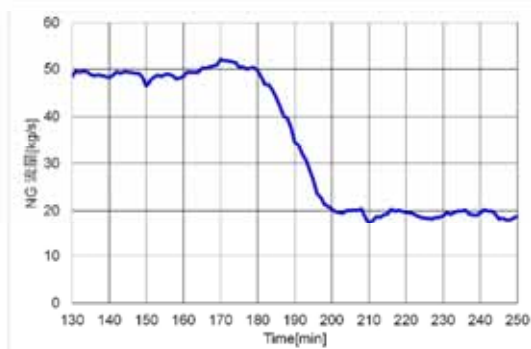


図 3

## 2.4. BOG 流量 (実機)

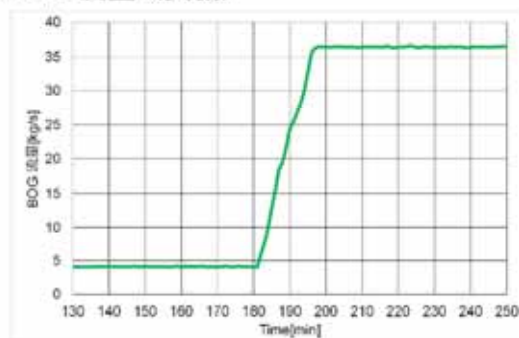


図 4

## 3. 計算結果

- 時刻 200min から 225min あたりまでの熱量の時間変化(熱量変化率)をよく再現しました。
- 計算値と実測値を比較するために、熱量計の応答時間を 1 次遅れとして考慮し計算値に反映させました。

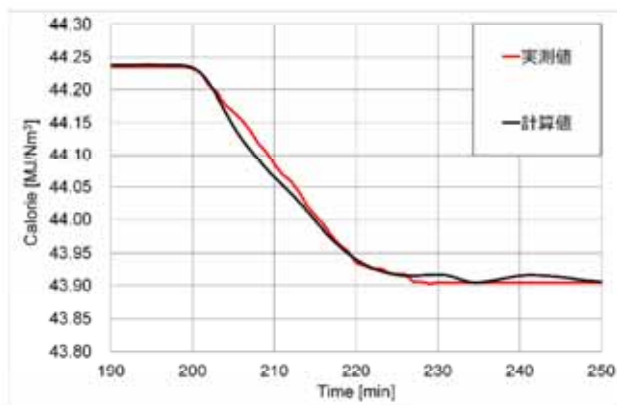


図 5 計測地点の混合ガス熱量変化

## 4. まとめ

NG と BOG の流量実機データを境界条件として計測地点の混合ガス熱量変化を計算しました。NG および BOG の流量変化時間から計測地点までの輸送遅れを伴った熱量変化について、計算が実機データをよく再現しました。

## 【産業機械、材料・化学、原子力】ウォーターカーテンによる吸収を伴う漏洩ガスの拡散解析 [A/FMP]

### 1. 概要

有害ガスの漏洩事故が発生した場合の減災対策として、ウォーターカーテンによる有害ガス濃度の低減効果を解析した事例をご紹介します。本計算では、ウォーターカーテンの水滴において有毒ガスの吸収を考慮します。

### 2. 使用ソフトウェア

気液二相流解析ソフトウェア

Advance/FrontFlow/MP

### 3. 解析条件

図1に計算格子と境界条件を示します。漏洩ガスはアンモニアガスとし、ウォーターカーテンを作動させる前の定常分布を初期値とし、ウォーターカーテン作動後10sのアンモニアガスの質量分率、水の体積分率、水滴中アンモニアモル濃度、気相速度、液相速度を求めます。(右表1)

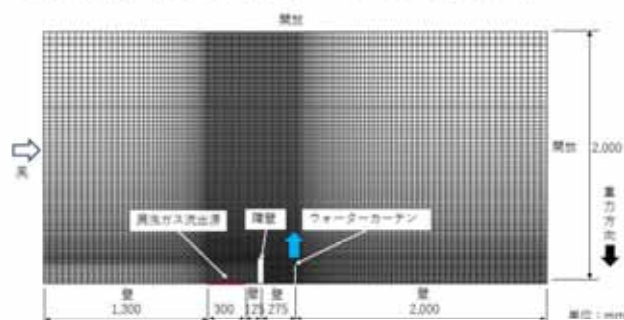


図1 計算格子と境界条件

### 4. 解析結果

ウォーターカーテン作動前のアンモニアガスの質量分率と気相速度をそれぞれ図2と図3に示します。ウォーターカーテン作動後10sのアンモニアガスの質量分率、水の体積分率、水滴中アンモニアモル濃度、気相速度、液相速度を図4から図8に示します。ウォーターカーテン作動後、障壁の上流側と下流側でアンモニア質量分率の低減が見られます。また、水滴中アンモニ

アモル濃度は飽和モル濃度  $1.8 \times 10^4 \text{ mol/m}^3$  に達していないことから、ウォーターカーテン作動後10sにおいて水滴はアンモニアガスを吸収できることが分かります。

表1 解析条件

解析条件	設定値
ウォーターカーテンの噴射幅	20 mm
ウォーターカーテンの噴射位置（下面からの高さ）	150 mm
気体	空気とアンモニアガス
液体	水
アンモニアの飽和モル濃度（水滴に溶ける最大値）	$1.8 \times 10^4 \text{ mol/m}^3$
風の色度	3 m/s
アンモニアガスの漏洩速度（鉛直方向）	1 m/s
ウォーターカーテンの噴射速度	5 m/s
平均水滴径	1 mm
気液二相流の扱い	二流体モデル 第1相：空気とアンモニアガスの混合ガス 第2相：水滴
乱流モデル	k-ε モデル
その他の基礎方程式	・アンモニアガスの質量保存方程式 ・水滴中のアンモニアモル濃度の輸送方程式 ・アンモニアガス吸収モデル
重力加速度	$9.80665 \text{ m/s}^2$
次元	2
水平方向の格子数	171
鉛直方向の格子数	95
時間刻み幅	$10^{-3} \text{ s}$
現象時間	10 s



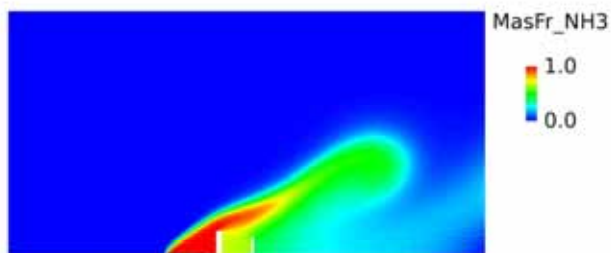


図2 ウォーターカーテン作動前のアンモニアガスの質量分率

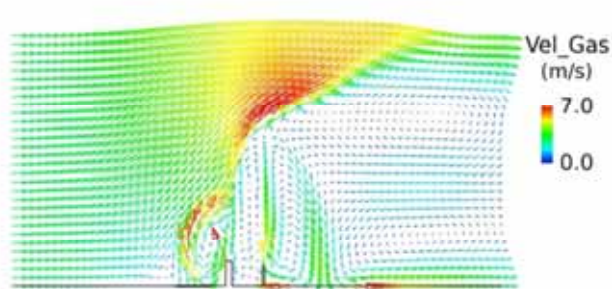


図7 ウォーターカーテン作動後 10 s の気相速度

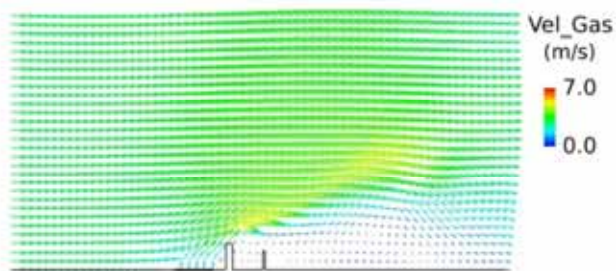


図3 ウォーターカーテン作動前の気相速度

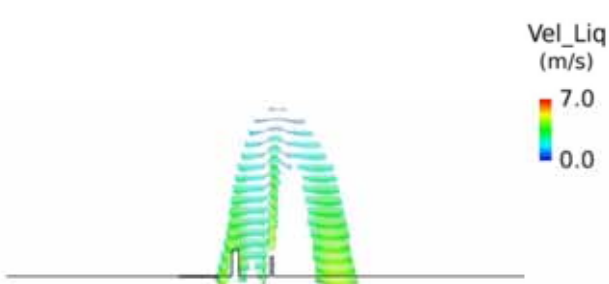


図8 ウォーターカーテン作動後 10 s の液相速度

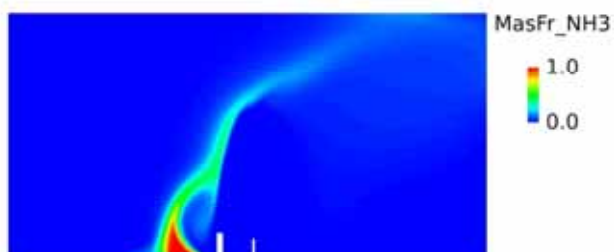


図4 ウォーターカーテン作動後 10 s のアンモニアガスの質量分率

## 5. 本解析で分かったこと

ウォーターカーテンによる有害ガスの拡散抑制効果を確認できました。

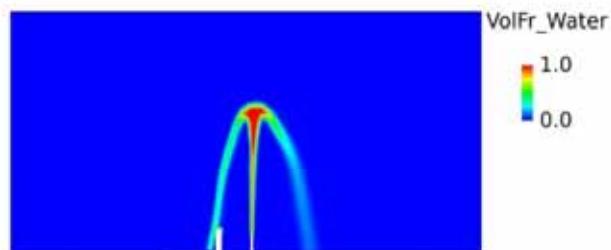


図5 ウォーターカーテン作動後 10 s の水の体積分率

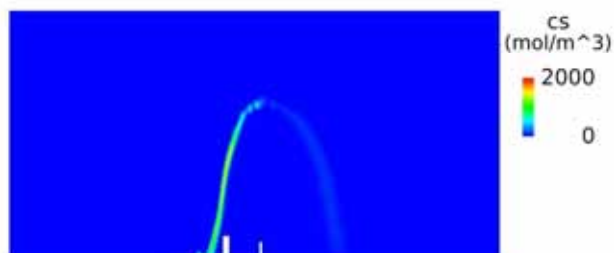


図6 ウォーターカーテン作動後 10 s の水滴中アンモニアモル濃度

## 【環境・防災】河川氾濫解析・洪水リスク評価 [A/RiverFlow]

## 1. 解析対象

中小河川・大河川の全流域と氾濫原を対象とした  
 溢水・越水による外水氾濫

## 2. 使用ソフトウェア

河川氾濫シミュレーションシステム  
 Advance/RiverFlow

## 3. 背景

世界最先端の地球全域を対象とした河川氾濫モデル（全球・地表水動態モデル）『CaMa-Flood』をソルバーに採用した河川氾濫シミュレーションシステムを用いることで、複数の河川が影響し合うと同時に各地域の地形にも依存する複雑な河川氾濫解析が可能となりました。

中小河川も含めた全流域を計算対象とするため、背水効果（バックウォーター現象）が自然と表現できます。また、従来の河川氾濫モデルよりも数万～数百万倍高速な河川氾濫シミュレーションが実行可能なため、長期のシミュレーション結果から極値統計解析を用いて洪水リスク評価を行うことができます。

## 4. 解析モデル

## 4.1. 使用データ

項目	データ名	提供元
標高	MERIT DEM	東京大学生産技術研究所
河川	MERIT Hydro	東京大学生産技術研究所
流出量①	ERA5 Land	ヨーロッパ中期予報センター
流出量②	Earth2Observe 再解析データ	ヨーロッパ中期予報センター
流出量③	気象モデル WRF	アドバンスソフト株式会社

## 4.2. 解析対象

解析対象	計算範囲・解像度など	入力データ・計算期間
2020年7月 球磨川氾濫	解析範囲：日本全域 水平解像度：1min （解析） 水平解像度：1sec	入力データ：流出量① 計算期間：2020年7月1～8日

	（可視化）	
メコン川流域洪水リスク評価	計算範囲：全球 水平解像度：15min （解析） 水平解像度：1min （可視化）	入力データ：流出量② 計算期間：1980～2014年
台風19号の接近に伴う千曲川氾濫	解析範囲：日本全域 水平解像度：1min （解析） 水平解像度：1sec （可視化）	入力データ：流出量③ 計算期間：2019年10月10～14日

## 5. 解析結果

2020年7月は長期にわたり梅雨前線が本州付近に停滞し、西方と南方から流入する大量の水蒸気が九州を中心に西日本から東日本にかけて集まりやすい状態でした。特に九州地方で多数の線状降水帯が発生し、時間雨量30mmを超える激しい雨が降り続けました。この豪雨により球磨川流域で甚大な水害が発生しました。



図1 人吉市周辺の浸水深



図2 国土地理院の浸水推定図



図1は日本全域で7月1～8日の1週間を計算期間とする河川氾濫解析を実行した後、人吉市周辺の浸水深を水平解像度 1sec (約 30m) にダウンスケーリングして可視化したものです。その結果は国土地理院の浸水推定図 (図2) と良く一致しました。

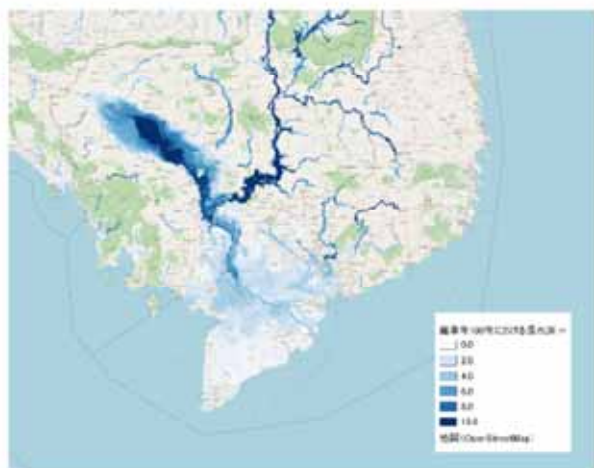


図3 メコン川流域の浸水深

図3は1980年から2014年の35年間の全球の河川氾濫シミュレーションから、メコン川流域を対象に確率年100年として極値統計解析 (確率分布関数は Gumbel 分布を仮定) を実施して、浸水深を算出したものです。水平解像度は 1min (約 2km) にダウンスケーリングしています。全球を

1度に解析できるので、洪水リスク評価を効率よく実施することができます。



図4 千曲川 (浅川合流部) 付近の浸水深

図4は2019年の台風19号の接近に伴う千曲川氾濫を5日間の台風の気象シミュレーションの結果 (図5) を入力データとして河川氾濫シミュレーションを行った結果です。図1と同様にダウンスケーリングしています。気象シミュレーションは大気拡散影響予測システム Advance/Emerg と同じ気象モデルを使用しました。堤防の決壊が考慮されていないため、国土地理院の浸水推定図より浸水深を過小評価していますが、新幹線車両基地が浸水するなどの一致する特徴も見られました。

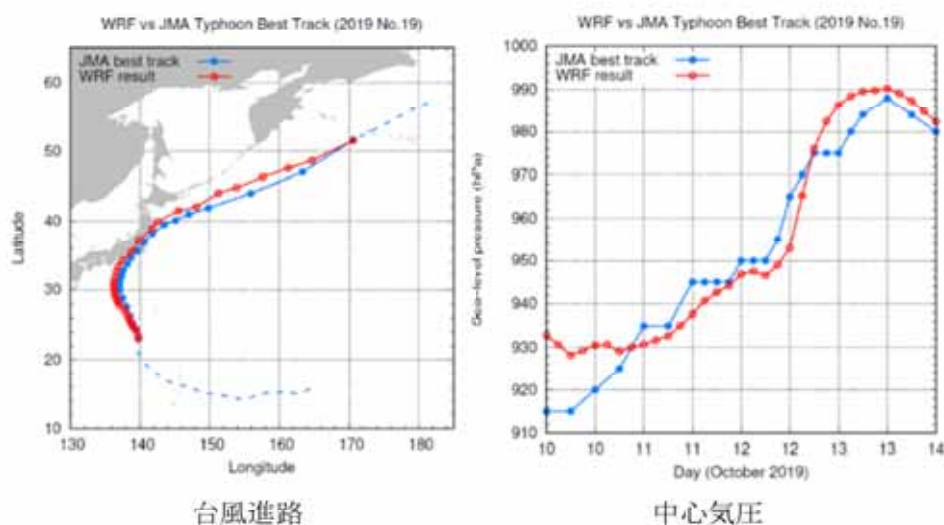


図5 台風19号の気象シミュレーションと観測 (気象庁ベストトラック) との比較  
河川氾濫シミュレーションには降雨から計算された流出量を入力として与えています。



## 【環境・防災】花粉飛散量の評価 [A/Emerg]

## 1. 解析対象

領域スケールの気象現象、物質拡散現象

## 2. 使用ソフトウェア

大気拡散影響予測システム Advance/Emerg

## 3. 背景

2019 年の東京都千代田区におけるスギ花粉の飛散量を解析しました。気象データとして再解析データを用いて、約 3 カ月間の気象シミュレーションと花粉の拡散シミュレーションを行いました。スギ花粉の放出源は東京周辺の首都圏 6 カ所で放出源ごとの寄与を評価できました。

## 4. 解析モデル

表 1 解析条件（気象モデル）

項目	設定
解析期間	2019 年 2 月 13 日 0 時～ 2019 年 5 月 15 日 0 時 (UTC)
気象データ	NCEP-FNL (水平解像度 1 度×1 度)
標高データ	GMTED2010
陸面データ	USGS
ネスティング	1 段階（親領域と子領域）
水平解像度 (親領域)	6km × 6km
水平解像度 (子領域)	1.5km × 1.5km

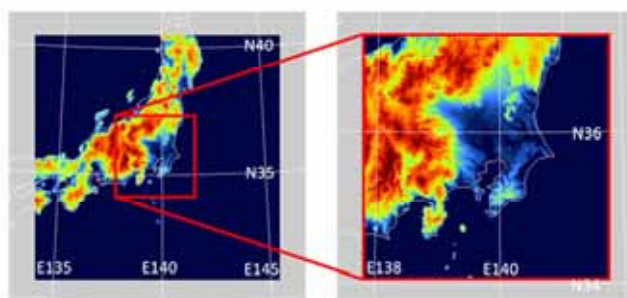


図 1 親領域と子領域の計算領域



図 2 スギ花粉の放出源

表 2 解析条件（拡散モデル）

項目	設定
解析期間	2019 年 2 月 14 日 0 時～ 2019 年 5 月 15 日 0 時 (UTC)
放出源	東京周辺の 6 カ所 (30km × 30km の平面を仮定)
花粉放出量	スギ林 1 カ所当たり $1.4 \times 10^{18}$ 個
水平解像度	1.5 km × 1.5 km
計算粒子数	スギ林 1 カ所当たり $1.0 \times 10^7$ 個
沈着過程	乾性沈着：重力沈降＋層流底層の 効果 湿性沈着：洗浄率モデル

花粉放出量は、スギ林で生産される雄花の数 8000 個/m<sup>2</sup> と雄花の平均花粉数 396,000 個として放出源の面積（スギ林の比率は 50%）を乗じて求めた値です。湿性沈着は降雨に伴って花粉が地表面に沈着する効果を指します。

## 新製品 Advance/OF-DFT に関するお知らせ

# 深層学習 Orbital Free-DFT を開発

密度汎関数理論(DFT)における標準的な解法として、長年にわたりKohn Sham-DFT(KS-DFT)が使われてきました。KS-DFTは高精度に多くの物理現象を再現することに成功したものの、計算コストが高く大規模系のシミュレーションが困難であるという問題を含んでいます。軌道(波動関数)を使った表現がKS-DFTの計算コストの原因であり、軌道を使わずに電子密度を直接最適化するOrbital Free-DFT(OF-DFT)はより低い計算コストで極めて高速なシミュレーションを実現します。しかしながら、OF-DFTにおいては実用に耐え得る精度の運動エネルギー汎関数が未知であるという問題があります。アドバンスソフト株式会社では、独自に開発した場の深層化アルゴリズムを適用することで、この問題を解決しました。深層学習された運動エネルギー汎関数 AdvanceSoft25を搭載した新製品Advance/OF-DFTを用いたサービスを提供いたします。

## Kohn Sham-DFT vs Orbital Free-DFT

	KS-DFT	OF-DFT	力場法
電子密度	有り	有り	無し
軌道(波動関数)	有り	無し	無し
運動エネルギー	軌道で明示的に計算	深層学習汎関数 AdvanceSoft25	-
計算精度	高い	汎関数に依存	力場に依存
計算コスト	$O(N^3)$	$O(N)$	$O(N)$
汎用性	全元素に適用可能	擬ポテンシャルの 拡充が課題 (次バージョンで解決予定)	GNN力場などで 汎用性を担保

## GNN力場と同水準の計算コストで、電子状態も解析可

- OF-DFTの計算コストは原子数 $N$ に比例する程度( $O(N)$ )であるため、Graph Neural Network(GNN)などを使った機械学習力場と同水準の計算速度でシミュレーションが実行できる。
- 電子密度の情報を保持しているため、SCF計算収束後にBader電荷なども解析できる。
- 電子やホールドーピングも可能であり、Effective Screening Medium(ESM)との併用で電極電位を制御した大規模系のMDシミュレーションも実現し得る(現行バージョンではESMは未実装)。外部電場の印加も容易である。
- 交換相関汎関数の種類はSCF計算実行時に選択可能であるため、系に応じてvdW-DFやrVV10などの分散力に対応した非局所相関も利用できる。DFT-D3などの経験関数は不要である。
- 波動関数の情報は含まないので、バンド構造や状態密度の計算には別途KS-DFTによる計算が必須である。



# 日本で唯一のTCADメーカー アドバンスソフト株式会社

## Advance/TCAD

2011～2015；科学技術振興機構 研究成果最適展開支援プログラム (A-STEP)  
本格研究開発ステージ 実用化挑戦タイプで開発

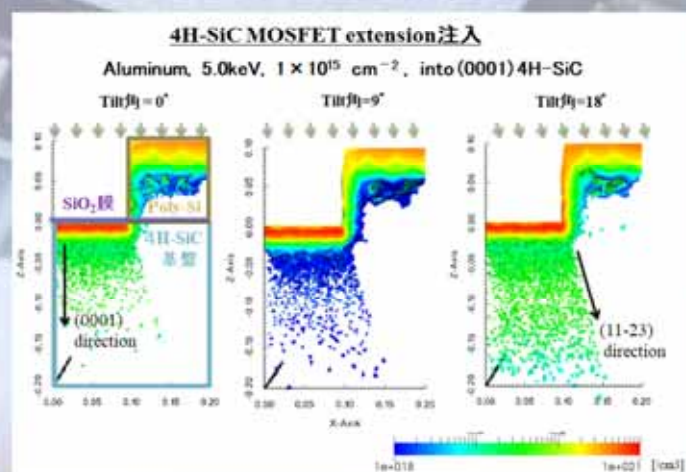
超微細半導体デバイスからパワーデバイスまでの解析において、デバイスシミュレーション、プロセスシミュレーションの基本機能はもちろん、**光・電磁波との連成解析、複数デバイスや外部回路との一括解析、熱解析**等のデバイス開発で必要とされる各種機能を備えています。

アドバンスソフトがソースコードレベルから自社開発しており、お客さまのご要望に臨機応変に対応できる国産の3次元TCADシステムです。

独自に開発した高速で安定的な計算手法や分散メモリ型並列計算機能の採用などにより高速でロバストな大規模3次元プロセス・デバイス計算が可能です。

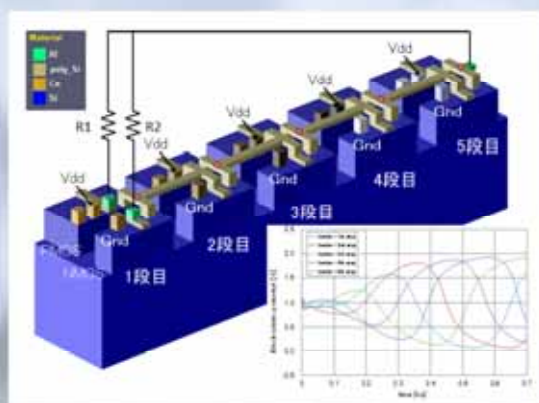
各種の物性値や計算パラメータはユーザーにより任意の値が設定可能です。研究から製造までの幅広い用途にご使用いただけます。

超微細デバイス、パワーデバイスのそれぞれの解析に特有な解析機能を備えています。

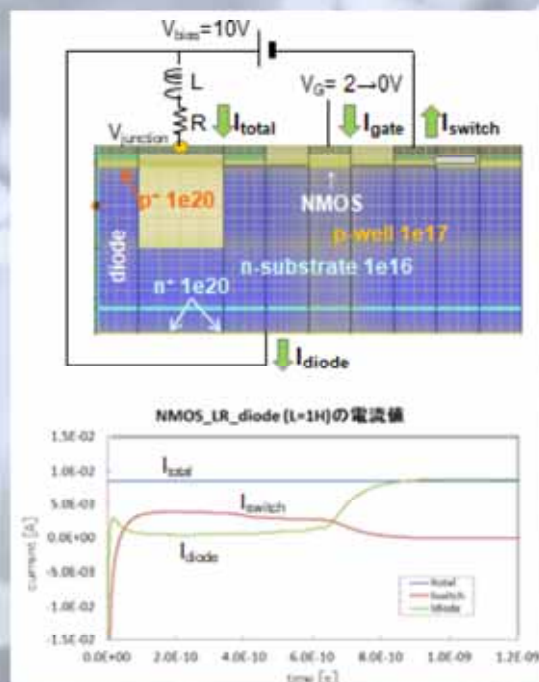


## 特徴

- ◆ 高速3次元解析
- ◆ 頑健 (ロバスト) な計算手法
- ◆ 幅広いデバイスに対応
- ◆ 大規模解析



5段CMOSリングオシレータの過渡解析



アドバンスソフト株式会社 営業部

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング17階西

TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580

URL: <http://www.advancesoft.jp/> E-mail: [office@advancesoft.jp](mailto:office@advancesoft.jp) ←お問い合わせはこちらへ



tcad\_20221207



燃焼解析を、より速く、より簡単に  
複雑なデータもスマートに可視化できるソフトウェア

## バージョンアップのポイント

### ○ 燃焼・化学反応の入力補助機能

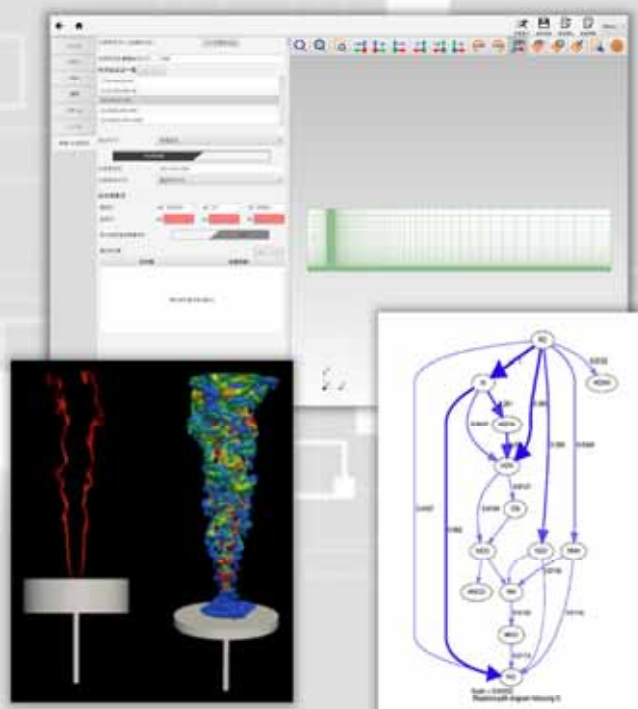
化学反応メカニズムデータの読み込みとGUIでの確認・編集、関連項目の自動設定。

### ○ 分散ファイル形式の結果出力に対応

Paraview分散ファイル形式(pvtu形式)での結果出力に対応。大規模解析時の結果可視化に便利な機能。

### ○ その他

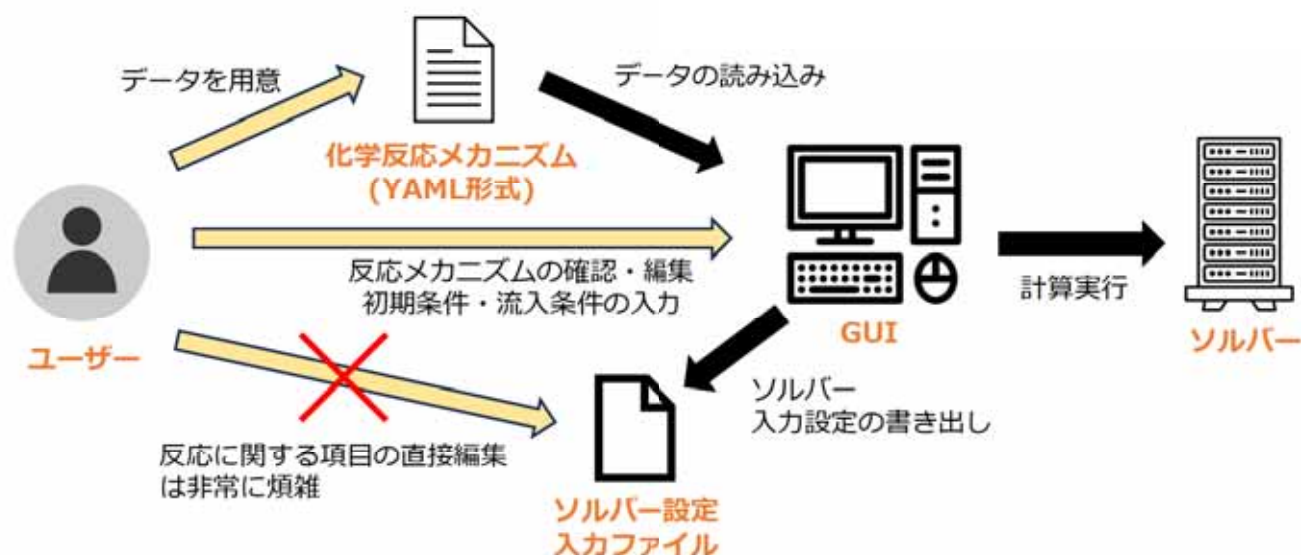
- 素反応解析時の反応速度出力オプション
- ソルバーの軽微な修正
- GUIの動作改良



## ▶ 燃焼・化学反応の入力補助機能

化学反応メカニズムデータ(YAML形式)を読み込み、GUI上で確認・編集が行えます。初期条件や境界条件も化学種組成や空気比などを指定するだけで一括で入力され、複雑な燃焼解析の準備がより簡単に進められます。

### 燃焼解析のプロセス全体の流れ





# 計算科学技術をけん引するアドバンスソフト株式会社

## 設立の目的と経緯

計算科学技術は科学技術、産業技術の基盤技術ですが、2000年当時、わが国の計算科学技術用の産業応用ソフトウェアは欧米のソフトウェアにほぼ独占されている状況にありました。この状況を打破すべく、計算科学技術用の産業応用ソフトウェアの研究開発から実用化までを目指す、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プロジェクト」が実施されました。

アドバンスソフト株式会社は、東京大学生産技術研究所とともにこのプロジェクトに参加し、ソフトウェア開発の中核を担うとともに、開発されたソフトウェアの実用化、事業化することを目的として、2002年に創業されました。

## アドバンスソフト株式会社が提供するサービス

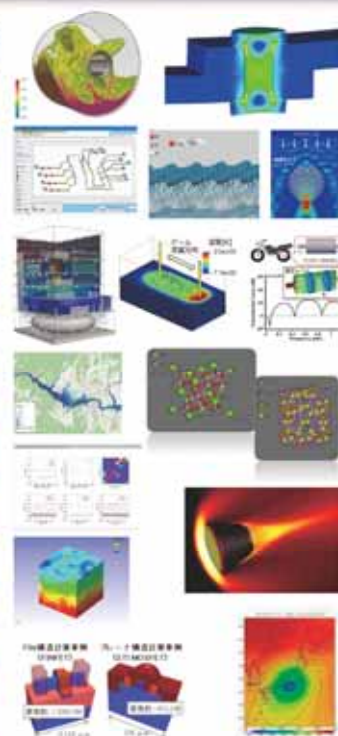
- ・計算科学技術用ソフトウェアの開発の請負
- ・計算科学技術用ソフトウェアの販売
- ・計算科学技術用ソフトウェアによる解析
- ・セミナー、コンサルティング

※アドバンスソフト株式会社が開発・販売するソフトウェアの総合カタログは、webページからダウンロードしてください。



### アドバンスソフト株式会社が開発・販売する主なソフトウェア

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red  
気液二相流解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP  
高速流解析ソフトウェア Advance/FOCUS-i  
構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR  
汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP  
管路系液体過渡解析ソフトウェア Advance/FrontNet/Ω  
管路系流体過渡解析ソフトウェア Advance/FrontNet/Γ  
音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise  
河川氾濫シミュレーションシステム Advance/RiverFlow  
大気拡散影響予測システム Advance/Emerg  
第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE  
ナノ材料解析統合GUI Advance/NanoLabo  
ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD  
3次元TCADシステム Advance/TCAD  
電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave  
過酷事故時原子炉建屋・格納容器の熱流動解析コード Advance/BAROC  
深層学習用ツール Advance/iMacle



※アドバンスソフト株式会社が定期的に発行する技術雑誌「アドバンスシミュレーション」が、このたび、科学技術振興機構(JST)様のJDreamIII・J-Global等の科学技術文献データベースに、今後の発行号から順次収録されることとなりましたことをご案内いたします。

## 技術者募集!

非常勤専門職(時給3,000~5,000円)も募集中。  
勤務時間等は応相談!



Advance Soft

JAB  
MS  
CM021



修士修了の方、博士号取得者、中途の方も随時募集しています!  
ぜひお問い合わせください。「オンライン会社説明会」を開催しております。

アドバンスソフト株式会社 人事部 採用担当 小池太一

TEL: 03-6826-3970 URL: <https://www.advancesoft.jp/aboutus/recruit/>

E-mail: [recruit@advancesoft.jp](mailto:recruit@advancesoft.jp)

第4事業部が2021年1月に「ISO9001:2015」を取得

## お問い合わせ

アドバンスソフト株式会社 営業部

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング17階西

TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580 URL: <http://www.advancesoft.jp/> E-mail: [office@advancesoft.jp](mailto:office@advancesoft.jp)





# 》》》技術者（新卒および中途採用）募集

下記連絡先へ電話、メールにてお問い合わせください。

アドバンスソフト株式会社 総務部 人事課 担当：小池太一  
TEL：03-6826-3970 E-mail：recruit@advancesoft.jp  
〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング 17 階西

【修士修了の方、博士号取得者、中途の方も随時募集しています】

## 技術職

募集職種	数値解析、ソフトウェア開発技術者
雇用形態	正社員
応募資格	<ul style="list-style-type: none"><li>● 大学卒以上、専門的経験を持った希望者は年齢問わず</li><li>● 日本語での業務遂行に支障のない方</li></ul>
待遇	<ul style="list-style-type: none"><li>● 給与：当社基準に基づき決定（賞与 年1回、昇給 年1回）</li><li>● 勤務時間：9時00分～17時30分、休憩時間 12時00分～13時00分</li><li>● 待遇・福利厚生：社会保険完備、交通費支給</li><li>● 休日・休暇：土日祝、年末年始、有給休暇</li></ul>
開発言語	Fortran, C, C++, C#, JavaScript, HTML, CSS, SQL, Python, 機械学習系のフレームワーク（TensorFlow, PyTorch）, MPI, OpenMP, OpenACC, OpenCL, CUDA, MATLAB/Simulink/Stateflow, Modelica（OpenModelica, Dymola）など

## 非常勤専門職も募集中

募集職種	数値解析、ソフトウェア開発技術者
応募資格	<ul style="list-style-type: none"><li>● 理学博士、工学博士歓迎</li><li>● 科学技術計算、ソフトウェア開発の経験者</li><li>● 大学卒以上、専門的経験を持った希望者は年齢問わず</li><li>● 日本語での業務遂行に支障のない方</li></ul>
待遇	<ul style="list-style-type: none"><li>● 勤務時間、在宅勤務、応相談</li><li>● 時給 3,000 円～5,000 円</li><li>● 休日・休暇：土日祝、年末年始、有給休暇</li></ul>

## 技術営業職

募集職種	営業担当者
雇用形態	正社員
応募資格	大学卒以上
待遇	<ul style="list-style-type: none"><li>● 給与：当社基準に基づき決定（賞与 年1回、昇給 年1回）</li><li>● 勤務時間：9時00分～17時30分、休憩時間 12時00分～13時00分</li><li>● 待遇・福利厚生：社会保険完備、交通費支給</li><li>● 休日・休暇：土日祝、年末年始、有給休暇</li></ul>