

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red GUIを使ったCFD解析

大野 修平*

CFD Simulation Using the Advance/FrontFlow/red GUI

Shuhei Oono*

本稿では昨年リリースされたばかりで、現在も開発が進行中の Advance/FrontFlow/red GUI のデザインと特徴を焦点に紹介する。この GUI が CFD ソルバーとの統合をどう強化し、ワークフロープロセスをどう合理化するかを詳述する。さらに、近日中にリリース予定の新バージョン (v1.1) で導入される新機能や、今後のバージョンアップで計画されている機能拡張と開発方針についても紹介する。

Key word: 流体解析、GUI、化学反応スキーム、Flamelt モデル

1. はじめに

Advance/FrontFlow/red (AFFr) は、LES による大規模な 3 次元流体解析をメインターゲットに開発された流体シミュレーションソフトウェアである。このソフトウェアは、熱流体の基本的な現象から燃焼・化学反応、気液二相流、キャビテーション、非ニュートン流体や電磁流体などの複雑な流体現象、さらには輻射、液滴・粒子、流体騒音といった副次的な現象までを扱える広範な機能を持っている。しかし、多岐にわたる機能により設定項目が膨大になり、条件設定が困難になることがある。この課題に対応するために、AFFr の使い勝手と機能性を向上させる専用 GUI が特別に設計された。この GUI はユーザーフレンドリーな設計に焦点を当て、流体シミュレーションのセットアップ、実行、分析を簡素化することを目的としている。GUI の使用により、初心者から経験豊富なユーザーまでが、より簡単かつ正確に複雑な流体シミュレーションを実行できるようになる。

2. デザインと操作性

2.1. 設定項目の最適化

GUI でメインとなる設定入力画面のデザインは図 1 のようになっている。画面左側は必要項目の入力領域となっており、設定項目は大分類ごとにタブが割り当てられている。画面右側の領域では解析対象のメッシュ形状が表示され、選択された境界面およびメッシュ領域がハイライト表示されるようになっている。メッシュデータには領域や境界面が無数に含まれることが多くあり、このような場合に現在選択中の境界面はメッシュ場でどの位置に対応するか把握するのに役立つ。

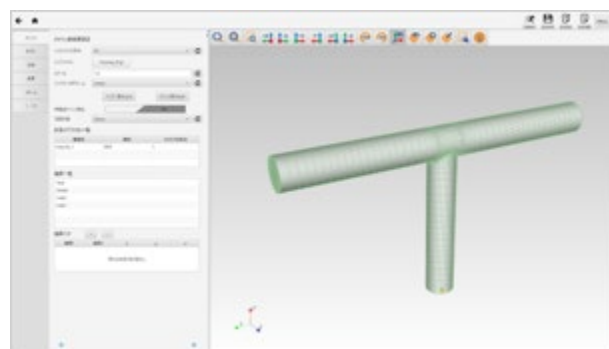


図 1 AFFrGUI のメイン画面

AFFr は多岐にわたる解析用途に対応するため膨大な設定項目を持つが、AFFr GUI では実際に必要とされる変更項目を限定し、不要な入力を削除する方針で設計されている。新規計算の開始時には、基

*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

本設定や追加モデルの設定を含むダイアログが表示され、これにより解析内容の概要が決定される。設定画面のページ数(タブ数)はこのダイアログの選択内容に応じて変わり、トグルボタンやチェックボックスの選択により入力項目がリアルタイムで更新される。エラーの発生可能性がある項目は赤色で、重要だがエラーを引き起こさない項目は黄色でハイライトされる。

2.2. ソルバーとの連携

AFFr は、プログラムの動作を指定する計算制御ファイル(fflow.ctl)を使用する。このファイルは Fortran の namelist 形式で記述され、AFFr GUI は設定画面でユーザーが入力した内容をこの形式で fflow.ctl というファイル名で出力する。また、すでに作成済みの fflow.ctl ファイルを読み込んでその内容を GUI の設定画面に取り込み、必要な箇所だけ変更するという使い方もできる。この fflow.ctl を使用して前処理の実行、ソルバーの操作、結果の変換と可視化までの一連の操作を GUI 内で完結することができる。

2.3. 機能性

AFFr GUI は、ソルバーをローカルのワークステーションで起動するか、SSH 通信を介して接続されたリモートコンピュータで実行することが可能である。流体計算は計算負荷が高いため、多くの場合、専用の計算ノードで行われる。ユーザーは、GUI から直接計算の実行場所と実行時のスクリプトを指定し、雛形から必要に応じて変更が可能である。さらに、リモート計算機場での計算リソースがジョブスケジューラーによって管理されている場合でも、AFFr GUI は基本的なジョブスケジューラー用のバッチスクリプトの雛形とコマンドを提供し、これによりローカルでの計算実行と同様の手順で使用できる。加えて、AFFr GUI には各計算機場で現在実行されているジョブを表示する機能も備えており、これによりユーザーは計算進行の状況をリアルタイムで把握することができ、効率的に計算タスクを管理し実行することが可能になる。

このように、AFFr GUI の設計は単にユーザーインターフェースの改善に留まらず、ユーザーの作業効率を高め、解析作業全体の合理化に活用されるものとなることを目指している。

3. 新機能の紹介

本節では近日リリース予定の AFFrGUI バージョン 1.1 で導入される新機能について紹介する。

3.1. 化学反応メカニズムの自動設定

燃焼反応をはじめとした実際の化学反応では、反応物が生成物に変化する過程で中間生成物や連鎖反応が存在し、多数の化学反応(素反応)が同時進行している。素反応過程で考慮する必要のある化学反応式は多い場合で数百から千以上までおよぶことがあり、それら化学反応式を設定ファイルに書き込むことは非常に煩雑な作業である。このような問題に対処するため AFFr の次期リリースでは、化学反応式以外の部分について入力済みの設定ファイル(fflow.ctl)へ、化学反応関連の部分を化学反応スキームデータから読み込み書き足す(換える)機能(reacConv)が導入予定である。

reacConv を実行するには、化学反応関連の設定を書き加えるための少々の入力パラメーターがあり、Json 形式の専用の設定ファイルに記入して実行プログラムへ読み込ませる。設定項目には、参照する化学反応スキームデータ(化学反応式、化学種ごとの熱物性・輸送係数)の指定に加え、流入境界における、燃料の組成、空気(酸化剤)の組成、等量比、流量および流入量の指定、初期条件(温度、圧力、化学種組成)なども与えることができ、それらも設定ファイルに自動的に反映される。化学反応データのフォーマットは、オープンソースソフトウェアである Cantera[2]で利用されている yaml 形式に従ったものを採用する。GUI にもこの機能は統合され、化学反応設定ページ(タブ)から化学反応自動設定ボタンを押すと、reacConv 用の設定画面の小画面開き、入力データ、流入ガス、初期条件などに関する項目を入力すると化学反応スキームデータの内容が設定項目へ反映され

る。GUIの化学反応ページでは、一覧リストから選択することで化学反応式および化学種の各々に関して内容を編集することが可能で、入力データ(yamlファイル)の特定の項目を調整したい場合も容易に編集することが可能である。

3.2. フレームレット関数の自動作成

Flameletモデルでは流れの中での燃焼反応を解く代わりに、Flamelet概念と呼ばれる火炎構造の普遍性を仮定し、火炎面の輸送方程式を解き火炎内部の詳細構造については予めテスト系で用意したFlameletテーブルデータを用いて燃焼場を再現する手法で、化学反応に関する計算負荷が小さくなる複雑な火炎の挙動に計算リソースを当てることができる。

Flameletモデル解析では、火炎の現象により扱われる輸送方程式の自由度やその特徴量に変化する。燃料と酸化剤が会ってすぐに反応する拡散燃焼では、火炎面は0から1の値で燃料と酸化剤の混ざり具合を表す混合分率 ξ に関する輸送方程式が解かれる。火炎構造の再現には、 ξ - T (温度)および ξ - ρ (密度)のテーブルが必要となる。一方、燃料と酸化剤が会ってから反応が進むまでに時間差が生じる予混合燃焼では、火炎面の位置を表す G とその混合分率 ξ に関する輸送方程式が解かれる。火炎面の再現には、層流燃焼速度 S_L 、温度 T 、密度 ρ のテーブルに加え、層流燃焼速度 S_L のデータが必要となる。

3.3. Flameletモデルの解析手順

AFFrでは、Flameletデータは最大22次の多項式係数によって与えられ、滑らかにつながるように区間ごとに多項式を与えることも可能となっている(2次元以上の自由度に対するテーブルデータにも対応するため、追加のFlameletデータ指定方法も準備中)。多項式の係数は参照したいデータから、最小二乗法などで多項式フィッティングを行うことで得られる。

参照データの作成は、Canteraのような燃焼シミュレーションツールを用いて作成することができる。ここでは、無償であること、機能の広範さとコ

ミュニティの大きさ、APIの充実などの理由からCantera[2]の利用を推奨している。Canteraでは、化学反応式、化学反応式に現れる化学種の熱物性、輸送係数などのデータをyaml形式の入力ファイルで与え、入力データに0次元・1次元での燃焼シミュレーションを行うことができる。

拡散燃焼におけるFlameletデータの作成には、燃料と酸化剤を逆向きに流して反応させる1次元対抗流の定常解析を行い、火炎面近傍の温度、密度および化学種組成の分布から、混合分率に関するテーブルデータが得られる。予混合燃焼のFlameletデータは、混合分率に対する層流燃焼速度のデータが必要で、流入気の酸化剤と燃料の比率を変えながら1次元予混合燃焼の定常解析を行い層流燃焼速度を求めていくことで、混合分率に対する層流燃焼速度のFlameletデータが得られる。

しかしながら、これらFlameletデータの作成にはCanteraなどのツールを使ったとしても、1次元燃焼解析への習熟が必要で、本計算を行うまでの障壁となっている。また、多項式フィッティングを行うのも少々煩雑である。

次期バージョンのAFFrでは、Flameletデータの作成や多項式フィッティングといった複雑で煩わしい作業を自動的に行ってくれるプログラムをリリース予定である。このプログラムは、反応式、反応スキームに現れる化学種の熱物性および輸送係数のデータ(yaml形式ファイル)を与え、燃料と酸化剤の組成など必要最低限の項目を与えることで実行できるものとなっている。さらに、このプログラムをAFFrGUIに統合し、GUIから必要項目を入力しボタンを押すだけで、自動的にこれまで煩雑だった設定が一通り入力されるようになる。

3.4. プローブデータの逐次出力

AFFrには、ソルバー実行時に指定したプローブ点における各種物理量、音響データ、および指定した境界面における流体力の積分値や揚力・抗力係数などの値をタイムステップごとに出力する機能がある。新バージョンのGUIでは、これらの時系列データを計算進捗に合わせて逐次グラフ表示する機

能が加わる。

この機能により、着目するデータの時間変化が監視可能になり、予期せぬ変化を特定して対処し、理論的予測をその場で確認することが可能になる。またプローブデータを png 画像や csv データとして出力することも可能で、報告書などに必要な情報を用意するのに便利である。

3.5. ユーザーサブルーチンの利用

AFFr には初期値・境界条件や輸送方程式のソース項、物性値などに対して、Fortran のプログラミングからより高度な設定を行うためのユーザー定義サブルーチンという機能がある。ユーザー定義サブルーチンは用途ごとに対象となる Fortran サブルーチンが存在し、いくつかのソースファイルに分かれている。

ユーザー定義サブルーチンを利用する際は、計算フォルダへユーザー定義サブルーチンの雛形を一式コピーし、対象となるソースファイルへ必要なプログラミングを加えた後、ソースファイルをコンパイル・再リンクし、内容を更新したソルバー実行ファイル(fflowS、fflowHPC)を生成する。ユーザー定義サブルーチンへプログラミングした内容をソルバーへ反映させるためには、ソルバー実行ファイルの指定をインストールの bin ディレクトリ下にあるものではなく、この新たに生成された実行ファイルを指定しなければならない。

ユーザー定義サブルーチンの使用にはこのように、対象ファイルの再コンパイル、ソルバー実行ファイルの指定の切り替えなど、プログラミングに不慣れたユーザーにとっては扱いに支障を感じられる点が多くある。新たにリリースされる AFFr GUI では、このようなユーザー定義サブルーチンの使用に必要な操作を一通り GUI から離れることなく実行できるように操作の自動化を行う予定である。ユーザー定義サブルーチンのソースファイルでのプログラムに関して、ユーザー定義サブルーチンの使用を有効にする箇所(用途により至る所に存在する)の前後に関連するソースファイルの編集ボタンを設け、その場に応じてまたは、実行前の段階でソ

ースファイルの編集が可能となる。その他、再コンパイル、ソルバー実行ファイルの切り替えなどは GUI が必要に応じて自動的に処理を行い、ユーザーはユーザー定義サブルーチンの使用と使用されるユーザー定義サブルーチンのソースコードの編集のみを行うだけで良くなる。

4. 今後導入予定の機能

本節では、今後追加予定の機能について紹介する。

4.1. 解析フローの制御

AFFr は明示した支配方程式に従い、ユーザーに指定されたパラメーターの値にしたがって素直に計算を進めていくよう設計されており、計算の発散を防ぐためにユーザーが意識せずに行われるような処理が暗に行われることはない。そのため、解析対象となる物理的な条件が決まっていたとしても、安定に計算が回るようになる条件を見いだすのが困難であり、その点に使いづらさを訴えるユーザーの声も挙がっていた。

計算の安定性をはじめ、影響の大きく影響する項目を特定し、ユーザーが意図するような計算設定を与えることは、再現性や解析の発展、現象の理解に大きく寄与するものと思われる。

この先のリリースでは、AFFr GUI から AFFr を実行した際の作業ディレクトリである、Calculation ディレクトリの構成を見直すことを予定している。安定に計算が回るように設定変数の編集・計算実行・エラー内容の確認といった作業を繰り返す場合など、解析対象(物理的な条件)は一緒であっても試行錯誤するような場合は、可能であればどのような試行錯誤を行いその結果どのようなエラーが発生したかを後から見直しやすい形で整理しながら進めることで、次の試行ではどのような点を見直すべきかが明白となる(図 2)。

新しいファイル構成では、一回一回の計算実行は一つの思考として、Calculation ディレクトリより一つ階層が下のディレクトリに必要な内容が保存される。保存対象には、容量の大きいバイナリファイルは必要最低限(終了ステップのリスタート関係フ

ファイル)に留め、容量の小さい計算制御ファイル、ログファイル、ユーザーサブルーチンソースファイル(書き換えられたものだけ)を一括保存する。基本的には新たな試行は直前の試行に基づいて変更が加えられるが、それよりも前にベースとして選びたいものがあれば、そこから変更を加えることも可能となる。

新たに加わる試行とそれまでに行った試行の差分をとって整理することで、バージョン管理ツールの git[3]のような機能を与えることが可能となる。一つには、それぞれの試行がどの試行からどのような差分をとったもので、どのような結果になったかという情報をグラフ表示して一目でわかるようにすることが考えられる。

設定画面場で、前回(または比較対象)の試行との差分をハイライト表示するなど、これまでの試行における設定内容を候補として提案することなども考えられる。

また差分情報として出力・共有することで、狙い通りの設定が得られずうまくいかないか不具合が考えられる場合に、その内容を直接 Advancessoft の FFR サポートセンターへ送付することで問い合わせに対してスムーズな対応に回答が得られるようになることが期待される。さらには、最近利用が盛んに進められているチャットボット機能と連携して、解決策を自動的に見いだすことなどにもつながることが期待される。

また Calculation ディレクトリ内では、条件に対する最適な設定の試行錯誤だけでなく、物理条件、形状の設計またはモデルパラメーターなどに対する最適化の探索も同様に行うことができるようになることを目指している。特に、近年活発に活用され始めている機械学習やモデルベースなどでは、前段階として数値シミュレーションによる解析結果を元に代理モデルが用意されることが多く、そのような代理モデルを効率よく作成するためには実験計画的な最適化手法が用意されており、OSS の外部ツールと連携して AFFr GUI の中で使いやすい形で取り入れることを予定している。

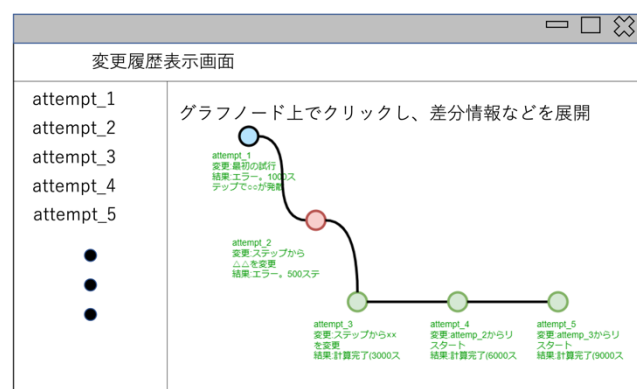


図 2 試行過程のグラフ表示 (イメージ)

4.2. メッシュ生成・調整

AFFr では主要な他社 CFD ソルバーとの併用のしやすさなども考慮し、CGNS[4]など標準的な形式に加え複数のメッシュ形式の読み込みへ対応している。しかし弊社の製品ラインナップの中に CFD 専用メッシュ生成ツールは含まれておらず、初めて CFD ソフトを導入するユーザーや、すでにあるメッシュに細かい調整を加えるなどという用途において課題がある。

現在弊社では、全体構造は存在した上での部分的な修正や、形状の追加・結合に関する技術の開発、また STL 形式[5]のような形状データからメッシュを生成する技術を開発中であり、現在 AFFr GUI にある形状表示画面を用いながらのメッシュ生成、調整、確認といった作業を統合して行えるようにすることも目指している。

5. まとめ

この記事を通じて、Advance/FrontFlow/red GUI の設計と機能性について詳しく見てきた。AFFr GUI は、AFFr を用いた流体解析およびその過程で使用する外部プログラムを用いた解析作業の全体を簡素化し、ユーザーが直面する課題に対処することを目指して設計されている。

次期リリースでの新機能は、GUI の機能性をさらに向上させ、特に化学反応メカニズムの自動設定や Flamelet モデルの自動作成などは、これまで複雑さ故にあまり使用されてこなかったもので、AFFr が本来持っている機能をより多くのユーザーに利用

されるのに寄与する。

今後予定されている機能拡張についても、ユーザーの作業効率をさらに高めることを目指しており、解析作業全体の合理化に活用されるものとなることが期待される。技術の向上に努め、AFFr GUI の機能を拡張していく所存である。

参考文献

- [1] アドバンスシミュレーション 2023.6 Vol30
「Advance/FrontFlow/red GUI の紹介」
- [2] D. G. Goodwin, H. K. Moffat, and R. L. Speth,
Cantera: An Open-Source, Extensible Software Suite for CFD, Combustion, and Reacting Flow Problems", <https://cantera.org>
- [3] S. Chacon and B. Straub, "Pro Git," 2nd ed., Apress, 2014.
- [4] "CFD General Notation System (CGNS)", <http://www.cgns.org>
- [5] "STL File Format: Stereolithography Interface Specification," 3D Systems: <https://www.3dsystems.com>

※ 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。）