

# 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。

流体现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。

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)。

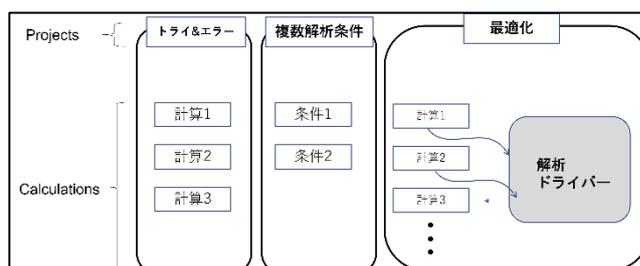


図 1 解析プロジェクト・計算ファイルの階層構造

\*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

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。

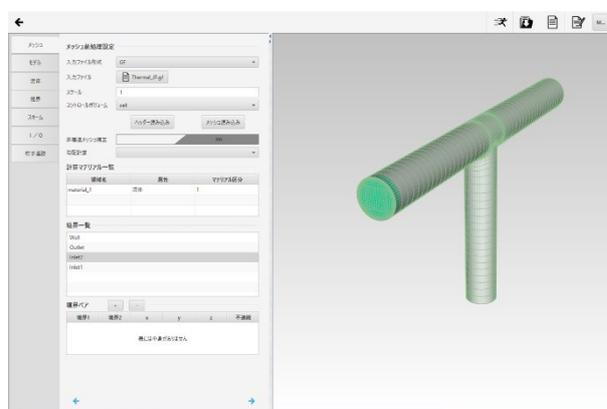


図3 計算設定入力画面

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。

1. 一つの変更内容に対して複数の場所でも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。
2. 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。流体现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、並列スケール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有されている。しかし共有計算サーバーでは CUI による操作が基本的で、必要な入力データ一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。AFFrGUI 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。

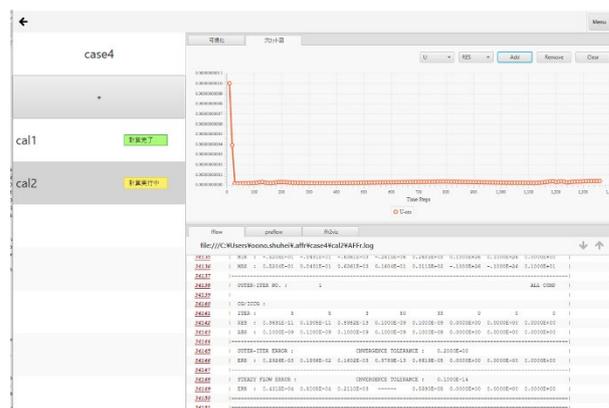


図 4 AFFr からの標準出力と代表値の遷移を表すグラフプロット

### 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、機能が多いため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  $A \rightarrow B$  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。

$$r_{AB} = \frac{\sum_{i=1}^l |v_{A,i} \omega_i \delta_{B,i}|}{\sum_{i=1}^l |v_{A,i} \omega_i|}$$

$$\delta_{B,i} = \begin{cases} 1 & (i\text{番目の反応式が化学種}B\text{を含む}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

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い化学種およびその化学種に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。

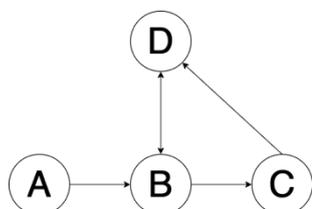


図 5 DRG の一例。頂点が化学種、矢印が化学種管の結びつきを表す

#### 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、今後の拡張として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、ボタン一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、パラメータごとに計算(実験)を実施してパラメータ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](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。)