

# 流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/redの概要と計算事例

大西 陽一\* 小川 哲司\* 大野 修平\* 李 佳智\* 出浦 智之\* 福島 裕馬\*

## Overview of Advance/FrontFlow/red and Examples of Calculation

Yoichi Onishi\*, Tetsuji Ogawa\*, Shuhei Oono\*, Li jiazhi\*, Tomoyuki Deura\* and Yuichi Fukushima\*

アドバンスソフト株式会社では、文部科学省の国家プロジェクトで開発された3次元流体解析ソフトウェア FrontFlow/red をベースに商用化した Advance/FrontFlow/red を発展させてきて、2023 年に Ver. 5.7 をリリースした。本稿では、Advance/FrontFlow/red Ver. 5.7 で追加された機能と適用事例について紹介する。

Key word: 数値流体解析、スーパーコンピューター、並列計算、混相流、燃焼流、複雑形状

### 1. はじめに

計算機の性能や解析技術の向上により、流体分野においても詳細なメカニズムの解明や、複雑な現象への適用などが求められつつある。

Advance/FrontFlow/red（以下 AFFr）は LES、大規模解析をキーワードに非定常な乱流現象を精度よく解くことを目指して開発が進められてきたが、産業界においては、熱流体解析は、燃焼、輻射、騒音との連成、噴霧や自由界面、キャビテーションなど二相流問題、さらには、構造物の変形を考慮した連成問題など多種多様な課題があり、これらの現象を総合的に解くことが必要となってきた。

アドバンスソフトでは、開発当初のコンセプトを踏襲しつつ、計算速度、安定性、使い勝手のよさなど基本機能を強化し、さらに、上記の多様な問題に適用しうる流体解析ソフトウェアとして、AFFr の開発を進めている。

本稿では、AFFr の機能概要と解析事例について紹介する。

表 1 AFFr の機能

| 項目    | 機能                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 基礎式   | <ul style="list-style-type: none"><li>・質量保存式</li><li>・運動量保存式</li><li>・エネルギー保存式</li><li>・化学種の質量保存式</li></ul>                                                                                                                                                                                                                                                 |
| 圧縮性   | <ul style="list-style-type: none"><li>・非圧縮性流体</li><li>・低 Mach 数近似による圧縮性</li><li>・単一ガスの状態方程式による圧縮性</li><li>・多成分ガスの状態方程式による圧縮性</li><li>・実在ガスモデルによる圧縮性</li></ul>                                                                                                                                                                                               |
| 乱流モデル | <ul style="list-style-type: none"><li>・なし（層流）</li><li>・渦粘性一定</li><li>・RANS : 高レイノルズ数 <math>k-\epsilon</math> モデル、低レイノルズ数型 <math>k-\epsilon</math> モデル、RNG <math>k-\epsilon</math> モデル、Chen <math>k-\epsilon</math> モデル、<math>k-\omega</math> モデル、SST モデル</li><li>・LES : 標準 Smagorinsky モデル、Dynamic Smagorinsky モデル (Dynamic SGS モデル)</li><li>・DNS</li></ul> |
| 境界条件  | <ul style="list-style-type: none"><li>・流速 : 流入、流出、no-slip、free-slip、Spalding 則</li><li>・温度 : Dirichlet、熱流束、熱伝達係数、Enhanced wall treatment による熱伝達係数</li><li>・化学種質量分率 : Dirichlet、Neumann、物質伝達係数</li><li>・RANS 変数 : Dirichlet、Neumann、壁法則</li></ul>                                                                                                            |

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

| 項目          | 機能                                                                                                                                                                                                                  |
|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 物性値         | <ul style="list-style-type: none"> <li>・一定値</li> <li>・簡略化モデル</li> <li>・Sutherland の式</li> <li>・Chapman-Enskog の式</li> <li>・物性値テーブル機能</li> </ul>                                                                     |
| 離散化         | ・有限体積法                                                                                                                                                                                                              |
| コントロールボリューム | <ul style="list-style-type: none"> <li>・節点中心法</li> <li>・セル中心法</li> </ul>                                                                                                                                            |
| 流入変動風       | <ul style="list-style-type: none"> <li>・乱数による流入変動風</li> <li>・流入ドライバーによる流入変動風</li> </ul>                                                                                                                             |
| セル形状        | ・六面体（ヘキサ）、四面体（テトラ）、三角柱（プリズム）、四角錐（ピラミッド）およびこれらの併用、ポリヘドラルメッシュ                                                                                                                                                         |
| アルゴリズム      | <ul style="list-style-type: none"> <li>・SIMPLE 法（定常計算）</li> <li>・SIMPLEC 法（非定常計算）</li> <li>・Rhie-Chow 法による圧力補間法</li> </ul>                                                                                          |
| 時間積分法       | <ul style="list-style-type: none"> <li>・Euler 陽解法</li> <li>・Euler 陰解法</li> <li>・2 次精度 Crank-Nicolson 法</li> <li>・2 次精度 Adams-Bashforth 法</li> <li>・3 次精度 Adams-Moulton 法</li> <li>・4 次精度 Runge-Kutta 陽解法</li> </ul> |
| 移流項スキーム     | <ul style="list-style-type: none"> <li>・1 次精度風上差分</li> <li>・2 次精度風上差分</li> <li>・2 次精度風上差分+リミタ (TVD 法)</li> <li>・2 次精度中心差分</li> <li>・3 次精度風上差分+リミタ (TVD 法)</li> <li>・2 次精度中心差分と1次精度風上差分のブレンド</li> </ul>              |
| 行列解法        | <ul style="list-style-type: none"> <li>・ICCG 法</li> <li>・BiCGSTAB 法</li> <li>・AMG 法</li> </ul>                                                                                                                      |
| 熱連成         | <ul style="list-style-type: none"> <li>・流体－固体の熱連成</li> <li>・固体内部に複数の材質</li> </ul>                                                                                                                                   |
| 輻射          | <ul style="list-style-type: none"> <li>・有限体積法</li> <li>・ゾーン法</li> <li>・モンテカルロ法</li> </ul>                                                                                                                           |
| 多孔質         | <ul style="list-style-type: none"> <li>・ベキ乗則</li> <li>・Darcy 則</li> </ul>                                                                                                                                           |
| 流体音         | <ul style="list-style-type: none"> <li>・Lighthill-Curl モデル</li> <li>・Ffowcs Williams and Hawking モデル</li> </ul>                                                                                                     |
| 移動格子        | <ul style="list-style-type: none"> <li>・回転移動格子</li> <li>・並進移動格子</li> </ul>                                                                                                                                          |
| キャビテーション    | ・均質流モデル                                                                                                                                                                                                             |

| 項目   | 機能                                                                                                                                                                                                       |
|------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 自由表面 | ・VOF 法、CICSAM 法                                                                                                                                                                                          |
| 粒子追跡 | <ul style="list-style-type: none"> <li>・固体粒子と流体の二相流</li> <li>・液滴とガスの二相流 (オイラー・ラグランジアン 2way)</li> </ul>                                                                                                   |
| 表面反応 | <ul style="list-style-type: none"> <li>・素反応</li> <li>・Sticking 吸着モデル</li> <li>・LHER 表面総括反応モデル</li> <li>・Bohm プラズマモデル</li> <li>・マルチサイト (保存・非保存則アルゴリズム)</li> <li>・マルチ反応メカニズム</li> <li>・マルチバルク成長</li> </ul> |
| 気相反応 | <ul style="list-style-type: none"> <li>・総括反応モデル (スス生成含む)</li> <li>・渦消散モデル</li> <li>・素反応 (逆反応、三体反応、圧力依存、ユーザー定義)</li> <li>・flamelet モデル</li> </ul>                                                         |
| 並列計算 | ・対応 (Windows版は対応していない)                                                                                                                                                                                   |
| 容量制限 | ・ソフト側に制限なし                                                                                                                                                                                               |

## 2. 機能

流体解析ソフトウェア AFFr は、多成分、化学反応考慮、多相を考慮した汎用の熱流体解析ソフトウェアである。主な機能を表 1 に示す。

AFFr は、非構造格子系のソルバーで、セル形状は、四面体（テトラ）、四角錐（ピラミッド）、三角柱（プリズム）、六面体（ヘキサ）に対応し、これらが混在したメッシュデータを扱うことが可能である。コントロールボリュームは節点中心法を採用してきたが、Ver5.1 よりセル中心法を導入した。それぞれのコントロールボリュームの概略は図 1 の通り。

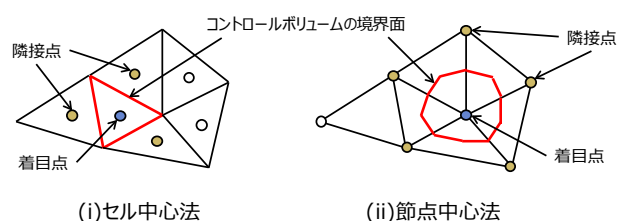


図 1 コントロールボリュームの概略

セル中心法は、作成したメッシュ形状をそのまま使用するため、メッシュ品質を確保しやすく、安定性に優れる。一方、節点中心法は、四面体で作成されたメッシュでもコントロールボリュームはポリヘドラルな形状となり、解析精度が向上する。

乱流モデルは非定常解析用の LES や DES、定常解析用の RANS モデル (k-ε、k-ω モデルなど) を実装している。

物性値に関しては、Sutherland の式や Chapman-Enskog の式を用いるほか、Ver5.1 からは物性値テーブルから引用する機能が追加され、実在ガスの効果を考慮した解析を行うことも可能である。

物理モデルとしては、輻射モデルや、気相反応、表面反応に関する化学反応モデル、多孔質モデルや流体音解析機能も実装されている。また、AFFr は単相の流れを扱うソフトウェアであるが、液滴のような分散相の移動を扱う粒子追跡機能、界面追跡モデルである VOF 法、キャビテーションモデルなど気液間に速度差がないと近似できる条件での二相流の問題を扱うこともできる。

メッシュの移動・変形に関する機能として、ALE 法やスライディング機能を実装しており、ピストン移動や回転体の解析等も可能である。

### 3. 理論概要

#### 3.1. 基礎方程式

AFFr は前述の通り、多成分系を考慮した熱流体解析ソフトウェアであり、基礎方程式は以下の通り、質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式および化学種成分保存式を用いる。アルゴリズムとしてSIMPLEC 法を採用しているため、速度、圧力を基本変数として計算を行う。密度は状態方程式によって算出するが、状態方程式は理想気体の式以外に、実在ガス効果を考慮した Redlich-Kwong の状態方程式や物性値テーブルから取得することも可能である。

[質量保存式]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

[運動量保存式]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = & -\frac{\partial p}{\partial x_i} \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] + \rho g_i \end{aligned} \quad (2)$$

[エネルギー保存式]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho h u_j}{\partial x_j} = & -\frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \sum_s h_s D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) + Q \end{aligned} \quad (3)$$

[化学種成分保存式]

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_s u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) + \dot{w}_s \quad (4)$$

[Redlich-Kwong の状態方程式]

$$P = \frac{R_u T}{M_{w,m} V - b_0} - \frac{a}{M_{w,m} V (M_{w,m} V + b_0)} \quad (5)$$

$R_u$  : 一般ガス定数

$M_{w,m}$  : 混合気の分子量

$V$  : 比体積

$b_0, a$  : ガスパラメータ

乱流モデルに RANS を使用する際、各物理量はアンサンブル平均の成分と変動成分に分けて式を展開する。運動量保存式に関しては、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\rho u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} = & -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \overline{u_k}}{\partial x_k} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij}) + \overline{\rho} g_i \end{aligned} \quad (6)$$

ここで、

$$\tau_{ij} = -\overline{\rho u'_i u'_j} \quad (7)$$

$\tau_{ij}$  はレイノルズ応力と呼ばれ、渦粘性の概念を導入すると、以下のように表現される。

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \bar{\rho} k + \mu_t \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (8)$$

渦粘性係数  $\mu_t$  は乱流に関するパラメータによってモデル化される。ここで、乱流パラメータとして、乱流エネルギー  $k$  と乱流エネルギー散逸率  $\varepsilon$  を用いると次のように表現される。

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (9)$$

これが  $k$ - $\varepsilon$  モデルであり、この場合、 $k$ 、 $\varepsilon$  について以下の輸送方程式が追加される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho k u_j}{\partial x_j} \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k + G_k - \rho \varepsilon - D \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varepsilon u_j}{\partial x_j} \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] \\ + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k + C_{\varepsilon 2} \max[0, G_k] - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) - R \end{aligned} \quad (11)$$

$$P_k = \left[ \mu_T \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right] \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (12)$$

$$G_k = \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T} \frac{g_i}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} = - \frac{\mu_T}{\text{Pr}_T} \frac{g_i}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (13)$$

また、渦粘性係数を乱流エネルギー  $k$  と比散逸率  $\omega$  を用いると次のように表わされる。

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\rho k}{\omega} \quad (14)$$

これが  $k$ - $\omega$  モデルであり、この場合には  $k$ 、 $\omega$  について以下の輸送方程式が追加される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho k u_j}{\partial x_j} \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - Y_k \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \omega}{\partial t} + \frac{\partial \rho \omega u_j}{\partial x_j} \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - Y_\omega \end{aligned} \quad (16)$$

乱流モデルに **LES** を使用する場合、フィルター関数を用いて空間平均された以下の方程式を解く。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\rho u_i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho u_i u_j}}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( p + \frac{2}{3} q \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \bar{\rho} g_i \end{aligned} \quad (17)$$

上付きバーはフィルター関数を使用した空間平均を表す。ここで **SGS** 応力項は

$$\tau_{ij} = \left( \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} q \quad (18)$$

は以下のようにモデル化する。

$$\tau_{ij} = -2\nu_e \bar{S}_{ij} \quad (19)$$

ここで、 $\bar{S}_{ij}$  は **GS** 成分の歪速度テンソル、 $\nu_e$  は

**SGS** 応力の渦粘性係数で

$$\nu_e = (C_s \Delta)^2 (2\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{1/2} \quad (20)$$

と表す。 $C_s$  は計算値を実験地に合わせこむモデル定数であり、**0.065**~**0.2** の値が使用される。

**AFFr** 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[1][2]。特に近年はベクトルマシンをはじめ並列性能向上、自由表面解析を含む混相流解析の精度向上に取り組んできた。ここでは、**AFFr Ver. 7.1** の大規模解析、混相流解析、また化学反応を含む燃焼解析・表面反応解析について紹介する。

#### 4. スパコン対応

スカラー型、ベクトル型などさまざまなプロセッサのスーパーコンピュータに対応すべくチューニングを実施している。

ここでは **NEC** 社製の **SX-Aurora TSUBASA** ベクトルプロセッサマシンを利用した並列性能解析について示す。

#### 4.1. SX-Aurora TSUBASA

本計算においては、SX-Aurora TSUBASA は下記の構成で利用した。

- ・モデル：A300-4
  - ・搭載ベクトルエンジン(VE)数：4
- ただし、測定は特記しない限り 1 ベクトルエンジンで行った。
- ・搭載ベクトルエンジン(VE)：Type 10B
  - ・VE 演算性能(TFLOPS)倍精度：2.15
  - ・VE メモリー帯域(TB/s)：1.22

#### 4.2. 比較計算の環境 (Intel Xeon)

また、比較用に利用した計算機は、Intel Xeon である。構成は下記の通りである。

- ・CPU：Intel Xeon Gold 5218 @2.3GHz
- ・計算リソース：32 コア (2 CPU, 1 node)
- ・ピーク性能：768 GFLOPS /CPU  
(1.536 TFLOPS/node)

#### 4.3. 計算モデル

建築物の風荷重評価のベンチマークとして用いられる、単体単純形状建築物モデルを計算対象とした。風洞実験に対応させることができるように、建築物の形状は 7.5cm×7.5cm×22.5cm のアスペクト比 3 の直方体で、計算領域のサイズは 2m×3m×1.5m である。計算メッシュの節点数は 1,014,773 で、要素数は 5,278,479 である。

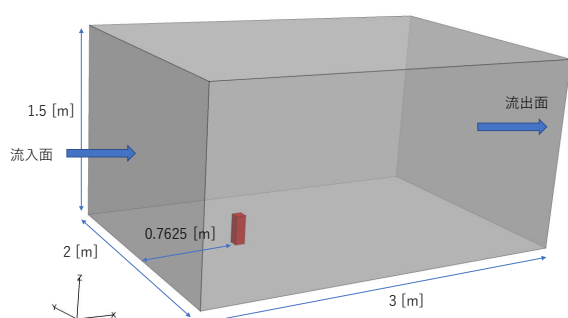


図 2 解析対象

#### 4.4. チューニング手順

まず、SX-Aurora 計算機に合わせたベクトル化として、マルチカラー法を用いた連立一次方程式の求解のベクトル化を行った。ベクトル化を阻害

する依存性がある要素は互いに異なる「色」になるような色付けを行う（マルチカラー）。同じ「色」に属する要素の間には依存性がなく、ベクトル化が可能になる。また、メモリーの連続性のため、変数を色順に並び替えた（オーダリング）。ここでは、Cyclic-Multicoloring + Reverse Cuthill-McKee による色付け[9]を行った。

次に、連立一次方程式の係数行列を求めるときに、各行の非零成分数のカウンタが逐次的でありベクトル化が阻害されていた。そこで、同じ行の複数の成分の計算を同時に行わないようにグループ分けをすることで、グループごとにベクトル計算できるように修正した。また、疎行列とベクトルの積の計算はNLC(NEC Numeric Library Collection)のSBLAS ルーチンを利用するように変更した。

#### 4.5. 処理時間比較

SX-Aurora TSUBASA のベクトルエンジン (VE) 上で8コアを用いた MPI 並列計算を時間ステップ数 500 で行った。また、当社内のスカラー計算機 (Intel Xeon Gold) で 32 コアを用いた MPI 並列計算を時間ステップ数 500 で行った。その計算時間を表 2 に示す。計算時間は wall clock である。MPI 並列計算の結果、ベクトルエンジンを用いた計算は、Intel Xeon Gold での処理時間と比較して、約 1/2.2 の処理時間で計算できた。

表 2 SX-Aurora TSUBASA と Intel CPU の実行時間比較

| 利用した計算機                | 計算時間(秒)  |
|------------------------|----------|
| SX-Aurora TSUBASA(1VE) | 3415 sec |
| Intel Xeon(32 コア)      | 7683 sec |

#### 5. 混相流解析

混相流れにおいては、密度比が大きく異なる相が存在している状況での解析となり、微分可能であることを前提とした離散化を単純に適用できないことが多く、解析として非常に難しい部類に入る。以下では自由表面解析と相変化を考慮したキャビテーション解析について紹介する。

## 5.1. 自由表面解析

自由表面をとらえる手法としてVOF法がある。AFFrではVOFスキームとしてCICSAM法を採用している。また気液界面での不連続な物理量の跳びに起因する数値不安定性を抑える手法としてGhost Fluid法を採用している。

ここでは本手法を用いて、2次元形状での放水シミュレーション結果を示す。

実用的な解析例として、水放流解析を実施した。解析領域は、図の通りで縦0.5m横0.3mの長方形の2つの区画が0.075mの幅を持つ流路でお互いつながっている。メッシュサイズは2.5mmの正方形で作成している。初期に相対的に高位に位置する区画に水を満たしておき、下位区画へ水を放出し定常になるまで解析を実施した。物性は水と空気を利用した。

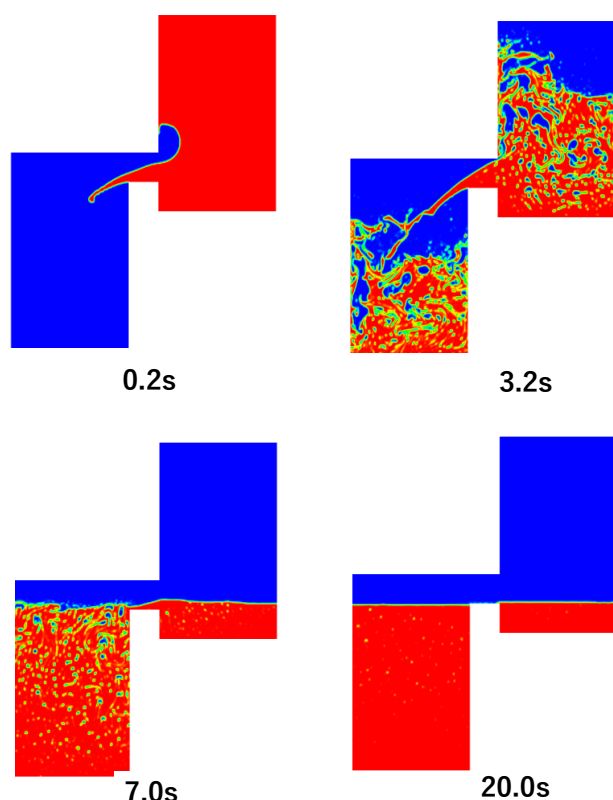


図3 AFFrによる2次元タンク放流解析

図3に各時刻の体積分率を示す。7秒を過ぎたところで左の区画内には多くの気泡が巻き込まれて存在していることが分かる。約10秒かけて気泡が離脱し、ほぼ定常となった20秒界面位置は流路

高さとも一致する。このことから液体積は高い精度で保存していることが分かる。途中の巻き込まれた気泡を拡大表示すると、数セルのメッシュで気泡を表していることが分かる。

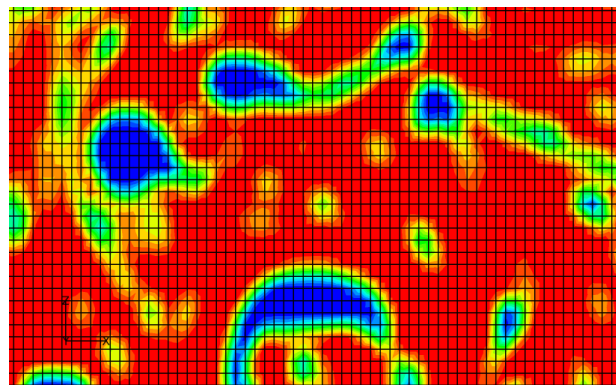


図4 巻き込まれた気泡とメッシュの比較

このように比較的少ない解像度で小さな気泡を安定に計算しつつ、体積保存を精度よく保ちながら解くことが可能である。

## 5.2. 高粘度攪拌解析

AFFrではVOF法を用いた蒸発解析も可能である。蒸発は場の温度が流体の飽和温度を上回った場合に、界面を通じて液体から蒸発に相変化する現象である。

ここでは蒸発の事例として、高粘度の流体と水が混在した状態で、高温壁で加熱された結果表面から蒸発する現象の計算結果を示す。

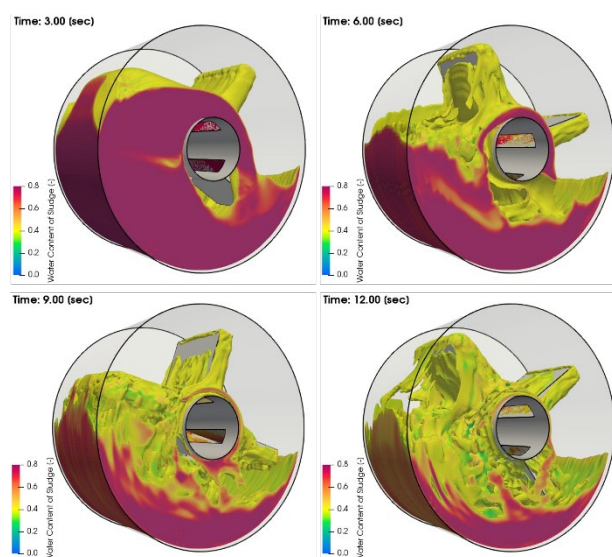


図5 高粘度含水物の体積分率等値面  
(カラーは含水率を表す)



図5に攪拌羽根によって攪拌された高粘度物質の振る舞いを示す。VOFを用いて高粘度物体の自由表面を捕獲しつつ、表面からは水の蒸発を考慮している。

### 5.3. キャビテーション解析

流れに起因して局所的に圧力が低下することがある。場の圧力が流体の飽和圧力と下回り気泡が発生する現象をキャビテーションと呼ぶ。キャビテーションでは蒸発現象と異なり液体中から気泡が発生する。

ここではAFFrのキャビテーション解析事例を示す。

計算対象はNACA0015とし、迎角8度、流速8m/sとした。キャビテーション数 $\sigma$ は0.5~3.5までの9ケースを実施した。

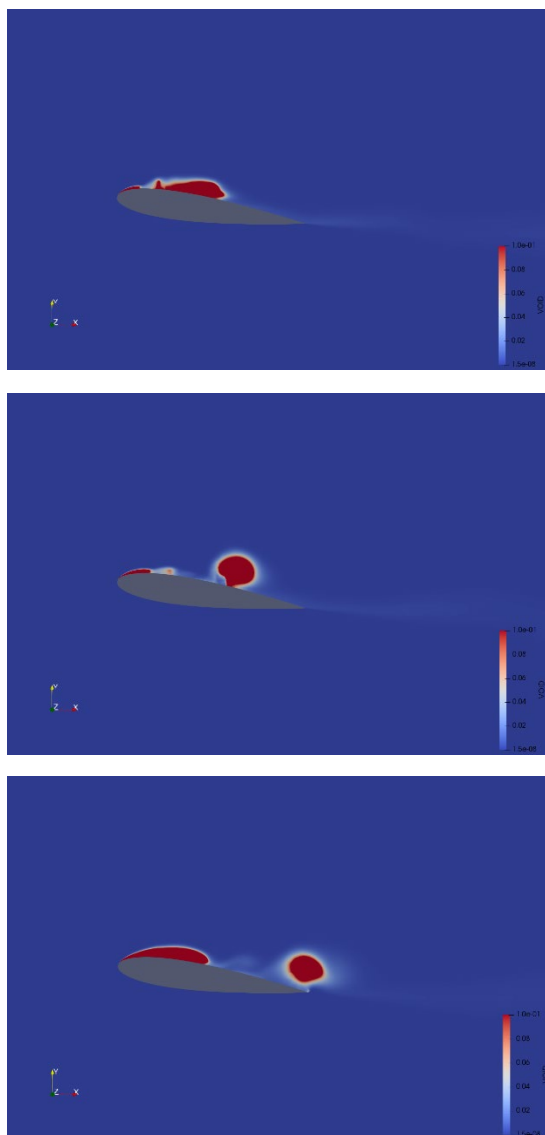


図6  $\sigma=1.4$ での0.01秒ごとの気泡ボイド率分布

図6に $\sigma=1.4$ でのボイド率分布を示す。翼先端で発生した気泡が時間経過につれて下流に移動しながら剥離している様子が分かる。

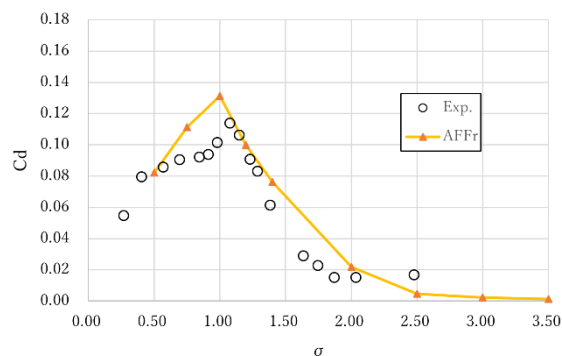


図7 揚力 $C_l$ のキャビテーション数依存性

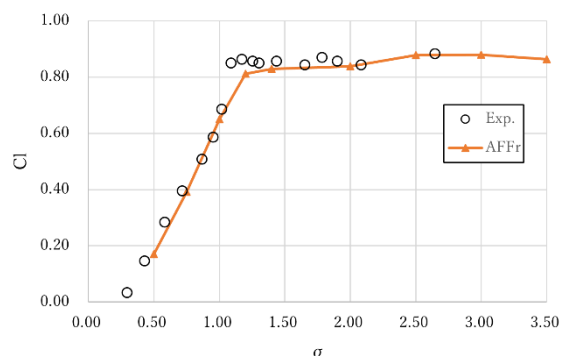


図8 抗力 $C_d$ のキャビテーション数依存性

図7図8に揚力係数 $C_l$ と抵抗係数 $C_d$ のAFFrの結果と実測との比較である。 $\sigma=1.0, 1.4$ で比較の実測と近い結果となっている。

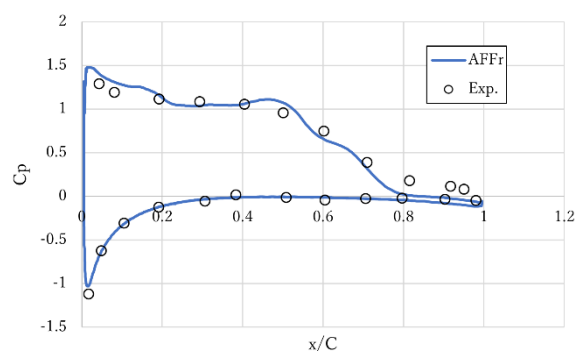


図9  $\sigma=1.4$ の翼面上圧力プロファイル

図9に $\sigma=1.4$ の圧力分布を示す。これを見ると、 $x/C$ が0.5~0.8付近で実測と比較的合っているため揚力が大きくなったことが分かる。

## 6. 化学反応解析

化学反応を伴う流体解析においては、考慮する化学種成分ごとの質量保存式を解く。当然成分ごとの物性を計算条件として与える。AFFr では、JANAF 形式の熱物性データを読み込み可能であり、物質拡散係数も成分ごとに設定可能である。成分ごとの反応速度も乱流効果を取り入れたモデルの使用が可能である。

### 6.1. 成膜解析

半導体デバイス製造過程などにおける微細加工では、材料ガスを基板上に吹き付け、ガス中や基板表面での化学反応を経て目的とする物質を基板上に蒸着させる化学蒸着（CVD：Chemical Vapor Deposition）法と呼ばれる手法が用いられる。CVD 過程では、材料ガスの噴出し口から基板に至る過程の幾何学的な構造や、材料ガスの構成によって規定される化学反応スキームに依存して、基板上に形成される蒸着膜の膜厚分布等の特性（品質）が決定される。近年、微細加工に対してより高い精度が求められる中で、材料ガスの流入から蒸着膜の形成に至る過程をシミュレーションによって評価することの重要性が高まっている。本解析では、AFFr の表面反応計算モジュールを用いて CVD 過程のシミュレーションを行った。取り扱ったケースは、材料ガスとして四フッ化シラン（SiF<sub>4</sub>）とアンモニア

（NH<sub>3</sub>）がチャンバー内に流入し、チャンパー壁の一部である蒸着面にケイ素（Si）と窒素（N）が蒸着する過程である。

#### 初期設定：

材料ガス構成比：SiF<sub>4</sub>: 50%, NH<sub>3</sub>: 50%  
 チャンパー内温度：300℃  
 流入ガス温度：300℃  
 蒸着面温度：1440℃

#### 計算条件：

時間刻みdt=1.0d-5秒、ステップ数：20,000（実時間にして0.2秒）  
 流れ場の状態：圧縮性流体  
 化学種：ガス成分 17 種、表面成分 8 種  
 反応式：ガス反応 33 式、表面反応 6 式

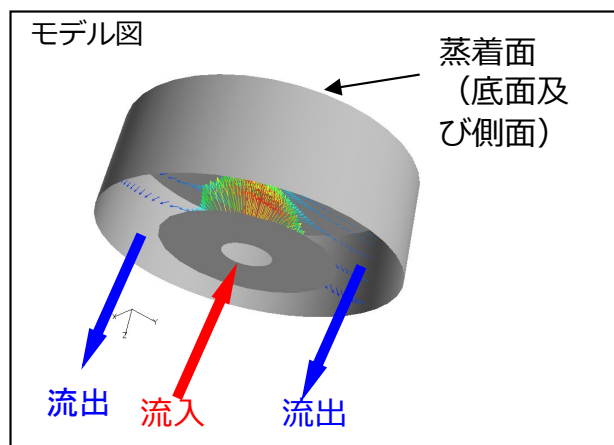


図 10

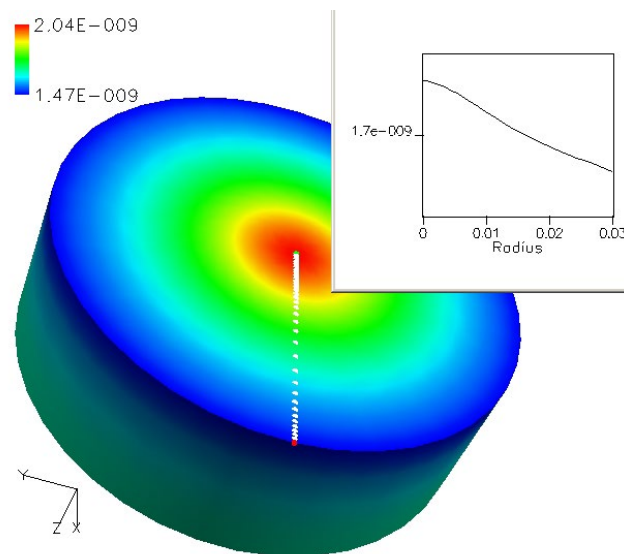


図 11 蒸着面上における Si 膜の膜厚分布。右上コンタ図における白点線上における膜厚の分布であり、Radius=0 が底面中心、Radius=0.03 が底面縁に対応。

本解析で用いたチャンパー形状では、図 11 に示されるように、流入口に近く材料ガスが直接吹き付けられる底面に厚く蒸着膜が形成され

（赤色領域）、底面の縁には蒸着膜が形成されにくい（青色領域）結果が得られた。今回のケースは比較的な単純な形状のチャンパーにおけるシミュレーションであり、形状から容易に予想することのできる妥当な結果が得られたが、微細加工に求められる、複雑な形状の基板における蒸着過程や新規の反応スキームに基づく蒸着過程を評価する上では、材料ガスの流動解析と、ガス中及び基板表面における反応過程の双方を考慮した計算スキームが求められる。



## 7. 複雑形状

AFFr では、複雑形状への対応として、重合格子機能、メッシュ変形機能を保有している。以下ではメッシュ変形機能を利用した流体構造連成計算について紹介する。

### 7.1. モード解析を用いた流体-構造連成解析

流体-構造連成問題において、構造物の線形弾性挙動を扱う場合、構造解析はモード解析と呼ばれる手法を用いることができる。

この手法をユーザーサブルーチンとして組み込み、ALE 法など格子変形機能と併用することで、AFFr 単体でも線形弾性挙動を計算することが可能となる。

ここでは、本手法を用いて、図 12 に示すモデルで角柱の後ろにある長さ 4cm の構造物が振動する挙動を解析した事例を示す。解析手法は表 3 の通りである。

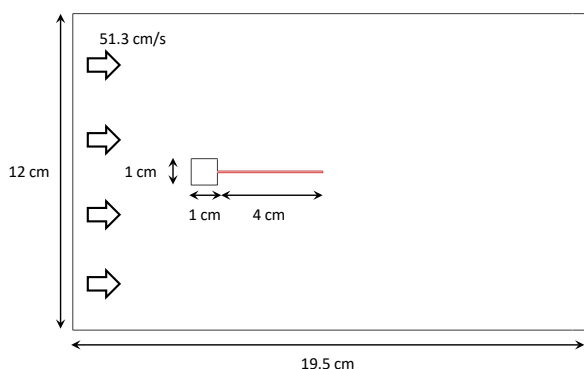


図 12 解析モデル

表 3 解析手法

|        |            |
|--------|------------|
| 支配方程式  | 非圧縮 NS 方程式 |
| 乱流モデル  | なし         |
| 対流項離散化 | 3 次精度風上差分  |
| 時間積分法  | Euler 陰解法  |

モード解析では20のモードに対して固有値、固有ベクトルを求め、このデータを用いて、構造物の変形量を算出する。振動モードの例を図13に示す。

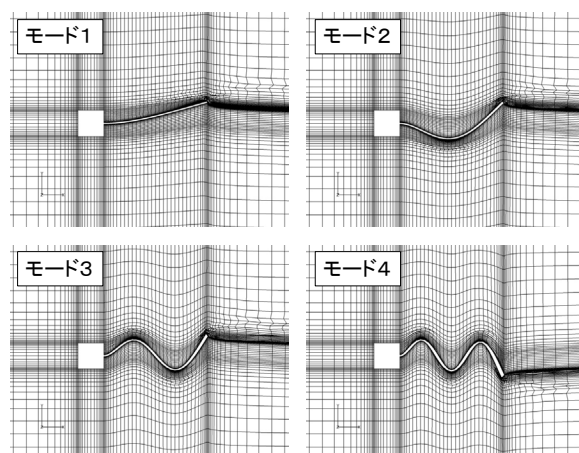


図 13 振動モード

図 14 は解析結果を示す。赤線で示した元の形状に対して、少しではあるが、下に変形している様子が確認できる。ALE 法では変形が大きくなると、格子の歪みが大きく、計算が破綻しやすくなるため、大変形に対しても安定に計算できるようにすることが今後の課題となっている。

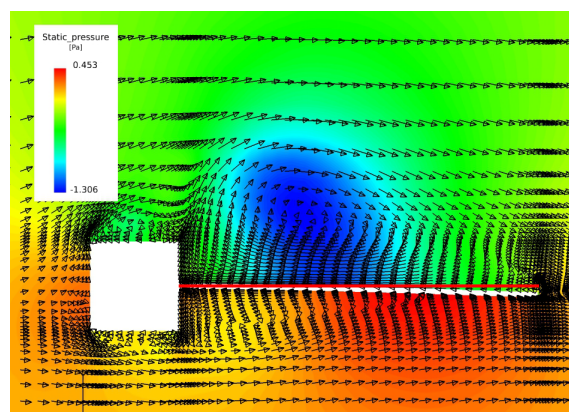


図 14 解析結果 (圧力および速度ベクトル)

## 8. まとめ

流体解析ソフトウェア AFFr は、高速化、ロバスト性、使い勝手のよさを中心に日々改良を進めている。引き続き、製品の品質向上に取り組むとともに、ユーザー様のご要望を取り入れながら、本ソフトウェアを進化させていく予定である。

## 参考文献

- [1] Ahmed et al., “Some Salient Features of the Time Average Ground Vehicle Wake”, SAE Paper, No. 840300,1984
- [2] 三浦 治雄, 小林 博美, 三橋 利玄, 西村 香

純, 大友 洋, 西川 憲明, 廣川 雄一, 平成  
20 年度先端研究施設供用イノ

- [3] ベーシヨシ創出事業【産業戦略利用】「地球  
シミュレータ産業戦略利用プログラム」利  
用成果報告書 p.27
- [4] 伊藤 豪, 大西 陽一, “流体解析ソフトウェア  
Advance/FrontFlow/red による自由表面解析”,  
アドバンスシミュレーション Vol.17, 2013.12
- [5] 小川 哲司, 松原 聖, “流体解析ソフトウェ  
ア Advance/FrontFlow/red を用いた流体-構造  
連成解析”, アドバンスシミュレーション  
Vol.17, 2013.12

※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、【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。)