オープンCAE学会ワークショップ 2012.6.8 代々木

オープンソースCAEソフトウェアの役割と課題
−マルチフジックス流体解析*FrontFlow/red* 開発を事例として−

大島伸行

北海道大学工学研究院･機械宇宙工学部門

オープンソースCAEソフトウェアの役割と課題

−マルチフジックス流体解析*FrontFlow/red* 開発を事例として−

- オープンソースCAEのコスト
- オープンソースCAEの開発シーズ
- オープンソースCAEの開発ニーズ
- オープンソースCAEの教育的価値
- オープンソースCAEの将来

マルチフジックス流体解析 *FrontFlow/red* の開発

文部科学省IT基盤構築のための研究開発
「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」(2005-07)

FrontFlow /blue
物体周囲流れの諸問題 ～ 計算速度･精度を重視
•境界層／剥離流れ／車両空力～流体音／ﾀｰﾎﾞ機械～構造連成

FrontFlow /red
複雑な流れ現象 ～ 汎用性･拡張性を重視
•複雑形状／燃焼反応流れ／混相流／粒子流れ／熱伝導･物質拡散

基盤開発フェーズ

⇩

FrontFlow/red ver.3.1**の公開 (2009.7 北大･情報センター)**
～2011.3 **ダウンロード数 約210サイト (うち企業過半数)**

営利利用ライセンス → ベンチャー企業による商用化
ユーザー企業による製品開発利用

実証応用フェーズ

- **スーパーコンピューティング技術産業応用協議会／計算科学振興財団**
- 機械学会研究分科会 RC-D4(2008-09), RC-D9(2010-11), RC(2012-13)
- NEDO「固体高分子燃料電池の流動・物質拡散数値シミュレーションの研究開発 」
- NEDO「自動車空力設計イノベーションのための次世代非定常空力シミュレータの開発」
- 「京」HPCI 分野４「ものづくり」： サブテーマ「自動車空力」「微粉炭燃焼器」

マルチフジックス流体解析 *FrontFlow/red* の開発

FrontFlow /red
複雑な流れ現象　　～　汎用性･拡張性を重視
･複雑形状／燃焼反応流れ／混相流／粒子流れ／熱伝導･物質拡散

- **開発目的**
  - **ラージ･エディ･シミュレーション (LES)法による複雑な非定常流れの数値予測法の開発**
    - LESによる高Re数乱流拡散の汎用的で正確な予測法
    - 非定常性の適切なモデル化による空力音や構造連成の予測
    - スケール分離の概念に基づく燃焼、混相などの複雑流の合理的モデル
    - 温度、密度変化を扱う統一的な解法、モデル
    - 1億点相当の大規模計算によるCADデータに匹敵する解像精度
    - 非構造型格子と並列計算による実用計算への適用

⇒　高品質の乱流予測によってデジタルデザインを実現する

FrontFlow開発計画

	H14 (⇒ H15公開)	H15 (⇒ H16公開)	H16 (⇒ H17公開)
FrontFlow /blue	基本ｿﾙﾊﾞｰ:FEM非圧縮性 ｵｰﾊﾞｾｯﾄ格子 HPC並列化 LES乱流モデル 流体音 (遠方近似)	ｱﾙｺﾞﾘｽﾞﾑ収束性の改良 ｷｬﾋﾞﾃｰｼｮﾝﾓﾃﾞﾙ 騒音解析機能の強化	低マッハ数近似への拡張 **PCｸﾗｽﾀｰ並列化 4面体要素
FrontFlow /red	基本ｿﾙﾊﾞｰ:FVM低ﾏｯﾊ数 複合非構造型格子 LES乱流モデル RANS乱流モデル 総括化学反応	圧縮性への拡張 計算収束性の向上 HPC並列化 乱流流入境界ﾓﾃﾞﾙ 燃焼素反応	Flamelet 燃焼流ﾓﾃﾞﾙ **PCｸﾗｽﾀｰ並列化 粒子追跡・蒸発ﾓﾃﾞﾙ *ｽｶﾗｰ輸送LESﾓﾃﾞﾙ *RANS応力ﾓﾃﾞﾙ
FrontFlow /GUI	標準入出力ﾌｫｰﾏｯﾄ(GF)	ﾃﾞｰﾀ変換の強化 条件設定GUI 基本Pre/Post	連成計算機能 (構造、熱伝導) **統合GUI (β版)

*大学ﾕｰｻﾞ等による非営利開発

**商用版開発(ｱﾄﾞﾊﾞﾝｽｿﾌﾄ)

FrontFlow開発計画

H17 ~

FrontFlow /blue
- DES乱流ﾓﾃﾞﾙ
- (Hybrid乱流ﾓﾃﾞﾙ)

FrontFlow /red
- 噴霧燃焼ﾓﾃﾞﾙ
- *材料系反応ﾓﾃﾞﾙ
- **2相流ﾓﾃﾞﾙ

FrontFlow /GUI
- 実行支援機能
- GFの拡張･入出力強化
- ITBL、GRID環境対応
- *外部ｲﾝﾀｰﾌｪｰｽ
- **統合GUI

*大学ﾕｰｻﾞ等による非営利開発

**商用版開発(ｱﾄﾞﾊﾞﾝｽｿﾌﾄ)

H19 (⇒H19 公開)

ﾃﾞｼﾞﾀﾙｴﾝｼﾞﾆｱﾘﾝｸﾞ統合解析

(構造解析、PSE、HPC開発ｿﾌﾄｳｪｱとの統合)

実証 ~ 「丸ごとｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ」の実現

- 計算精度･信頼性の定量評価
- 大規模計算ﾊﾟｰﾌｫｰﾏﾝｽの強化
- 解析対象の拡張 (ex. ﾐｸﾛﾓﾃﾞﾙとの連成)

実用化 ~ ﾃﾞｼﾞﾀﾙｴﾝｼﾞﾆｱﾘﾝｸﾞの普及

- 連成計算GUI／計算の自動化
- 既成ｿﾌﾄ、CAD、ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽとのｲﾝﾀｰﾌｪｰｽ
- PCｸﾗｽﾀｰ、ﾌﾞﾛｰﾄﾞﾊﾞﾝﾄﾞ環境への適合

1. オープンソースCAEのコスト

戦略・革新 PJ／VCAD ・・・

- 開発目的
  - ラージ・エディ・シミュレーション（LES)法による複雑な非定常流れの数値予測法の開発
    - LESによる高Re数乱流拡散の汎用的で正確な予測法
    - 非定常性の適切なモデル化による空力音や構造連成の予測
    - スケール分離の概念に基づく燃焼、混相などの複雑乱流の合理的モデル
    - 温度、密度変化を扱う統一的な解法、モデル
    - 1億点相当の大規模計算によるCADデータに匹敵する解像精度
    - 非構造型格子と並列計算による実用計算への適用
  - ⇒ 高品質の乱流予測によってデジタルデザインを実現する
- 開発内容
  - 2つの主要な対象のための乱流解析ソルバー

FrontFlow / blue
物体周囲流れの諸問題 ～ 計算速度・精度を重視
・境界層／剥離流れ／車両空力～流体音／ﾀｰﾎﾞ機械～構造連成

FrontFlow / red
複雑な流れ現象 ～ 汎用性・拡張性を重視
・燃焼反応流れ／混相流／スプレー・粒子流れ／熱伝導・物質拡散

平成23年3月13日 2

ものづくり PJ

次世代スーパーコンピュータ

平成20年度概算要求額：195億円
（平成19年度予算額 ： 77億円）

最先端・高性能汎用の次世代スーパーコンピュータ(1秒間に1京回の計算性能)を平成22年度の稼働、平成24年の完成を目指して開発するとともに、利用のためのソフトウェアの開発を推進

次世代スーパーコンピュータ施設のイメージ

「兆」級HPC
一億自由度
マルチスケール

**CAE技術の
(数学的) 一般性
(物理的) 学際性
(産業的) 汎用性
をどのように図るか？**

「京」級HPC
100億自由度
マルチディシプリン

1. オープンソースCAEのコスト

CAEソフトウェアの
パーフォーマンスも
同様に向上したか？

ソフトウェアコスト負担にも
コンセンサスが必要

- 開発者のシーズ
- 利用者のニーズ
- 社会への還元

2．オープンソースCAEのシーズ

乱流非定常性が支配的

乱流解析の戦略

Structural design

Structural analysis
- Stress / vibration
- Thermal striping

Sound analysis
- Noise / instability

Turbulent mixing

Turbulence model
- Swirl / Recirculation
- Heat / Mass flux

Flame dynamics

Flame propagation
- Premix / Diffusion flame
- Emission / Blow out

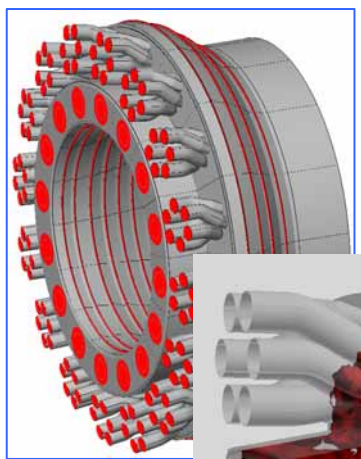
Chemical reaction

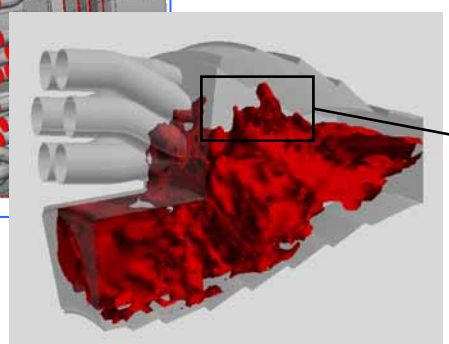
Reaction model
- Rarefied combustion
- Alternative fuels

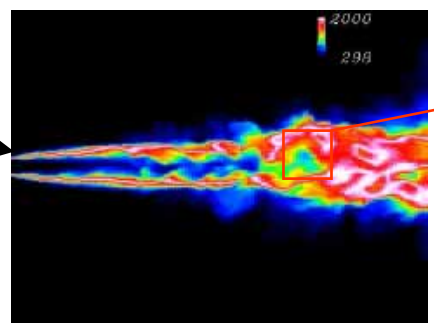
10^3 1

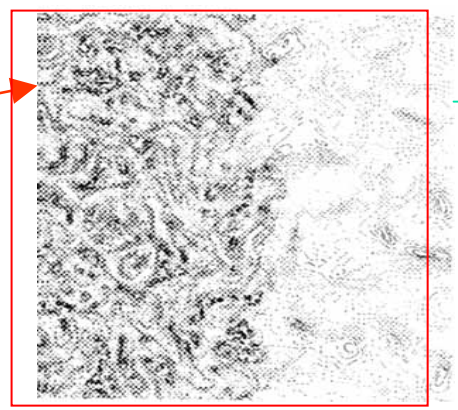
RANS LES DNS

Chemical element reaction









NO
OH
CO
⋮

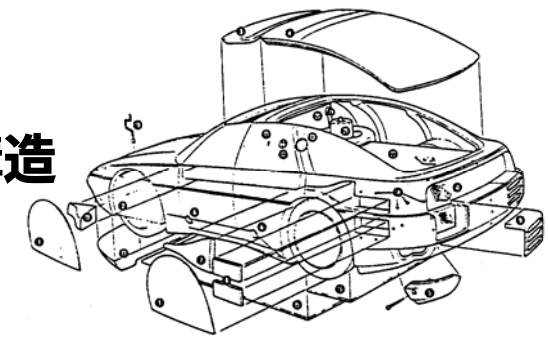
2．オープンソースCAEのシーズ

物理解の複雑性･不連続性

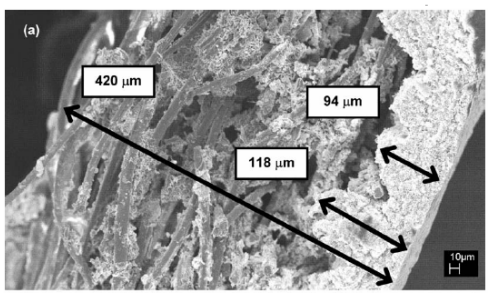
･自然／人工の境界構造

Ex.
地形，市街，植生など

Ex.
装置構造

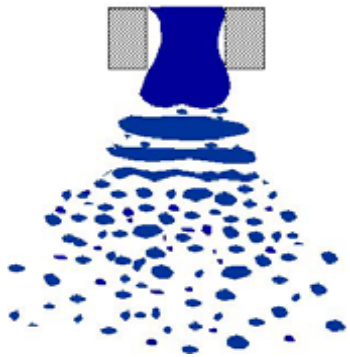


Ex.
多孔質

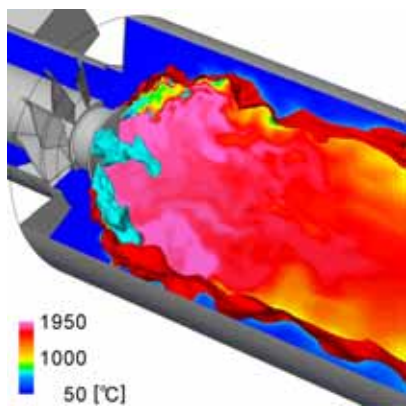


･非平衡過程による「界面」

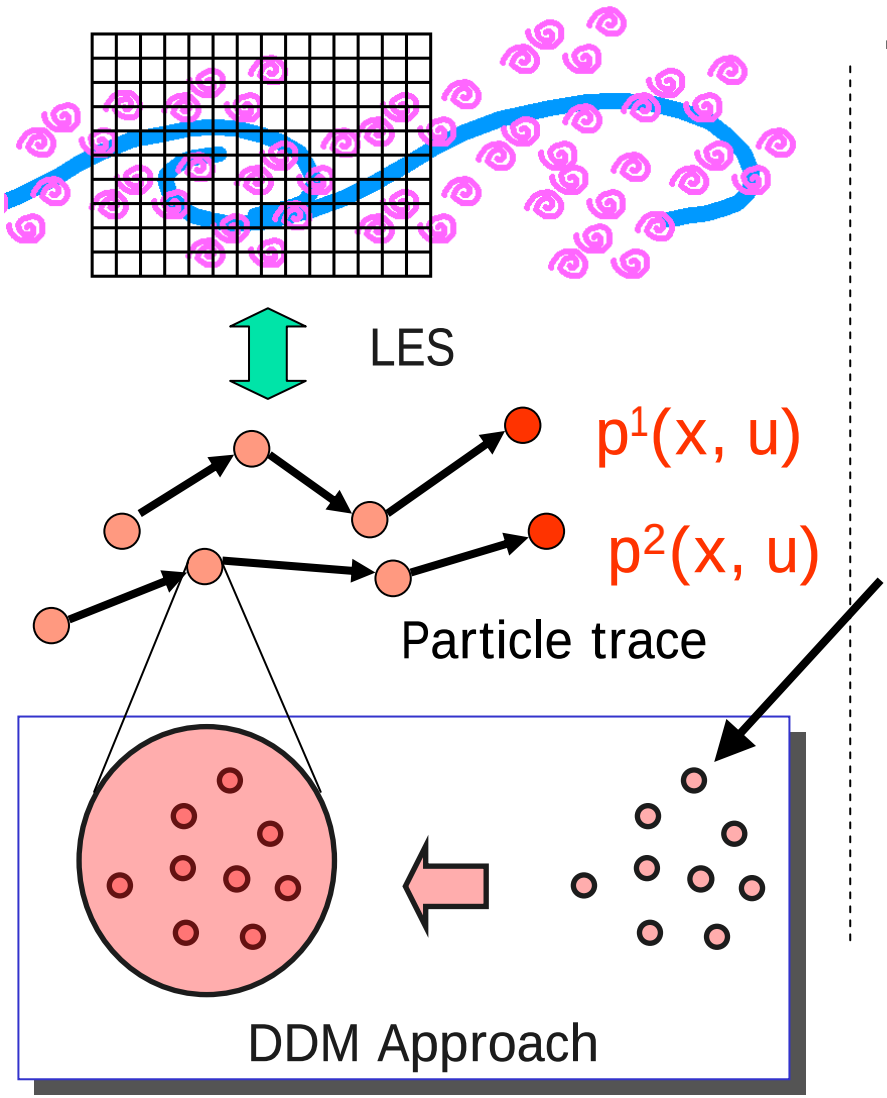
Ex.
気液界面



Ex.
火炎



粒子構造の連成モデル
Discrete Droplet Model

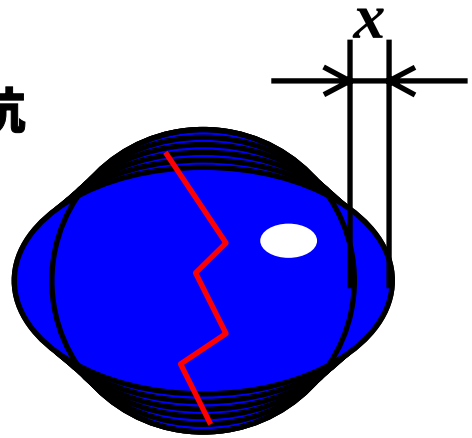


TABモデル (液滴分裂)

バネによる復元力 → 表面張力

減衰 → 粘性

外力 → 空気抵抗



振動方程式:

$$y'' = \frac{C_F}{C_b}\frac{\rho}{\rho_d}\frac{\left|\vec{u}_d - \vec{u}\right|}{r^2} - \frac{C_k\sigma}{\rho_d r^3}y - \frac{C_d\mu_d}{\rho_d r^2}y'$$

無次元変形量 $y = \frac{x}{C_b r} > 1$ ⇒分裂

(1) Peter J. O'Rourke,et.al., 1987 SAE 872089

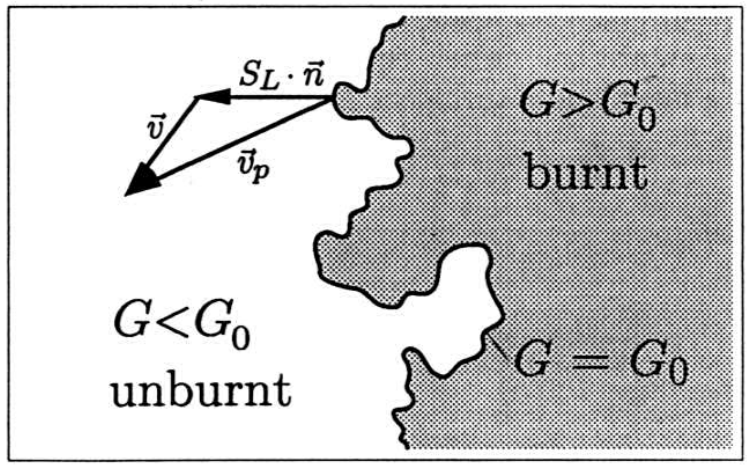
界面構造の連成モデル
Interface model by level-set & phase field

G-equation model for premixed flame propagation

(Williams 1985, Kerstein 1988)

$$\rho\frac{\partial G}{\partial t}+\rho u_j\frac{\partial G}{\partial x_j}=\rho S_L|\nabla G|$$

→ マクロスケール･アプローチ

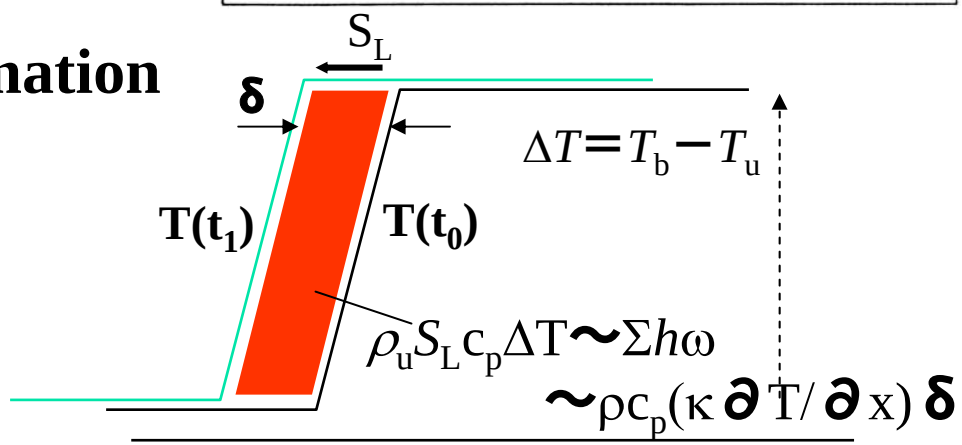


Progress variable model with hyperbolic Tangent Approximation

(Inage et.al. 1989)

$$\frac{D\eta}{Dt}=\frac{8S}{\delta}\eta^2(1-\eta)+\Gamma\nabla^2\eta$$

→ マイクロスケール･アプローチ



2. オープンソースCAEのシーズ

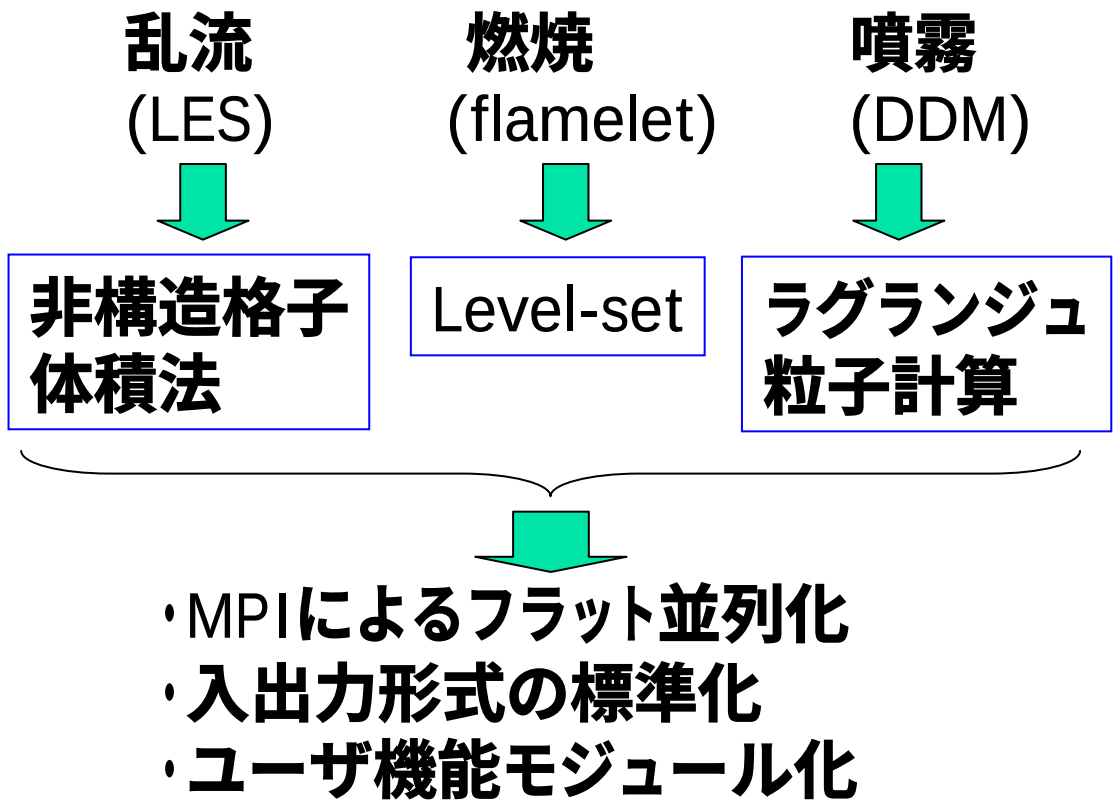
FrontFlow/red **事例**

1) **スケール分離による**
複雑現象モデリング原理

2) **次世代スパコンによる**
超大規模計算の実現

3) **オブジェクト設計による**
汎用的連成解析の構築

対象研究シーズの例



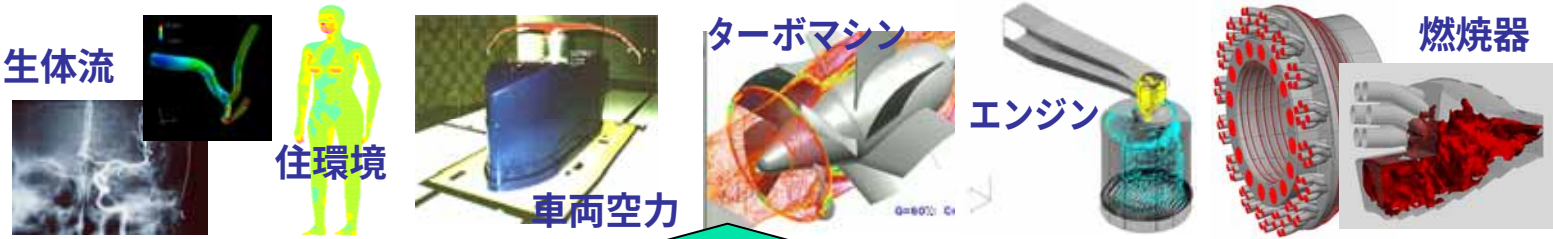
シーズ共有のためのオープンソース公開

3．オープンソースCAEのニーズ

次世代流体解析システム　-*FrontFlow*-

マルチスケール現象のシミュレーション

3次元非定常問題のシミュレーション

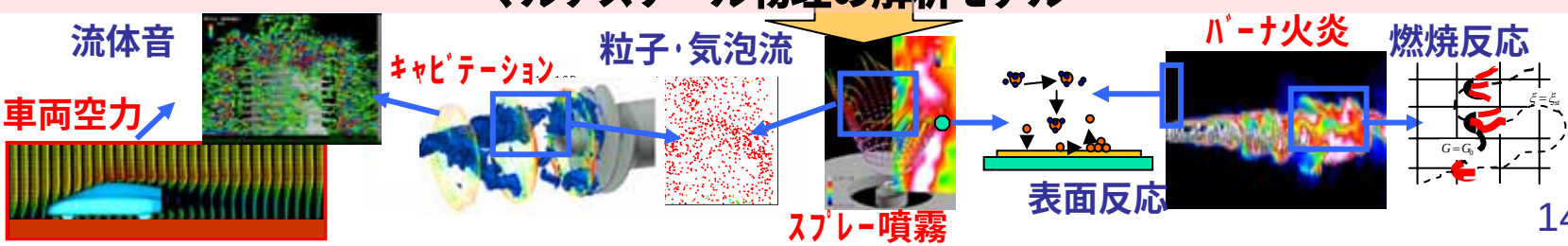


工学における複合連成問題

乱流ﾗｰｼﾞ・ｴﾃﾞｨ・ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ(LES)に基づく解析ﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑ

流体音解析ﾓﾃﾞﾙ	**ターボ機械・流体音解析ﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑ** *(FrontFlow / blue)*	**燃焼・混相流解析ﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑ** *(FrontFlow / red)*	火炎解析ﾓﾃﾞﾙ
流体力解析ﾓﾃﾞﾙ			粒子解析ﾓﾃﾞﾙ
移動境界解析ﾓﾃﾞﾙ			気泡解析ﾓﾃﾞﾙ
構造連成解析ﾓﾃﾞﾙ			伝熱解析ﾓﾃﾞﾙ

マルチスケール物理の解析モデル

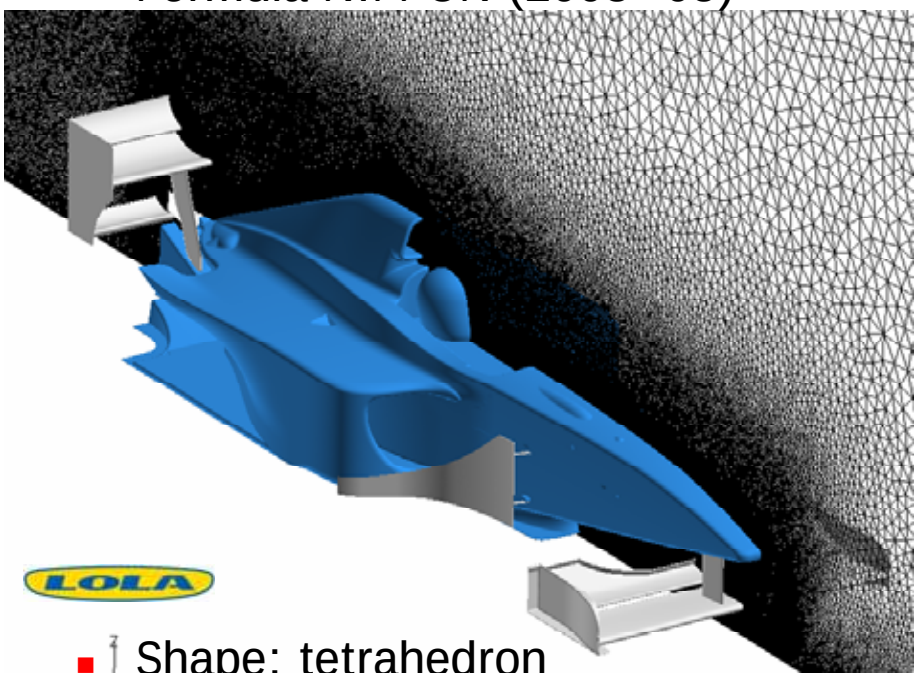


応用例1　－車両空力－

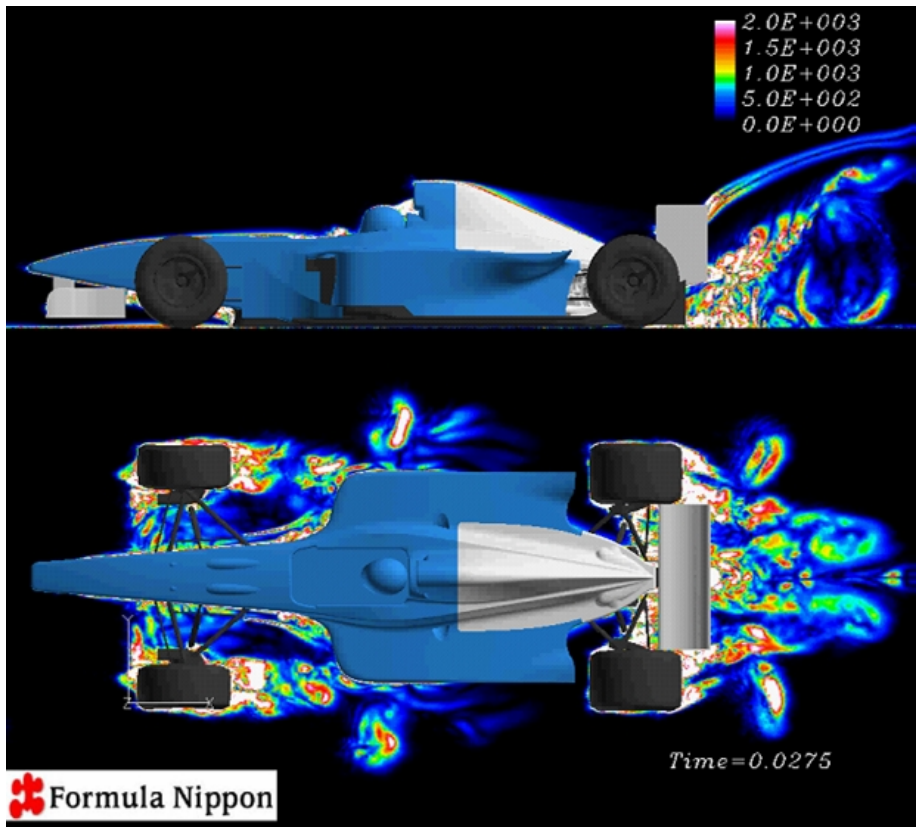
超大規模フォーミュラカー流れ解析への応用例

⇒ 超大規模

- LOLA B03/51
- Formula NIPPON (2003~05)

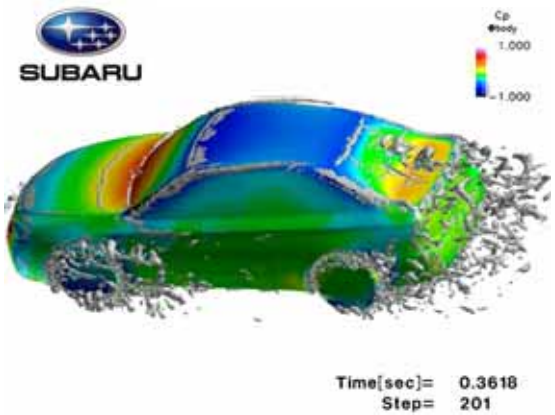


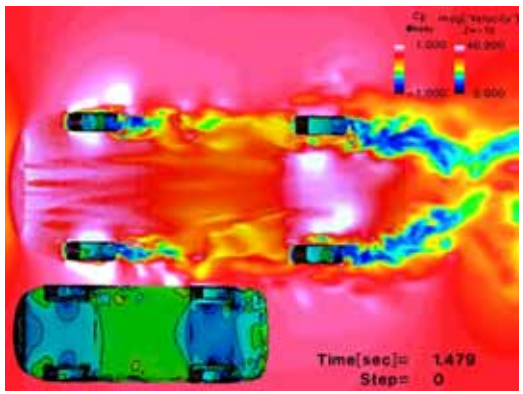
- Shape: tetrahedron
- Element numbers: 117,060,909
- Node numbers: 20,957,323



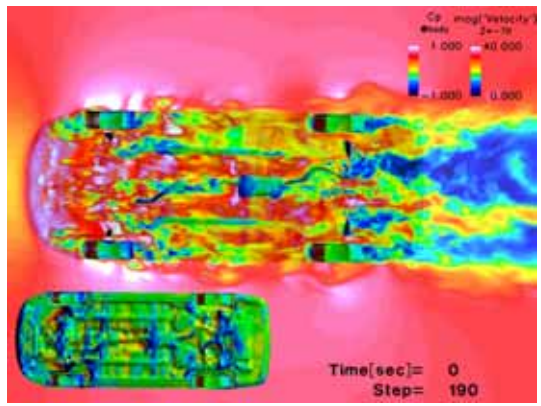
非定常空力シミュレータ ～ 変動風の再現

車体床下形状が横風安定性に与える影響

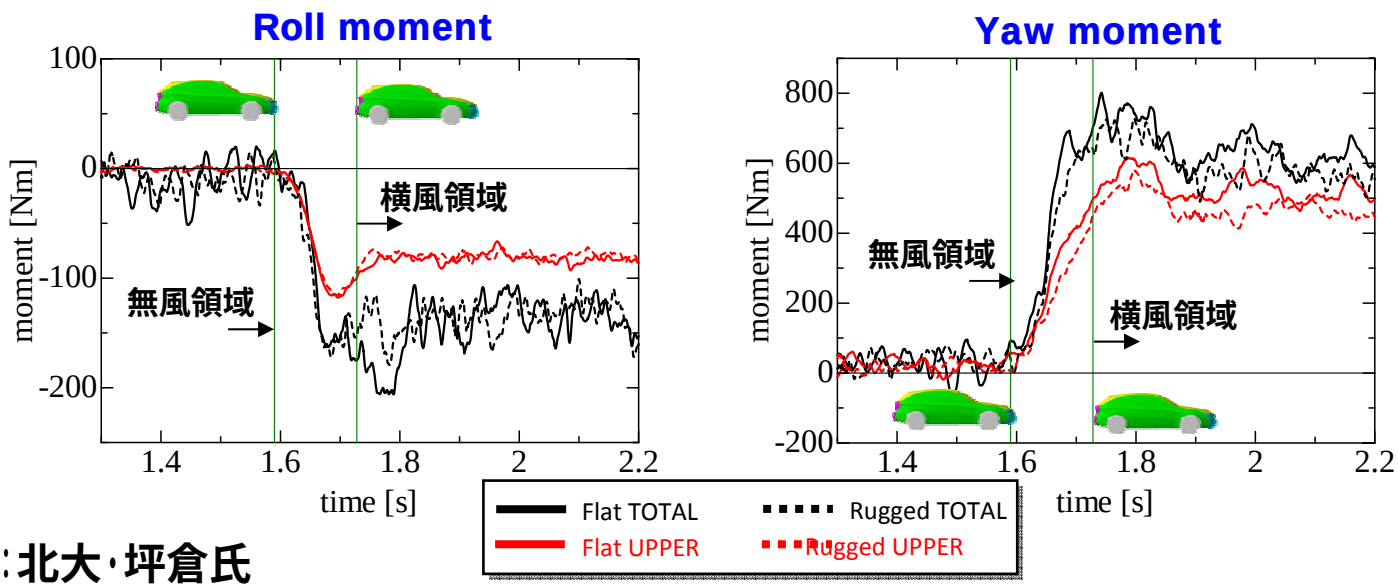




Flat



Rugged



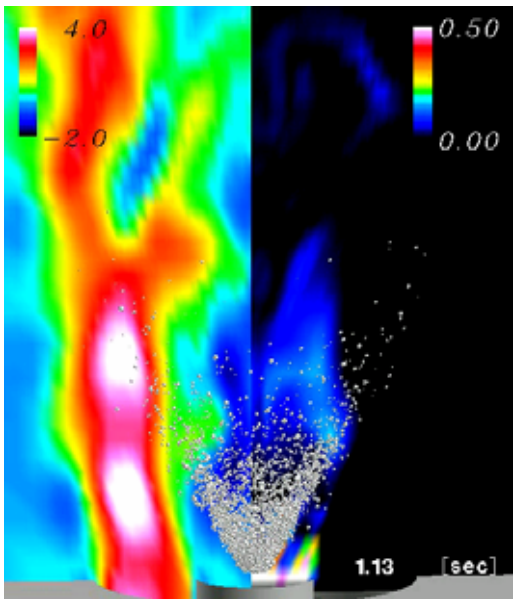
資料提供：北大・坪倉氏

応用例2　－燃焼･反応･噴霧－

燃焼流れのLES非定常解析モデルの開発

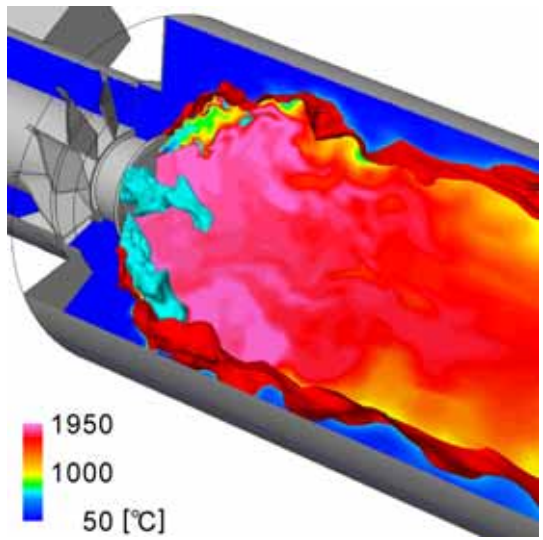
FFRの基本物理モデル　乱流LES＋　⇒ 複雑現象

- スプレー噴霧モデル



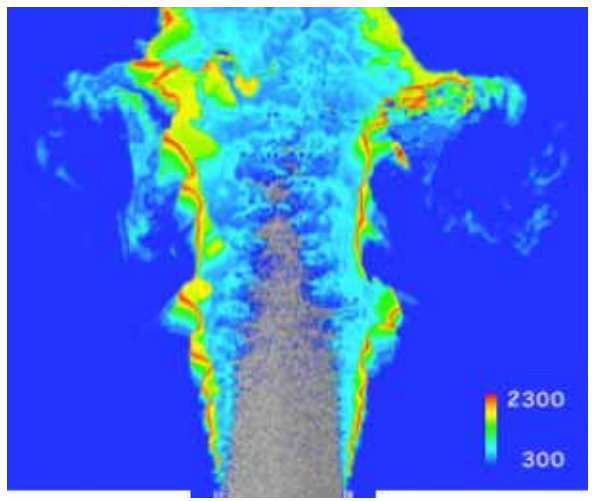
ﾗｸﾞﾗﾝｼﾞｭ粒子ﾓﾃﾞﾙ による
乱流火炎中の燃料スプレー
の数値予測

- 乱流火炎モデル



2-scalar flamelet モデルによる
ガスタービン燃焼器（部分予混合
燃焼流れ）の数値予測

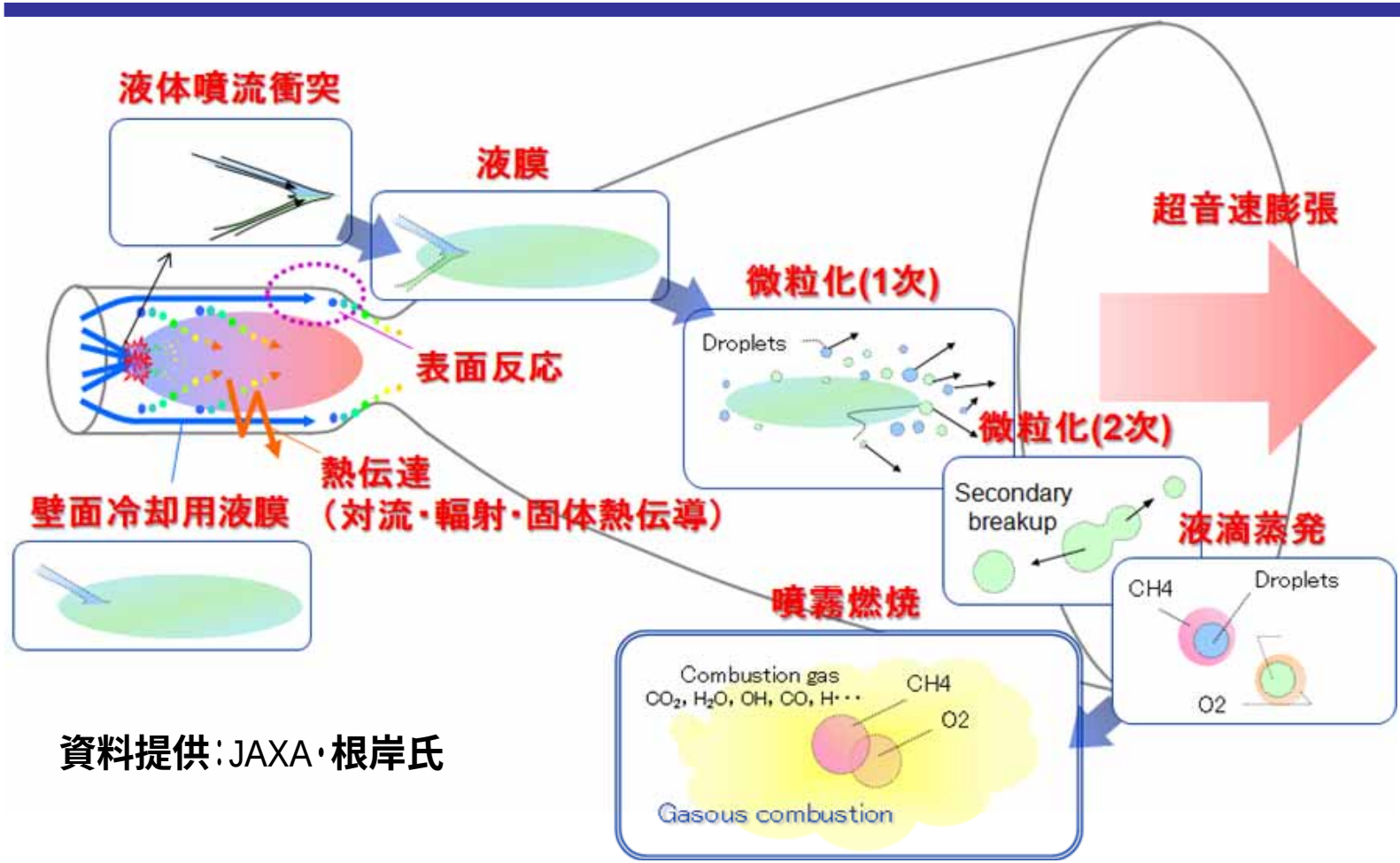
- 気液界面モデル



資料提供: 京大･電中研･NuFD

Level-set モデルによる
燃料噴霧形成の数値予測

宇宙推進器(液体ロケット)への応用



資料提供：JAXA・根岸氏

宇宙機化学推進スラスタ内の主要物理現象

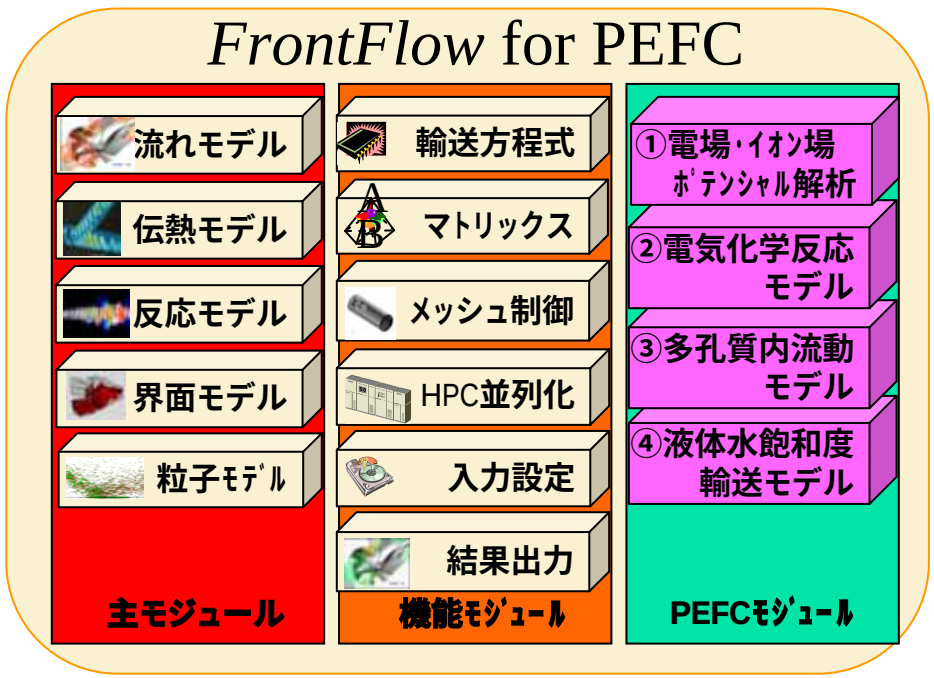
応用例3　－燃料電池－

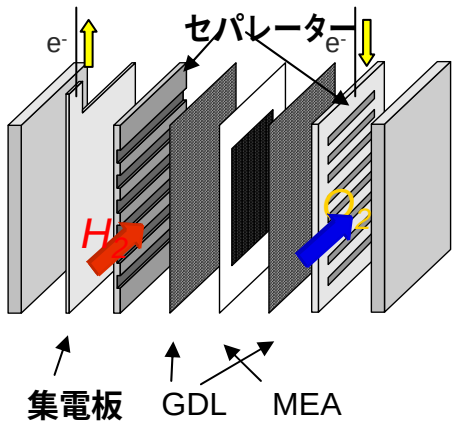
多孔質内の熱･物質移動、電気化学反応の連成解析

FrontFlow（汎用流体ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ）＋

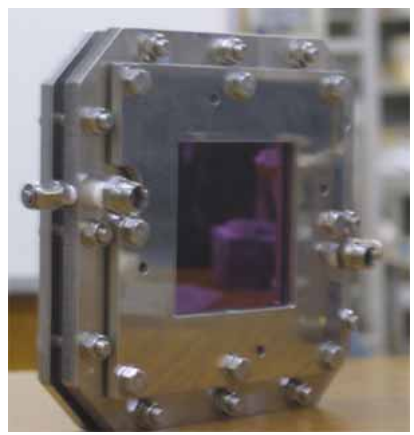
- 電場･イオン場のポテンシャル解析（ﾓｼﾞｭｰﾙ①）
- 電解質触媒層の化学反応の解析（ﾓｼﾞｭｰﾙ②）
- 多孔質内の流動･物質移動の解析（ﾓｼﾞｭｰﾙ③）
- 多孔質内の水分輸送の解析（ﾓｼﾞｭｰﾙ④）

⇒ 拡張性



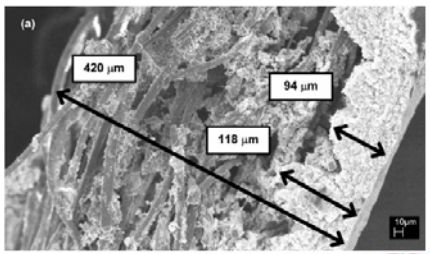


PEFCの基本構造

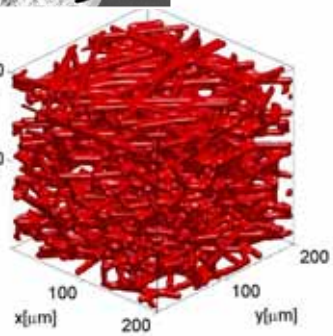


PEFC単層セルの概観
（北大：近久ら）

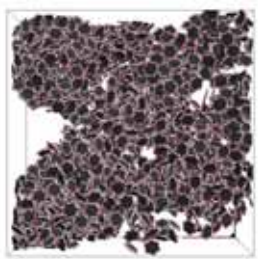
多孔質内現象の粗視 (平均) 化アプローチ



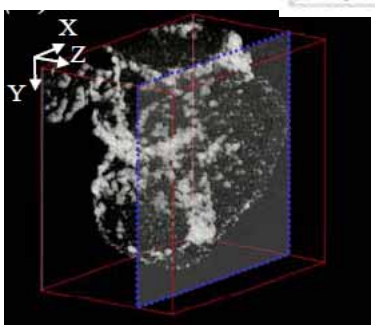
GDL



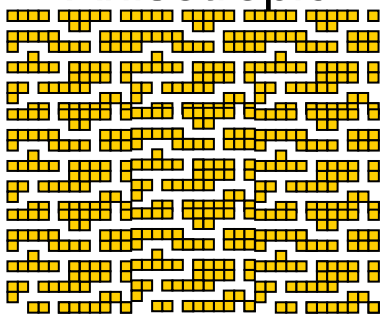
Micro/Nano structure models



Catalyst layer



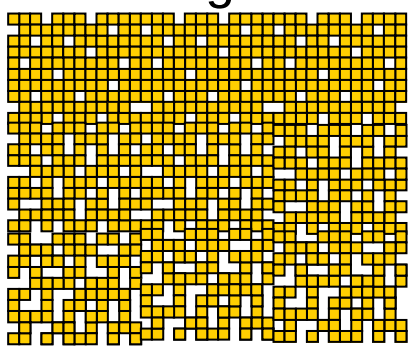
Anisotropic



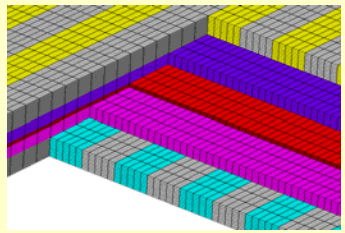
Pore networks approx.

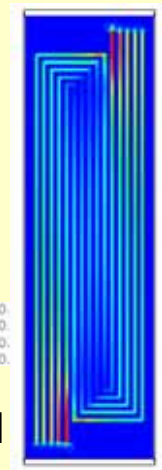
Structure based Averaging model

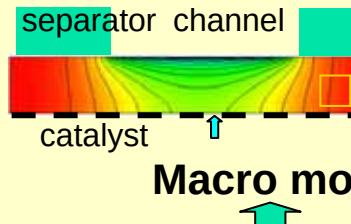
Inhomogeneous



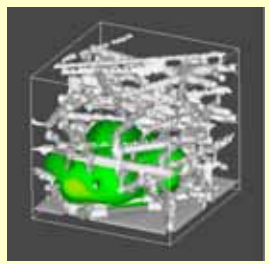
Pore density approx.

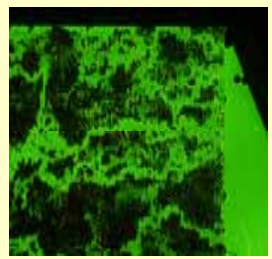






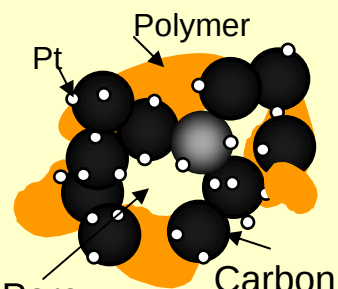
Macro model

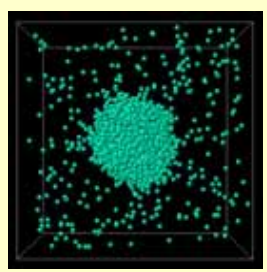




Micro model

Nano model





3．オープンソースCAEのニーズ

FrontFlow/red **事例**

1) **次世代エネルギー開発にかかわる複雑現象予測**
2) **バーチャルデザインの基盤となる高精度性能予測**
3) **医療･材料･社会工学など複合分野への応用**

「京」HPCI **開発**　（文科省によるプレス発表　H22．1．22）

分野	FS実施期間（上段）、統括責任者（下段）
分野1 予測する生命科学･医療および創薬基盤	理化学研究所 柳田　敏雄（特任顧問）
分野2 新物質･エネルギー創成	東京大学物性研究所 常行　真司（教授）
分野3 防災･減災に資する地球変動予測	海洋研究開発機構 今脇　資郎（理事）
分野4 次世代ものづくり	東京大学生産技術研究所 加藤　千幸（教授）
分野5 物質と宇宙の起源と構造	筑波大学計算科学研究センター 青木　慎也（教授）

「京」HPCI　分野4「ものづくり」

「２１世紀のものづくりを抜本的に変革する計算科学技術の戦略的推進」

[Ⅰ]	プロダクトイノベーション	社会基盤・民生機器の抜本的高効率化・小型化・静音化を実現する革新技術創出支援システムの研究開発
		① 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化の実現（JAXA,九大,東芝,他） ② 次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発（物材研,企業ｺﾝｿｰｼｱﾑ）
[Ⅱ]	プロセスイノベーション	未来社会へ向けた価値の創造・製品化プロセスを抜本的に加速する次世代設計システムの研究開発
		③ 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発（東大,北大,企業ｺﾐｭﾆﾃｨｰ） ④ 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発（JAXA、東北大、企業ｺﾝｿｰｼｱﾑ）
[Ⅲ]	安心・安全社会の構築	大規模プラントの信頼性を抜本的に向上させる次世代安全性・健全性評価システムの研究開発
		⑤ 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発（JAEA、東大、JAXA、他） ⑥ 大規模シミュレーションに基づく核融合施設の次世代設計手法の研究開発（NIFS、JAEA、京大、電中研

資料提供：最先端シミュレーション技術関するジョイントシンポジウム　（東大・加藤氏2010.07.29）

・オープンソース化による非独占的な利益還元

4. オープンソースCAEの教育的価値

文部科学省IT基盤構築のための研究開発
「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」 (2005-07)
FrontFlow/red **開発にかかわる人材育成**
・学位研究 8名 (うち 社会人1, 論文博士2)
・研究員(PD) ＋技術者(開発ベンダー) → 大学・公的機関8, 企業5・起業1

現在の開発機関 **北大・京大・東理大・九大・広島大・電中研 ほか**
数値フローデザイン社(Ver.3.1), **アドバンスソフト社**(ver.3.0)

・オープンソースを介した知識普及
大学公開ソフトウェア(*FrontFlow/red* ver.3.1 **北大**) → **約**200**サイト** (うち過半数が企業)

・アカデミックでの産学連携
機械学会研究分科会 RC-D4(2008-09), RC-D9(2010-11), RC(2012-13) ～ **企業**18**社**

・産業分野コンソーシアム
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会／計算科学振興財団 (参加企業 約150**社)**
「京」HPCI **分野**4**「ものづくり」: サブテーマ「自動車空力」「火力発電燃焼」コンソーシアム**

学際大規模計算機システム

北大情報センター 2011.11**より運用開始**

北海道大学アカデミッククラウドのグランドデザインについて (北大･棟朝氏 2010.12.6)

•オープンソース情報を介した詳細知識普及

5．オープンソースCAEの将来

「京」級HPCにおいて，
CAE技術の実用化をどのように図るか？

- 100億要素規模の超大規模シミュレーション
- 数1000ケース規模の最適化シミュレーション

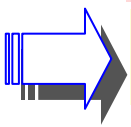
} 10年後の普及技術

汎用的な数学モデルの抽出

- 数値計算法･物理モデルの標準化
  - 保存方程式系連成モデルの一般化
  - 物理解の不連続性モデルの一般化
  - ほかにも･･･？

個別分野ごとのプログラム技法の改良努力には限界

- 「京」級HPCにおける他分野とのモデル知識の共有



- **シーズ共有のためのオープンソース公開** ：CAEシーズ
- **オープンソース化による非独占的な利益還元** ：CAEニーズ
- **オープンソース情報を介した詳細知識普及** ：CAE人材