流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red GUIの紹介

大野 修平*

Introduction to Advance/FrontFlow/red GUI

Shuhei Oono*

本稿では、Advance/FrontFlow/red が数値流体ソルバーとして持つ汎用的な幅広い機能をより多くのユ ーザーが使いこなすことができるように新たに開発された専用 GUI について紹介する。新しい AFFr 専 用 GUI の特徴や機能の紹介に加え、今後の機能拡張の展望についても紹介する。

Keywords: GUI、流体解析、燃焼解析、最適化ツール

1. はじめに

Advance/FrontFlow/red(AFFr)は、文部科学省の 国家プロジェクトのもとラージ・エディ・シミュ レーション(LES)による流体解析をターゲットし て開発された FrontFlow/red をベースにアドバン スソフトが改良・実用化したソフトウェアであり、 速度、圧力、エネルギーから燃焼・騒音・キャビ テーション・自由表面といったあらゆる解析機能 を持った汎用熱流体解析ソフトウェアである。

流体現象は私たちの日常生活でも身近に起こ る現象であり、これらの現象を数値シミュレーシ ョンによって再現するためには、境界条件、初期 条件、モデル化の手法やモデルパラメーターの設 定、使用するデータベースの入力など、多くの設 定が必要となる。AFFrでは、これらの条件を設定 するためにテキストベースの制御ファイル

(fortran ネームリスト形式)を使用している。し かし、制御ファイルには無数の設定変数があり、 どの変数が必要でどれが不要なのかが分かりに くく、実際に計算を実行してエラーメッセージを 読み解き修正する作業を何度も繰り返す必要が ある。また、以前に類似の計算を行ったことがあ る場合でも、設定ファイルの一部の変更に対して 複数の箇所を編集する必要が生じるといった手 間がかかる。

*アドバンスソフト株式会社 第3事業部 3rd Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation

テキスト入力はソルバーの最も明確な設定内 容を与えるが、その内容を把握するためには外部 のマニュアルを複数参照する必要があり手間が かかるうえ、使用経験のないユーザーにとっては 大きな障害である。このような使い勝手の問題を 解消するものとして、新たに AFFr 専用 GUI を開 発した(プリポストソフトウェアとして AFFr/ Revocap があったが、内容を見直し拡張性も考慮 して設計を見直した)。AFFrGUI では、設定項目 は極力必要となるものだけを表示して視認性が 改良されており、エラーチェック機能や入力アシ ストボタンなどを設けて、入力操作が GUI の画面 一つの中で完結するように工夫されている。また、 前処理(メッシュは AFFr に対応した形式のメッ シュファイルを用意する)、計算実行、結果可視化 といった一つの解析に対する一連の操作 (Calculation)が GUI の中で行うフローとして完結 するようになっており、それぞれの計算は解析の 目的ごとに作成される Project に結び付けられる というコンセプトが採用されている (図 1)。



図 1 解析プロジェクト・計算ファイルの階層構造

以下、第2節では新しく開発された AFFrGUI に 搭載された機能とその特徴について紹介する。第 3節では、ローカル PC だけでなくリモートホス トでも実行可能なジョブ管理機能について紹介 する。GUI では今後、外部ライブラリとの連携し た機能の追加も予定しており、第4節では燃焼・ 化学反応解析に関連したものおよび最適化に関 するもので現在開発中の機能について紹介する。 最後に第5節は本稿のまとめとする。

2. GUI の基本機能

AFFrGUIでは、何か解析したいものに対して解 析プロジェクト(Project)を作成し、その中でトラ イアル&エラーやパラメータースタディといった 関連した計算(Calculation)を追加していくといっ た設計になっている(図 1)。Calculation は実際に PC 内のフォルダとして作成され、ソルバー実行 に必要な一連の入力ファイルやソルバーから出 力されるファイルがこのフォルダの中に保存さ れる。

Calculation を作成すると初めに、基本設定・追加モデル設定のためのダイアログが表示される (図 2)。基本設定の内容に応じて適用可能な追加 モデルが表示される。基本設定・追加モデルの設 定が完了すると、設定項目がいくつかのタブごと に表示された入力画面へと移る(図 3)。この設定 画面の内容は基本設定・追加モデルの設定に応じ て変化する。



図 2 基本設定・追加モデルダイアログ

設定の最初にはメッシュタブがあり、ここでは メッシュファイル読み込みに必要な情報を入力 していく。メッシュ読み込みボタンを押すと、読 み込まれたメッシュの形状データが画面右側に 表示される(図 3)。また、領域数や境界領域など がメッシュファイル読み取られ、画面内のリスト に表示される(図 3)。領域のリスト(マテリアル リスト)では、メッシュファイル内で区別された 領域をそれぞれ区別するかしないか、および括ら れた領域が流体領域であるか固体領域であるか を設定する。境界リストについても、それらが独 立な境界であるか、またはスライディング境界な どのペアとなる境界であるかを設定する。



図 3 計算設定入力画面

形状モデルから、領域の設定・境界の設定が行 われたら、モデル→流体・固体→境界条件→スキ ーム→I/O→追加モデルと設定を進めていく。設定 内容はソルバーに読み込まれる計算制御ファイ ルへと反映されていき、AFFrGUIからその内容を 確認することができる。また、既に用意された計 算制御ファイルを読み込むことも可能で、読み込 んだ内容が入力画面に反映される。

AFFrGUI を使用して設定することには以下のような利点がある。

- 一つの変更内容に対して複数の場所で変更 を行う必要があるテキストファイル入力に 対し、AFFrGUIでは一度の操作で変更が反 映される。
- 自動入力:設定内容が自明な場合にはアシス トボタンより自動入力が行われる。設定候補 からの選択など。

- エラーチェック:入力項目間の整合性がチ ェックされる。不正確な入力が指摘され、計 算実行前にエラーを事前に防ぐことが可能。
- 3 次元モデルデータとの連携:境界面やマテ リアルなどの位置を視覚的に確認しながら 入力することができる。

計算実行後は、AFFr 結果データに対して AFFrGUI からタイムステップと出力形式を指定 して、可視化ファイル変換コマンドである ffr2viz の連続実行を行うことができる。AFFrGUI の設定 画面から、Paraview[1]など ffr2viz で対応した可視 化ソフトを指定することで、結果ファイルをその まま表示することができる。

3. ジョブ管理機能

AFFrGUIからのソルバーの実行は、AFFrGUIが インストールされているローカル PC だけでなく、 スパコンなどへ SSH 接続して行うことも可能と なっている。流体現象は数値シミュレーションの 中でも特に計算資源を要求しがちであり、実用的 な解析対象に対してはクラスターPC やスパコン など数値計算に特化した計算資源を利用するこ とが標準的である。特に AFFr がメインのターゲ ットとしている LES 解析では、RANS 解析に比べ て計算規模がより大きくなるため、大規模並列計 算での利用を念頭にしており、並列スケーリング に関して重点的な改良が加えられてきた。また、 ライセンス形態も並列計算の稼働ノード数に依 存しないものとなっており、大規模計算を行いや すいことも AFFr 利点の一つである。

大規模な計算資源は多くの場合ジョブスケジ ューラーによる管理のもと共用されている。しか し共用計算サーバーでは CUI による操作が基本 的で、必要な入力データー式が用意できたとして も、ソルバーの実行までにコマンドラインによる 操作が要求されるため、不慣れなユーザーにとっ ては障壁となる。AFFr GUI では、計算サーバー上 での計算実行においても、主要なジョブ管理シス テムである TORQUE、Slurm、PJM などに対応し ており、ジョブスクリプトの作成から投入までを 自動で行う機能が提供されている。

また、流体解析は完了までに時間を要するため 複数の計算を並行して流すことが多い。複数の計 算サーバーが利用可能な場合、GUI上でそれらを 順次登録することで同時に複数の計算を実行す ることができる。一つの画面から各計算ホスト上 で実行中の計算の状態(キュー待ち、実行中、完 了など)を確認することも可能となっている。ま た、計算結果の確認においても、AFFrの標準出力 に基づく代表値のグラフ表示が可能である(図 4)。 結果の可視化についても、AFFr 結果データの可視 化ファイル変換コマンドである ffr2viz の計算サ ーバー上での実行、および可視化ファイルのダウ ンロードまで GUI で行えるものとなっている。



図 4 AFFr からの標準出力と代表値の遷移を表 すグラフプロット

4. 今後の展望

より現実的な流体物性や複雑な物理モデルを 扱った流体解析を実施する際には、物性値やモデ ルデータを表すためのデータテーブルが必要と なる。このような時は、流体ソルバーとは別に外 部ツールを使用してデータを準備する必要があ る。さまざまな用途に対応するための汎用的な機 能が備わった便利な多機能ツールが増えている が、機能が多いほど使い方が複雑になり、利用ド キュメントの量も増える。

しかしながら、実際にはユーザーごとのニーズ は限定的であり、特定のデータから特定の形式の データテーブルを作成するといった作業のみで 十分なことが多い。将来的には、フリーの外部ツ ールを AFFrGUI に統合することで、流体解析の 実行に必要な作業を簡素化することを目指して いる。これにより、以前は手間のかかっていた作 業を誰でも簡単に実行できるようになることを 期待している。本節では、現在具体的に開発検討 している機能についていくつか紹介する。

4.1. 燃焼解析に関連した機能

エネルギー、自動車、航空宇宙産業において、 燃焼過程は長い間重要な役割を担っており、燃焼 流体解析は、燃焼効率の向上や排熱、安全性評価 などの目的で活発に利用されてきた。さらに、近 年ではカーボンニュートラルの問題が浮上し、燃 焼流体解析への需要はさらに高まっている。

しかし燃焼流体解析は、複雑な現象そのもので あり、モデルの複雑化とともに、流体解析に必要 なデータの準備も非常に複雑で手間のかかるも のである。

4.1.1.素反応モデル解析における補助機能

燃焼解析のモデル化において、最も厳密な方法 は素反応解析である。この方法は、反応体同士が 衝突して反応する過程を忠実に再現し、燃料、酸 化剤、背景ガスだけでなく、不安定なラジカル分 子などの中間状態も考慮される。素反応解析にお いて広く普及しているデータ形式はChemkin形式 [2]である。AFFrGUIでも、素反応に関連する外部 データの入力形式はChemkin形式に従う予定であ り、読み込まれた内容を必要に応じて編集できる ようにする予定である。

Chemkin 反応式ファイルでは、スキームに含ま れる各反応式に対してアレニウスパラメータな どの特定のモデルパラメーターが与えられる。こ れらの値は、衝撃波管実験や層流燃焼速度などの 実験結果に合わせて研究者によって決定される。 研究成果として得られた反応スキームは一般に 公開されており、ユーザーはそれらのデータをウェ ブからダウンロードして使用することができる[3]。

素反応モデルを使用した流体解析では、基本的 にコントロールボリュームごとに逐次的に化学 反応を解く必要がある。化学反応の計算は、流体 解析全体の中でもかなりの計算量を占めること になる。そのため、流体解析の計算量には化学反 応の数が大きく影響する。研究者によって開発さ れた反応スキームは、より広範な問題に適用でき るように作成されている。例えば、炭化水素燃料 の燃焼では数百から数千の反応式が存在するこ ともある。

一方、実際の流体解析では、条件に含まれる燃料の種類が反応スキームで想定されている燃料 の種類よりも少ない場合など、すべての反応式を 解く必要はない。不要な式を削除することにより、 計算量を軽減することができる。つまり、簡略化 することで解析に不要な反応式を取り除き、計算 の効率化を図ることができる。

ここでは簡略化の一つの例として、DRG(Directed relation graph)法について紹介する[4]。DRG 法では 図 5 に示すように、化学種を頂点、化学種同士の 結びつきを矢印で表す。例えば A→B は、化学種 A が計算に含まれる場合の結果に化学種 B の存在 が影響することを意味する。従って、A を考慮す る必要がある (解析対象の燃料であるなど)場合 は、B の存在も無視することはできないというこ とになる。AB 間の結びつきは以下のように評価さ れる。

ここで和は化学種 A を含む式について取られ、l はその総数である。

B が存在するということは、B の反応に強く影 響する C も無視できない、といった具合に無視す ることのできない化学種が次々とグラフで結ば れていくこととなる。さらに C が次に依存する D が、次には B に依存するなどといった具合にある ところでグラフが閉じるまで進めていった後、グ ラフで結ばれることのなかった化学種およびそ の化学種が関わる反応式は簡略化によって除外 されたということになる。このような簡略化を行 ってくれるツールとして pyMars がある[5]。さら に感度評価も加えながらより定量的に簡略化が 得られる。GUI上で初期条件や流入条件などから 必要な化学種を判別し、pyMarsを実行して簡略化 スキームを得る機能があれば、流体解析の解析条 件を変更しても都度一貫した基準のもと自動的 に得られる簡略化モデルが使用され、素反応モデ ルの使い勝手向上につながると期待される。



図 5 DRG の一例。頂点が化学種、矢印が化学 種管の結びつきを表す

4.1.2. Flamelet テーブル作成機能

LES による高精度な乱流解析が AFFR の特徴で あり、ガスタービンなど複雑な構造の乱流火炎に ついて、その詳細な火炎構造の解析を行う場合に 用いる燃焼モデルとして Flamelet モデルが実装さ れている。乱流燃焼場における化学反応の時間ス ケールに比べ乱流場の時間スケールが十分大き い場合、乱流場の及ぼす影響は反応体内部の構造 には及ばないと考えられる。このとき、乱流火炎 は微視的に見れば層流火炎と同様の構造と考え られ、層流火炎の集合体と見なすことができる。 このような考え方は、Flamelet 概念と呼ばれ、火 炎内部構造は乱流場や火炎位置の変化と独立に 決定することが可能となる。この Flamelet 概念に 基づき、火炎位置の変化は火炎面を表現できるス カラー量の輸送式を解くことで決定し、火炎内部 の構造は層流火炎のデータを元に構築したデー タベースによって表現するモデルを Flamelet モデ ルと呼ぶ。

従って、Flamelet モデルでは解析の中で反応計 算は行わない代わりに、解析条件に対応した Flamelet データベースを用意することが必要とな る。AFFrでは、混合分率、反応進行度に対する温 度、密度、層流燃焼速度の値を、最大 23 次の多項 式として与える。また、今後の拡張としデータベ ースの用意は化学平衡計算の結果から作成され、 化学平衡計算には Cantera[6]などのフリーのツー ルが利用できる。

AFFrGUI上で、燃料の設定、拡散燃焼/部分予混 合燃焼などのFlameletモデルの設定などが与えら れれば、Canteraと連成してFlameletデータベース の作成に必要な化学平衡計算を実行し、計算結果 のフィッティングにより多項式を与えることが 可能である。Flameletモデルの利用はデータベー スの用意という点で使い勝手に問題があり、利用 が広がっていなかった面があるが、GUIの中で、 ボタンーつでデータの作成を行うものがあれば 大幅に使いやすくなると考えており現在開発を 進めている。

4.2. 最適化ツールとの連成

AFFrGUI では一つの解析プロジェクトのもと ケーススタディ、パラメータースタディ、粗い解 析→高精度解析などのような似た計算を系統的 に実施することに対する便宜を図り、図 1のよう なファイル構成を採用したが、将来的にはこのよ うな作業を自動化する機能も追加することを予 定している。

例えばパラメータースタディを自動的に行う とした場合、愚直にはある適当な範囲でパラメー ター間隔を区切り、doループを回して1つ1つ計 算を実施することが考えれば、実験計画法という 手法を使えば、より短時間で的確な結果を得るこ とができる。実験計画法では計算結果に対してあ る目的値を定義し、パラメーターごとに計算(実 験)を実施してパラメーターと結果の組みを追加 していく。計算結果を得てから次の計算へ移るま でに、これまでに取ったパラメーターの値と計算 結果から、トレンドを得るために最も適切な値の 取り方を定める手法である。

DAKOTA は、最適化、パラメーター推定から感 度解析、不確実性評価までを行うための包括的な 機能を含んだ最適化ツールセットである[7]。 DAKOTA はパラメーター設定→ソルバー実行→ 結果取得の部分をブラックボックスとして、その 外部で動くものである。従ってユーザーは DAKOTA を制御するための設定に加え、パラメー ター設定→ソルバー入力変更と、ソルバー結果→ DAKOTA 目的関数の部分をスクリプトなどで実 装する必要がある。この部分も GUI で自動化でき れば、ユーザーはただ最適化問題の設定のみを考 えるのみで、最適化までに必要な一連の計算を実 行してくれるような最適化機能の開発を目指し ている。

5. まとめ

新たに導入された AFFrGUI の基本機能や特徴 について紹介した。煩雑なテキスト入力をユーザ ーに意識させることなく、無駄なものを画面から 取り除き真にユーザーが意識することが必要な 項目の設定に集中できるようなユーザーインタ ーフェースを目指して作られている。また、設定 だけではなく、計算実行からジョブ管理、結果確 認まですべて GUI 上で作業が閉じるように機能 が揃えられていることを伝えることができたと 思う。

また、AFFrは複数のメッシュ形式への対応や、 結果ファイルについても複数の可視化ソフトの 形式へ対応してきたように、外部ツールとの親和 性も利点の一つとなるように開発されてきた。今 後、AFFrの多様な機能を多くのユーザーにとって 使いやすいものとするように、外部ツールとの連 成による機能追加を進めていく開発方針として、 反応・燃焼解析における機能や最適化ツールとの 連成に取り組んでいく予定である。

参考文献

- [1] "Paravie", http://paraview.org.
- [2] R. J. Kee, F. M. Rupley, J. A. Miller, M. E. Coltrin, J. F. Grcar, E. Meeks, H. K. Moffat, A. E. Lutz, G. Dixon-Lewis, M. D. Smooke, J. Warnatz, G. H. Evans, R. S. Larson, R. E. Mitchell, L. R. Petzold, W. C. Reynolds, M. Caracotsios, W. E. Stewart, P. Glarborg, C. Wang, and O. Adigun, "CHEMKIN Collection, Release 3.6",Reaction Design, Inc., San Diego, CA (2000).

[3] Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael

Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, William C. Gardiner, Jr., Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Qin," GRI-mech3.0",

http://www.me.berkeley.edu/gri_mech.

- [4] Lu, T., and Law, C. K., "On the applicability of directed relation graphs to the reduction of reaction mechanisms", Proc. Combust. Inst. 30: 1333-1341 (2005).
- [5] "pyMars", https://niemeyer-research-group. github.io/pyMARS/theory.html#references
- [6] David G. Goodwin, Harry K. Moffat, Ingmar Schoegl, Raymond L. Speth, and Bryan W. Weber. "Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes". https://www.cantera.org, 2022. Version 2.6.0. doi:10.5281/zenodo.6387882
- [7] Adams, B.M., Bohnhoff, W.J., Dalbey, K.R., Ebeida, M.S., Eddy, J.P., Eldred, M.S., Hooper, R.W., Hough, P.D., Hu, K.T., Jakeman, J.D., Khalil, M., Maupin, K.A., Monschke, J.A., Ridgway, E.M., Rushdi, A.A., Seidl, D.T., Stephens, J.A., Swiler, L.P., and Winokur, J.G., "Dakota, A Multilevel Parallel Object-Oriented Framework for Design Optimization, Parameter Estimation, Uncertainty Quantification, and Sensitivity Analysis: Version 6.15 User's Manual," Sandia Technical Report SAND2020-12495, November 2021.
- ※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、 アドバンスソフト株式会社 ホームページのシ ミュレーション図書館から、PDF ファイル(カ ラー版)がダウンロードできます。(ダウンロ ードしていただくには、アドバンス/シミュレ ーションフォーラム会員登録が必要です。)