

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red Ver.5

杉中 隆史* 大西 陽一* 塩谷 仁* 小川 哲司* 勝又 守* 中森 一郎*
西村 民男* 原田 昌紀* 桑原 匠史* 鈴木 雅也* 大島 小百合* 三橋 利玄**

Advance/FrontFlow/red Ver.5

Takafumi Suginaka*, Yoichi Onishi*, Hitoshi Shiotani*, Tetsuji Ogawa*,
Mamoru Katsumata*, Ichiro Nakamori*, Tamio Nishimura*, Masanori Harada*,
Takuhito Kuwabara*, Masaya Suzuki*, Sayuri Oshima* and Toshiharu Mitsuhashi**

Advance/FrontFlow/red Ver.5 はアドバンスソフト株式会社が開発した流体解析ソフトウェアである。われわれは Advance/FrontFlow/red を用いた解析を数多く手がけてきた。本項では、われわれの経験に基づき Advance/FrontFlow/red Ver.5 の解説を行う。

Key word: 3次元、熱流動、並列、AMG、DES、重合格子、前処理、省メモリ化

1. はじめに

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、速度、圧力、温度、燃焼、物質拡散、騒音、キャビテーション、微粒子などの3次元分布を予測・解析するソフトウェアである。このソフトウェアの概要を紹介する。

2. 開発の経緯

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、文部科学省による世界トップ水準のシミュレーションソフトウェアを作るプロジェクトで開発した FrontFlow/red を当社が改良・実用化したソフトウェアである。

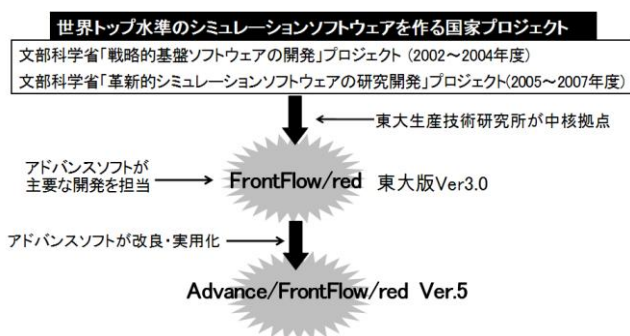


図 1 Advance/FrontFlow/red Ver.5 の開発経緯

*アドバンスソフト株式会社 技術第3部

3rd Technical Division, AdvanceSoft Corporation

**アドバンスソフト株式会社 第2事業部

Computational Science and Engineering Division II,

AdvanceSoft Corporation

3. 特長

Advance/FrontFlow/red Ver.5 の特長は、次の5つの項目である。

- ① 文部科学省による6年間のプロジェクトで開発した FrontFlow/red を実用化したソフトウェア
- ② お客さまが業務に活用できるように開発技術者がサポート
- ③ お客さまのニーズに合わせて改変する
- ④ ラージ・エディ・シミュレーション (LES) の解析実績
- ⑤ コストパフォーマンス・並列数によらない価格設定

4. 並列性能

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、大規模な並列計算を行うことができる。並列性能を確認するために、節点数 1,505,423 の車体（図2に示す Ahmed 車体モデル）周りの流動解析を、財団法人計算科学振興財団 FOCUS のスーパーコンピュータ（富士通製 BX922S6、1ノードあたり 12コア）を使用して、並列数 2、4、8、16、32、64、128 で行った。その結果を図3に示す。

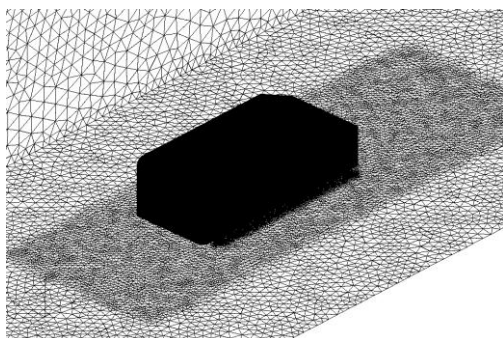


図 2 評価モデル (Ahmed 車体モデル)

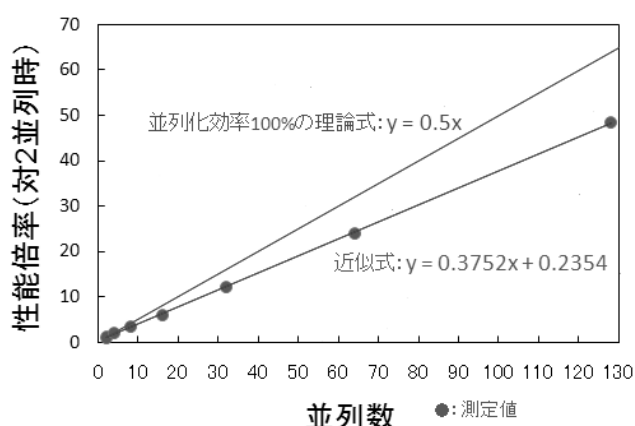


図 3 並列数 2 に対する性能倍率の測定結果

5. 機能一覧

Advance/FrontFlow/red Ver.5 の機能一覧を表 1 に示す。

表 1 Advance/FrontFlow/red Ver.5 の機能一覧

項目	機能
基礎式	・質量保存式 ・運動量保存式 ・エネルギー保存式 ・化学種の質量保存式
圧縮性	・非圧縮性流体 ・低 Mach 数近似による圧縮性 ・単一ガスの状態方程式による圧縮性 ・多成分ガスの状態方程式による圧縮性 ・実在ガスモデルによる圧縮性
乱流モデル	・なし (層流) ・渦粘性一定 ・RANS : 高レイノルズ数 $k-\epsilon$ モデル、低レイノルズ数型 $k-\epsilon$ モデル、RNG $k-\epsilon$ モデル、Chen $k-\epsilon$ モデル、

	・ $k-\omega$ モデル、SST モデル ・ LES : 標準 Smagorinsky モデル、Dynamic Smagorinsky モデル (Dynamic SGS モデル) ・ DNS ・ DES (RANS は SST モデルあるいは Spalart-Allmaras モデル)
境界条件	・流速 : 流入、流出、no-slip、free-slip、Spalding 則 ・温度 : Dirichlet、熱流束、熱伝達係数、Enhanced wall treatment による熱伝達係数 ・化学種質量分率 : Dirichlet、Neumann、物質伝達係数 ・RANS 変数 : Dirichlet、Neumann、壁法則
離散化	・有限体積法 ・節点中心法
流入変動風	・乱数による流入変動風 ・流入ドライバーによる流入変動風
メッシュ形状	・6面体 (ヘキサ)、4面体 (テトラ)、3角柱 (プリズム)、4角錐 (ピラミッド) およびこれらの併用
メッシュ機能	・スライディングメッシュ ・移動格子 ・不連続接合格子 ・重合格子
アルゴリズム	・SIMPLE 法 (定常計算) ・SIMPLEC 法 (非定常計算) ・Rhie-Chow 法による圧力補間法
時間積分法	・Euler 陽解法 ・Euler 陰解法 ・2次精度 Crank-Nicolson 法 ・2次精度 Adams-Bashforth 法 ・3次精度 Adams-Moulton 法 ・4次精度 Runge-Kutta 陽解法
移流項スキーム	・1次精度風上差分 ・2次精度風上差分 ・2次精度風上差分+リミタ (TVD 法) ・2次精度中心差分 ・3次精度風上差分+リミタ (TVD 法) ・2次精度中心差分と1次精度風上差分のブレンド
行列解法	・ICCG 法 ・BiCGSTAB 法 ・AMG 法

熱連成	・流体－固体の熱連成 ・固体内部に複数の材質
輻射	・有限体積法(壁面放射特性の波長依存) ・ゾーン法 ・モンテカルロ法
多孔質	・べき乗則 ・Darcy 則
流体音	・Lighthill-Curl モデル ・Ffowcs Williams and Hawking モデル
移動格子	・回転移動格子 ・並進移動格子
キャビテーション	・均質流モデル
自由表面	・VOF 法 (RANS と併用)、CICSAM 法
粒子追跡	・固体粒子と流体の二相流 ・液滴とガスの二相流 (オイラー・ラグランジアン 2way)
表面反応	・素反応 ・Sticking 吸着モデル ・LHER 表面総括反応モデル ・Bohm プラズマモデル ・マルチサイト (保存・非保存則アルゴリズム) ・マルチ反応メカニズム ・マルチバルク成長
気相反応	・総括反応モデル (スス生成含む) ・渦消散モデル ・素反応 (逆反応、三体反応、圧力依存、ユーザー定義) ・flamelet モデル
素反応ソルバー	・Operator Splitting Method ・ODE ソルバー
並列計算	・自動領域分割 (Linux 版で対応) ・並列数を変えたリスタート (省メモリ化)
前処理	・省メモリ化 ・高速化
ユーザーサブルーチン	・初期値(流体と粒子) ・境界条件 ・質量のソース項 ・運動量のソース項 ・エネルギーのソース項 ・蒸発速度 ・気相反応 ・表面反応 ・移動格子

	・輸送係数 ・実在ガスモデルのパラメータ設定 ・輻射特性 ・ポスト処理
容量制限	・ソフト側に制限なし

6. Ver.5 で改良した項目

Advance/FrontFlow/red Ver.5 で改良した点は次の項目である。

- ① 計算速度の向上
 - ・AMG 法の複数マテリアル対応
 - ・前処理の高速化
 - ・固体熱伝導と流体熱流動の連成計算の高速化
- ② 解析機能の高度化
 - ・DES (LES と RANS のハイブリッド) の導入
 - ・重合格子法の導入
 - ・マルチフレーム機能の導入 (回転系の定常解析)
 - ・壁面放射特性の波長依存性に対応
- ③ その他
 - ・前処理の省メモリ化
 - ・統計処理の省メモリ化
 - ・自然流出境界条件の改良
 - ・計算格子の自動細分割化
 - ・セル数、節点数の入力が不要
 - ・境界面の判定を頂点ベースから面ベースへ
 - ・壁面第 1 層の CV 中心が壁の外側へはみ出した時の対処
 - ・領域分割時にエラーが出ないように修正
 - ・壁までの距離の計算方法の改良
 - ・物質と熱収支の出力
 - ・逆流時の警告
 - ・並列数を変えたリスタート計算機能の省メモリ化
 - ・スライディング格子機能の改良
 - ・周期境界条件における角度方向速度の取り扱いの修正
 - ・複数マテリアルを使用した計算で圧力固定の取り扱いの修正

次の章で改良項目の幾つかを説明する。

7. AMG 法の複数マテリアル対応

AMG は algebraic multigrid methods の略で、代数的マルチグリッド法と呼ばれる。AMG は圧力ポアソン方程式、運動量保存式、エネルギー保存式、化学種の質量保存式などの離散化方程式を解くときに、計算格子を間引いた幾つかの仮想格子を作成して、それらの格子で計算を交互に行い、データ交換することによって全体の計算速度を速くする方法である。Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、複数マテリアルに対して、AMG を使用できるようにした。ここで、複数マテリアルとは次のようなものを意味する。

- ① 固体と流体
- ② 材質の異なる複数の固体
- ③ 流入ドライバー（流入境界条件を作る方法）の計算領域とメインの計算領域
- ④ 多孔質がある計算領域とない計算領域
- ⑤ 不連続接合させた 2 つの計算領域
- ⑥ 回転座標系と静止座標系

8. DES (LES と RANS のハイブリッド) の導入

LES では壁面を扱う方法として次のようなものがある。

- ① 壁面境界条件として no-slip を使用する方法
- ② 壁面境界条件として Spalding 則（乱流域では対数則と同等）を使用する方法
- ③ 壁面近傍を RANS（レイノルズ平均モデル）で計算する方法（DES）

①は、壁面から第 1 格子点の y^+ が $y^+ < 11.63$ の範囲に入るように、境界層の粘性底層までメッシュを分割して内層領域の運動を直接計算する場合に使用する方法である。Chapman(1979)によると計算格子数は $Re^{1.8}$ のオーダーであり、 $Re=10^6$ の流れでは、格子数は 6×10^{10} になる。そのため現状の計算機では実用問題に適用することは困難である。

②は、境界層内の流動を直接解かない方法であり、壁近傍のメッシュサイズを粗くして、壁面から第 1 格子点は壁法則を使って代数式で評価する方法である。

③は、DES (detached eddy simulation) と呼ばれ、壁面近傍は RANS の輸送方程式を解いて直接計算する方法である。当社では、この RANS として SA モデルより低レイノルズ数型 SST モデルを使用した方が良い結果が得られた実績がある。

9. 重合格子法の導入

重合格子法は、異なる格子系を重ね合わせて、格子が重なる部分でデータ交換しながら計算する方法である。複雑な形状や相対移動がある問題に適している。

Advance/FrontFlow/red Ver.5 で行った簡単な解析事例を以下に示す。

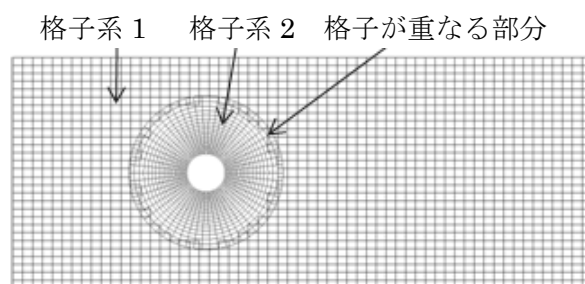


図 4 重合格子

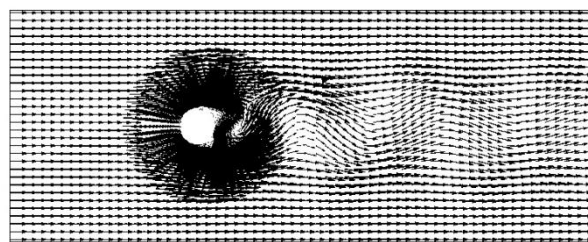


図 5 重合格子による速度分布の計算結果



図 6 重合格子による圧力分布の計算結果

10. 壁面放射特性の波長依存性に対応

壁面における放射率、反射率、透過率という放射特性は、電磁波の波長によって異なる。

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、これらの壁面放射特性に、波長による特性を考慮できるようにした。その解析方法を以下に示す。

① 電磁波を複数の波長帯（バンド）に離散化

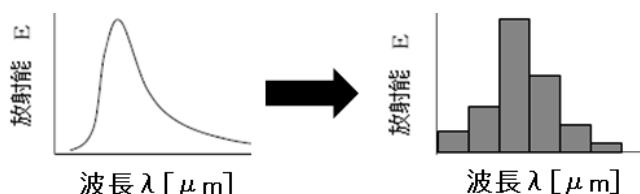


図7 波長帯への離散化

② 離散化した波長帯の放射特性を壁面に定義

③ 離散化した波長帯の放射熱伝達を計算

11. 前処理の省メモリ化

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、前処理において、metis による領域分割時のメモリ使用量を削減して、1 ノードだけ多くのメモリを搭載する必要がなくなった。以下に約 325 万 節点の計算モデルにおいて、Advance/FrontFlow/red Ver5 が Ver.4.1 から使用メモリ(最大値) をどれだけ削減できたかを示す。

表2 1CPU で計算する場合の前処理での使用メモリ（最大値）

ver 4.1	ver 5.0
約 6.1 GB	約 2.0 GB

表3 8CPU で計算する場合の前処理での使用メモリ（最大値）

ver 4.1	ver 5.0
約 6.4 GB	約 0.79 GB

表4 32CPU で計算する場合の前処理での使用メモリ（最大値）

ver 4.1	ver 5.0
約 6.4 GB	約 0.76 GB

12. 計算格子の自動細分割化

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、格子ファイルを細分するプログラム rcapRefiner を使用することによって、計算格子を自動的に細分化することが可能になった。以下のコマンドを実行するだけで、セル要素が 8 倍に、面要素が 4 倍に細分化される。例えば 100 万要素は 800 万要素になる。

```
rcapRefiner -r mesh1 mesh2
```

ここで、mesh1 は既存のメッシュファイルで、mesh2 は新たに作成されるメッシュファイルである。続けて

```
rcapRefiner -r mesh2 mesh3
```

このようにコマンドを実行すれば、既存のメッシュファイル mesh2 のセル要素が 8 倍に細分化されて、メッシュファイル mesh3 が新たに作成される。

13. セル数、節点数の入力が不要

Advance/FrontFlow/red Ver4.1 は、コントロールファイルの中で配列のサイズを指定する必要があった。そのため、境界面の名前が同じでも、メッシュ数を変えるたびに、&sizes 変数群の中で、節点数と要素数を再度設定しなければならないわずらわしさがあった。また、前処理を実行する際に配列が小さいというエラーを避けるために、必要以上に大きなサイズを指定すると、メモリ使用量が多くなる問題点があった。

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、コントロールファイルの中で配列のサイズを指定する必要がなくなり、自動的に配列サイズが設定できるようになった。さらに、必要のない配列を用いないようにチ

ューニングが行われた。

14. 境界面の判定を頂点ベースから面ベースへ

Advance/FrontFlow/red Ver4.1 は、面がどの境界条件に属するかを、頂点で判定していた。そのため図 8 の例では、境界条件 B を与えたい面に境界条件 A が与えられる可能性があり、それに伴いエラーが生じることがあった。

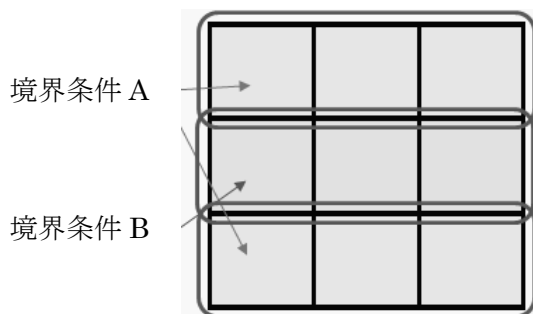


図 8 頂点ベースから面ベースへ変更

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、面がどの境界条件に属するかを、メッシュファイルの境界面情報で判定するように変更した。その結果、誤認識によるエラーが生じないようにになった。

15. 壁面第 1 格子点のコントロールボリューム中心が壁の外側へはみ出した時の対処

Advance/FrontFlow/red Ver4.1 は、グリッドによっては、コントロールボリューム中心から壁面へ向かうベクトルと壁面上の法線ベクトル（壁内部に向かう方向を正にしている）が逆向き（内積が負）になることがあり、これに伴って不具合が生じることがあった。

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、この内積が負にならないように対処して、これに伴う不具合が生じないようにになった。

コントロールボリュームの境界面

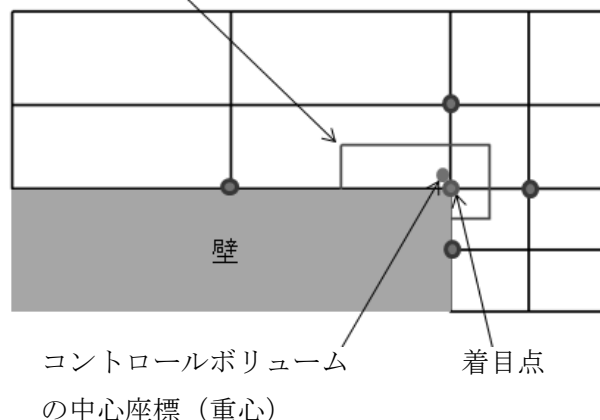


図 9 壁面第 1 格子点の改善

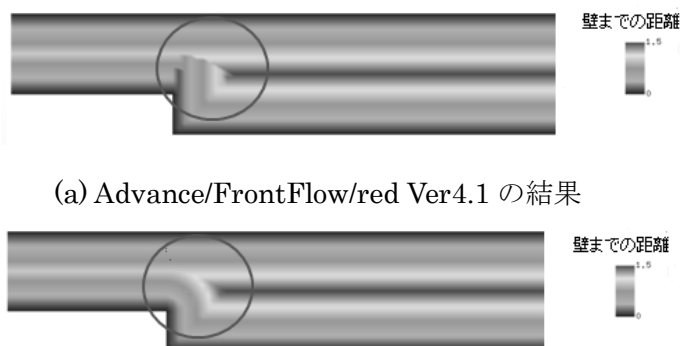
16. 領域分割時にエラーが出ないように修正

Advance/FrontFlow/red Ver4.1 は、領域分割時に、周期境界条件・インターフェイス条件の相手節点・面の存在確認の際に前処理プログラムがエラー終了することがあった。

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、領域分割時の領域間オーバーラップ部分に周期境界条件・インターフェイス条件で相手の節点と面を必ず含めるように修正して、相手がいないというエラーが生じないようにになった。

17. 壁までの距離の計算方法の改良

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、固体コーナー部における壁までの距離計算方法を改良した。この例を以下に示す。



(a) Advance/FrontFlow/red Ver4.1 の結果

(b) Advance/FrontFlow/red Ver.5 の結果

図 10 壁面までの距離の計算値

18. 逆流時の警告

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、流出境界から逆流が生じた場合に警告のメッセージを log に出力するようにした。

```
=====
| TIME STEP : 1 SCALAR NONE MPI: 2 openMP: 1 FLOW TYPE: 1
| TIME : 0.1000E-02 TIME INTERVAL: 0.1000E-02 MAX_CV_COURENT: 0.2235E+03 AT VERTEX : 113
|-----
| Velocity Field : U V W P T K EPS COMP_1
|-----
| MIN : 0.1841E-04 -0.3370E-04 -0.1822E-05 0.1013E+06 0.2731E+03 0.9999E-07 0.1000E-07 0.1000E+01
| MAX : -0.8178E-03 -0.5351E-02 -0.4691E-02 0.1013E+06 0.2731E+03 0.7781E-07 0.1000E-07 0.1000E+01
|-----
| OUTER-ITER NO. : 10 ALL COMP
|-----
| CG/ICCG :
| ITER : 1 1 1 2 0 1 1 0
| RES : 0.1000E-07 0.1000E-07 0.1000E-07 0.5715E-05 0.0000E+00 0.1000E-07 0.1000E-07 0.0000E+00
| ABS : 0.1000E-07 0.1000E-07 0.1000E-07 0.1000E-07 0.0000E+00 0.1000E-07 0.1000E-07 0.0000E+00
|-----
| OUTER-ITER ERROR : CONVERGENCE TOLERANCE : 0.1000E-03
| WARNING: OUTER-ITER GREAT THAN USER DEFINED
| ERR : 0.2392E-01 0.1046E-01 0.1259E-01 0.3034E-03 0.0000E+00 0.1353E-04 0.2597E-02 0.0000E+00
|-----
| STEADY FLOW ERROR : CONVERGENCE TOLERANCE : 0.1000E-03
| ERR : 0.1000E+01 0.1000E+01 0.1000E+01 0.0000E+00 0.8814E+00 0.9792E+00 0.0000E+00
|-----
| CAUTION! Inverse flow is occurring in outlet boundary. Boundary number= 6
|=====
```

↑
逆流の警告

図 11 逆流時の警告

19. 並列数を変えたリスタート計算機能の省メモリ化

Advance/FrontFlow/red Ver.4.1 は、並列数を変えたリスタート計算を行う時に、全てのリスタートファイルの情報を root の CPU に読み込んでから、次の全 CPU に broadcast する方法で行った。そのため多くのメモリを使用していた。

Advance/FrontFlow/red Ver.5 は、並列数を変えたリスタート計算を行う時に、リスタートファイルの情報を部分的に読みながら broadcast して、ローカル変数への割り当て終了したら配列を deallocate する処理を繰り返し行うようにした。その結果、メモリ使用量を削減することができた。

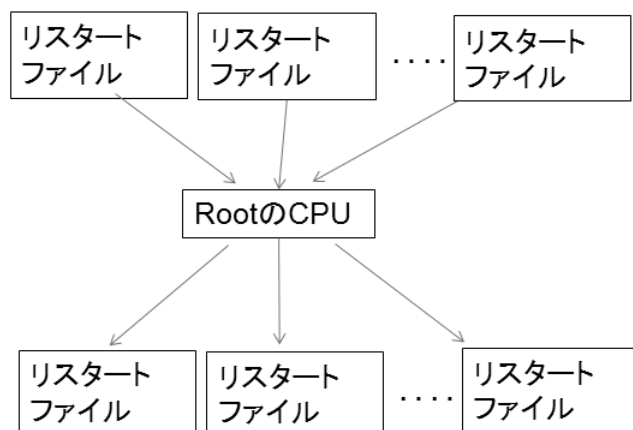


図 12 並列数を変えたリスタート計算機能

20. おわりに

当社は、文部科学省によるプロジェクト終了後も Advance/FrontFlow/red を世界トップ水準の実用的シミュレーションソフトウェアにすべく精力的に改良を続けてきた。今後もお客さまの業務に確実に活用できるよう改良を重ねていく所存である。

参考文献

- [1] 文部科学省「戦略的基盤ソフトウェアの開発」
<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/fsis/index.html>
- [2] 杉中 隆史, 大西 陽一, 塩谷 仁, 平川 香林, 小川 哲司, 大友 洋, 徳永 健一, 中森 一郎, 小池 秀耀, “流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red の使い方”, アドバンスソフト出版事業部(2011)
- [3] 杉中 隆史, 大西 陽一, 塩谷 仁, 平川 香林, 小川 哲司, 大友 洋, 徳永 健一, 佐藤 昌宏, 中森 一郎, “Advance/FrontFlow/red Ver.4.1 の概要と特長”, アドバンスシミュレーション, Vol.2, (2010)
- [4] D.R.Chapman, “Computational aerodynamics development and outlook”, AIAA J., 17(1979), 1293.