

レジュメ

- CFD
 - AA&S 流体ソルバー AEOLUS
 - AA&S 電磁流体解析ソフト GSMAC-SOLID
 - AA&S 電磁流体解析ソフト GSMAC-MHD
- Special
 - レーザー溶接シミュレータ
 - Level set法による鋳造プログラム
 - 乱流(剥離)DNSシミュレーション
 - SPH法に関する調査報告
 - Mesoscopic simulationについての提案
- Phase-Field法
 - AA&S Phase Field法 計算ソフト
 - AA&S Phase Field of Steel 計算ソフトのご紹介
 - Phase Field法によるBaTiO₃系強誘電材料マルチスケール数値シミュレータ
- SPM
 - AA&S 走査型トンネル顕微鏡像シミュレータ
 - STMのドーパント原子によるCorrugation amplitudeの数値計算手法
 - 極微細トランジスタ設計を視野にいたした表面電子状態シミュレーション
 - STMシミュレータのご提案
 - AA&S 古典分子動力学法計算ソルバー
- 新エネルギー等
 - AA&S 反応速度解析ソルバー
 - 電池の数学的モデルについて
 - リチウムイオン電池起電力計算シミュレータ
 - 太陽電池

Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F

TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100

URL: <http://www.aasri.jp/>

[商品シミュレータ名]

AA&S 流体ソルバーAEOLUS

燃焼解析

気液2相流

[商品紹介とご提案]

多くの物質や固液気体の各相が混じり合い、また相変化や化学反応などの過程が複雑に絡み合う系は、天然に多く観察されます。一方、溶接の様な加工プロセスなどにおいてもみることができます。これらの系はその複雑さ故に計算が困難であり、有効な計算技術の確立が求められてきました。

ご紹介するソルバーは、そのような数々の現象をCIP+GCUP による統一的な手法で解くことを目指しています。

<応用範囲 多相, 高速流, その他の過程を含む流体>

- ・衝撃波を伴う亜/超音速気流
- ・ガスの燃焼
- ・金属の加熱溶解/蒸発 など

これら以外の系でも、ご相談に応じて物理過程の調査とソルバーの変更を行うことが可能です。

このソフトの特長は、お客様が解明されたい現象に特化し、必要・十分な機能のみを組み込み、大幅なコストダウンを実現できることです。

	単相・単純	多相・複雑
低速流	非圧縮性乱流 熱対流	気液2相流 燃焼解析 粉体流
高速流	圧縮性乱流 高速飛翔体 高速鉄道	レーザ加工・溶接 爆発・爆轟 プラズマ

AEOLUSが志向

表：AEOLUS の有効活用が見込まれる領域。

[計算方法 CIP+GCUP法]

ナビエ・ストークス方程式を部分段階法によって解きます。移流項にはCIP 法、圧力方程式にはGCUP 法を採用しています。これにより、物理量が空間的・時間的に大きく変動する系に対して、高精度なシミュレーションを目指しています。

CIP 法は、移流項を差分化せず、格子点上の値と微分値に対する補間関数を移動させる方法で、高精度な流れの計算を実現します。また、BFC+CIP 法も適用することで、曲がった境界を持つ系に対応することが可能です(適用事例①②)。

そして、GCUP 法は、圧力方程式を熱力学量である状態方程式と整合させて解く方法です。これによって、様々な物質や相が混在し、物理量の時間・空間変化が激しい状況にも安定した計算が可能となります(適用事例③④)。

Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F
TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100
URL: <http://www.aasri.jp/>

[商品シミュレータ名]

AA&S 電磁流体解析ソフト GSMAC-SOLID

[商品紹介とご提案]

流体と固体が互いに影響を及ぼしあいながら時間発展する様子は、自然界のいたるところで観察されます。例えば、魚の遊泳や鳥の飛翔などがその典型です。これらは、流れによる固体の変形と固体の変形に伴う流れの変化が連動することにより生まれる複雑な現象と言えます。

今回ご紹介致しますのは、二次元の流体-固体連成問題を、慶応大学で棚橋先生が開発されたGSMAC(Generalized-Simplified Marker and Cell)有限要素法に基づいて数値的に解析するソフトウェアです。なお、本ソフトウェアでは、流体モデルには、非圧縮性Newton 流体を、また、固体モデルには、歪みが小さい場合は、St.Venant-Kirchhoff 体を、また、歪みが大きい場合は、Mooney-Rivlin 超弾性体を採用することができます。

本ソフトウェアは、工業分野における、タイヤのドロプレーニ

ング現象、原子力分野における、ナトリウム流による構造体の励振、あるいは、生体工学の分野における、生体組織（血管壁、心臓弁、眼球網膜、等）の運動などのような、流体と軟らかい固体の連成現象の解析に特に適しています。（様々な問題に対応するために、棚橋先生のご指導の下、本ソフトウェアのカスタマイズ作業も行わせていただきます。）

解析対象

二次元の流体-固体連成問題

計算方法

GSMAC 有限要素法

連続体モデル

非圧縮性Newton 流体
St.Venant-Kirchhoff 体
Mooney-Rivlin 超弾性体

応用範囲

タイヤのドロプレーニング現象の解析
ナトリウム流による構造体の励振
生体軟組織の運動解析
など

Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F

TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100

URL: <http://www.aasri.jp/>

[商品シミュレータ名]

AA&S 電磁流体解析ソフト GSMAC-MHD

[商品紹介とご提案]

導電性を有する流体は、流体の速度場と電磁場の間の相互作用の影響で、通常の流体では見られないような興味深い挙動を示すことが知られています。電磁流体力学 (Magneto Hydro Dynamics、略して MHD) は、このような電磁流体に起こる現象を対象とした学問です。MHD が扱う流体は、主に、圧縮性のあるプラズマなどの電離気体や、非圧縮性を仮定できる液体金属に分類されます。

今回ご紹介致しますのは、MHD における三次元の非圧縮性電磁流体を数值的に解析するソフトウェアです。本ソフトウェアでは、流体解析には慶応大学で棚橋先生が開発された GSMAC (Generalized-Simplified Marker and Cell) 有限要素法を、電磁場解析には辺要素有限要素法を用いています。また、流体-電磁場連成系の解析は、いわゆる、弱連成法で行っています。

本ソフトウェアは、例えば、電気工学分野における、液体金属を用

いた MHD 発電の研究開発、工業分野における、溶接プロセスの解析、鉄鋼分野における、材料電磁プロセッシング (Electromagnetic Processing of Materials) の解析、あるいは、原子力工学分野における、ALIP (Annular Linear Induction Pump) 型電磁ポンプの設計などの場面でその能力を発揮することが期待されます。**(様々な問題に対応するために、棚橋先生のご指導の下、本ソフトウェアのカスタマイズ作業も行わせていただきます。)**

解析対象

MHD における三次元非圧縮性電磁流体

計算方法

流体解析 : GSMAC 有限要素法
電磁場解析 : 辺要素有限要素法

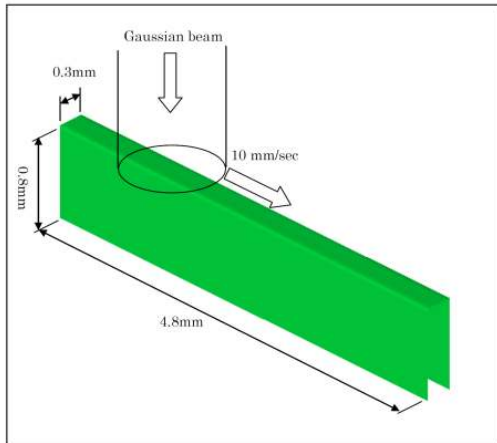
流体モデル

非圧縮性 Newton 流体

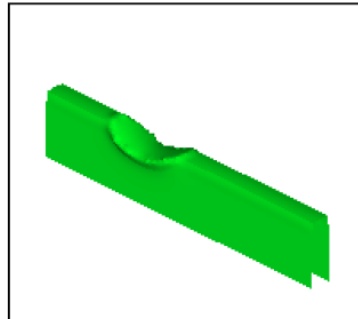
応用範囲

液体金属を用いた MHD 発電の研究開発
溶接プロセスの解析
材料電磁プロセッシングの解析
ALIP 型電磁ポンプの設計
など

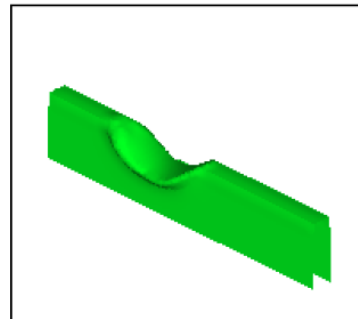
レーザー溶接シミュレータ



$t = 0.04[\text{sec}]$



$t = 0.08[\text{sec}]$



3次元形状に対するレーザービームによる加熱溶解を解析するソフトです。「ニッケル基耐熱合金薄板溶接に対するレーザー光スポット形状の最適化」のために、薄板上にレーザー光を照射し溶接する際の溶融部分の挙動を解析するべく必要と思われる物理現象の要素を、数値的に処理する方法をご提供します。

AA&S製品では、要素を以下の5領域に分けており、数値的に処理を行うことが可能です。

- | | |
|-------------|-------------|
| 領域1 気相 | 領域4 液相-固相界面 |
| 領域2 気相-液相界面 | 領域5 固相 |
| 領域3 液相 | |

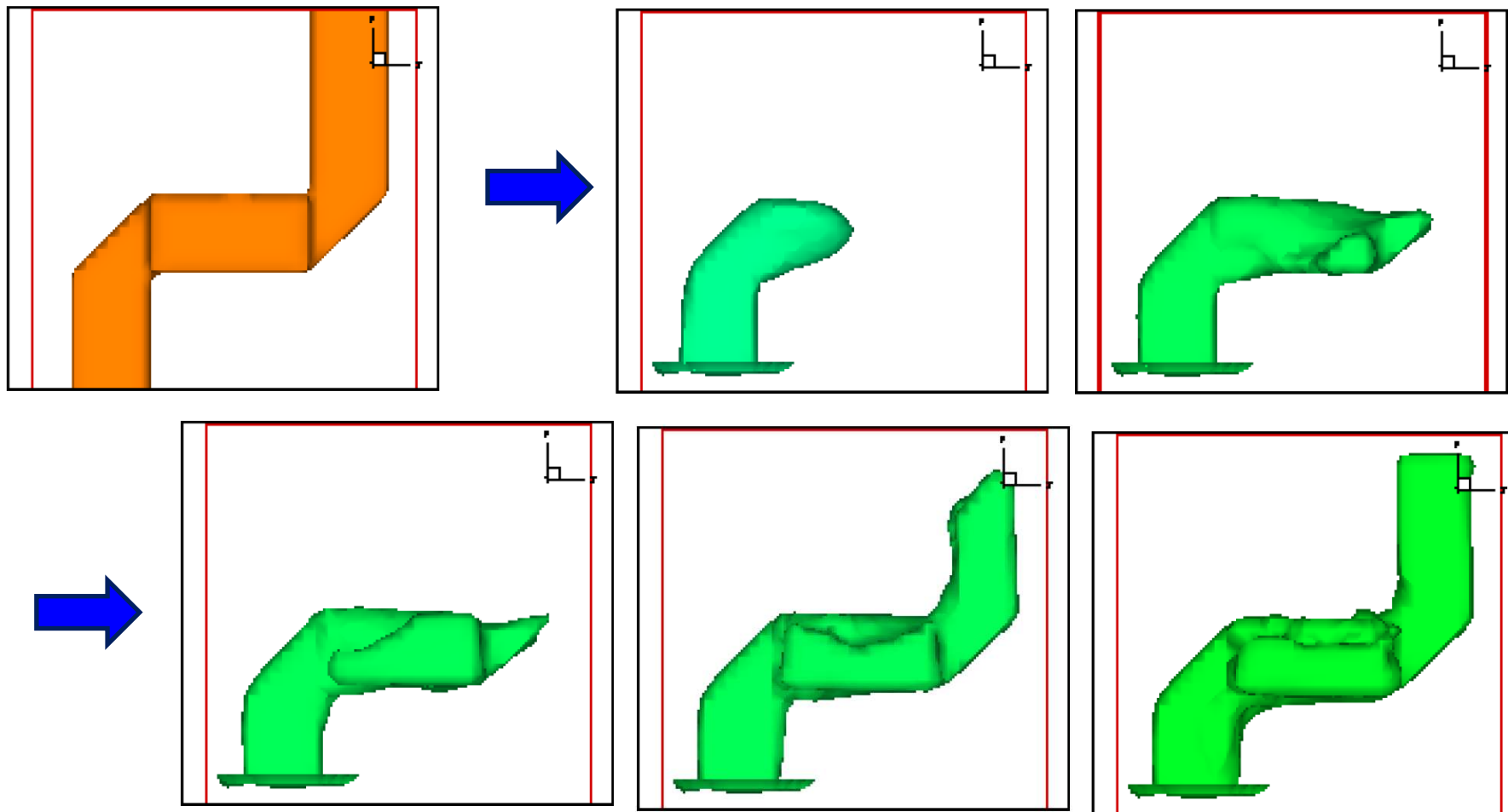
- [カタログ\(PDF形式\)](#)
- [計算事例\(PDF形式\)](#)
- [レーザー溶接のモデル](#)
- [レーザー溶接のマニュアル](#)

Level set法による鑄造プログラム

鑄造における物理過程を計算するプログラムです。レベルセット法を利用し、複数材質の界面を表現することで、内部の熱の分布や形状の変化をうまく捉え、鑄造工程の改善などに役立てることが可能です。

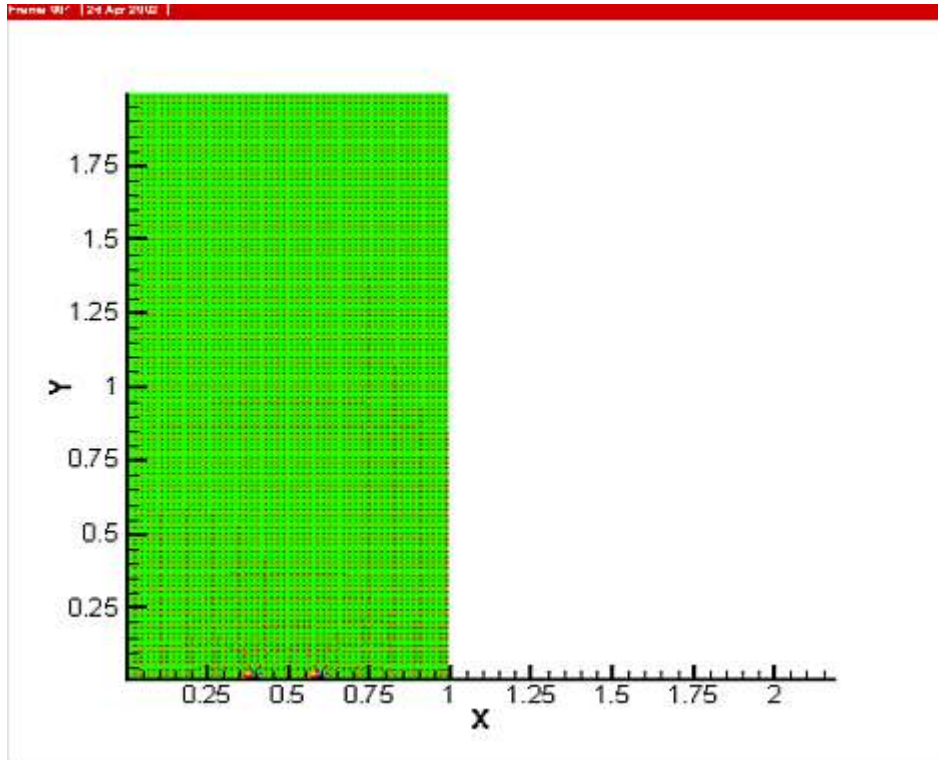
→ [Level set法による鑄造プログラム\(PDF形式\)](#)

水を鉄の鑄型に充填する様子



乱流(剥離)DNSシミュレーション

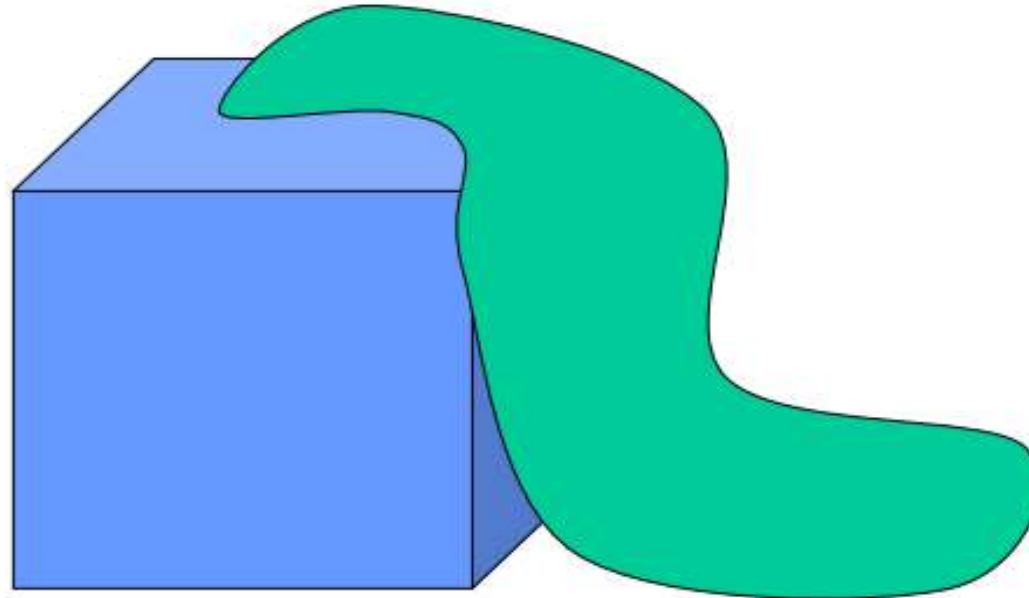
SPH法に関する調査報告Ⅱ



動画は[こちら](#)から(avi)

Mesoscopic simulationについての提案(ストークス動力学)

次段の製膜プロセスのSimulationに必要な
Colloidal suspension のレオロジー特性を
Stokesian dynamicsからもとめる。



Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F

TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100

URL: <http://www.aasri.jp/>

[商品シミュレータ名]

AA&S Phase Field 法 計算ソフト

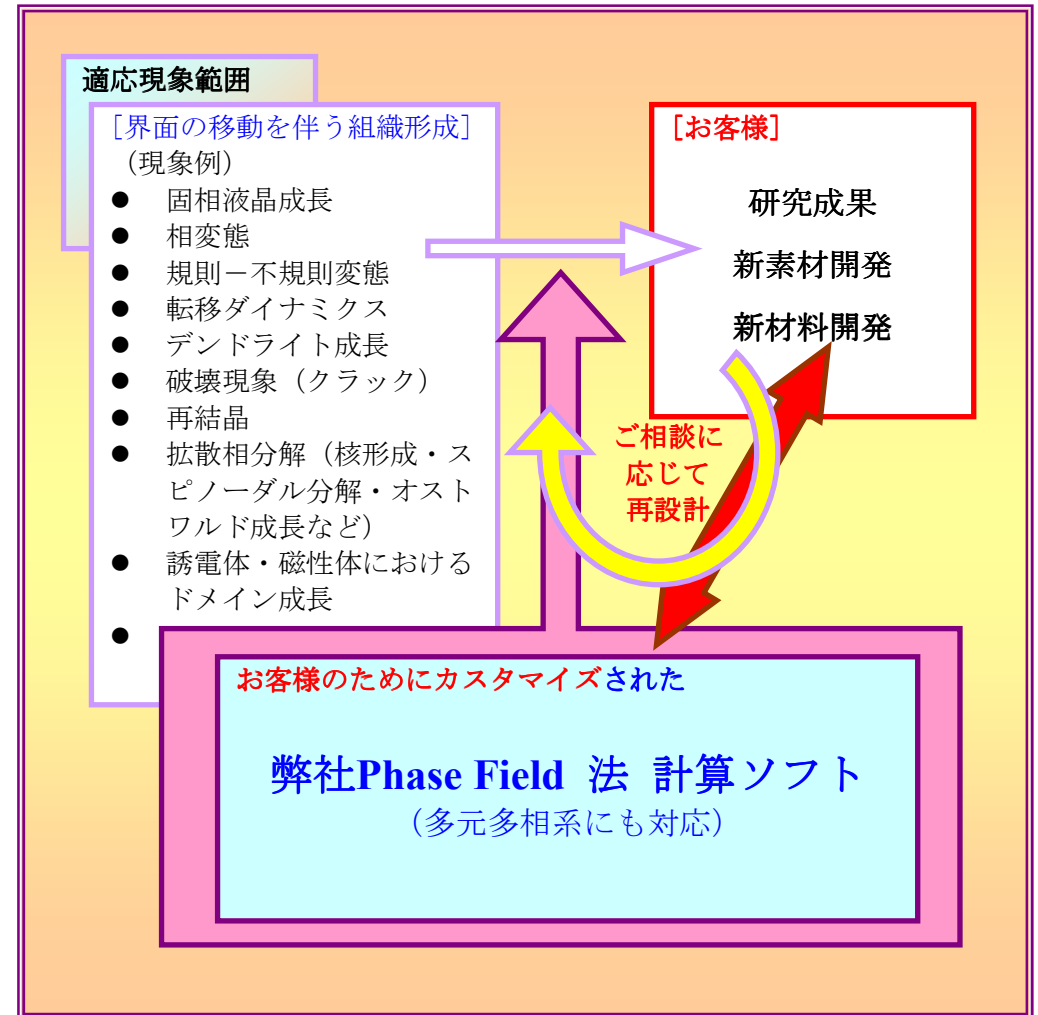
(ナノ材料設計を支援するシミュレーションソフト)

[商品紹介とご提案]

温度・圧力・不純物含有量などを創製プロセスにおいてコントロールし、優れた特性を持つ材料を製造することが材料開発の鍵となります。とくに、材料物性の決定には、構成物質間のナノスケールにおける幾何学的構造が重要です。

Phase-Field 法は、その様なナノスケールにおける構成物質間の相界面ダイナミクスを計算します。この計算を支える理論的枠組みは、系の全自由エネルギーをベースに界面の動力学を表現する極めて一般的なものであり、そのため、その適応範囲は材料組織学全般の“**界面の移動を伴った**”多種多様な組織形成にわたります。例えば、 dendrite 成長・拡散相分解・各種ドメイン成長・クラックの進展・固相結晶成長・再結晶・・・などの現象をカバーしており、新材料・新素材開発において非常に有力な手段となります。

弊社ソフトは、多元多相計算ができる極めて汎用性が高いものであり、**お客様の取り扱う現象にあわせた解析ソルバーの再設計が可能です。**また、創製プロセスを忠実に実現するための外部パラメータなどの変化・組織形成過程における各種物性の評価などの付加についても、ご相談に応じさせていただきます。



Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F
TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100
URL: <http://www.aasri.jp/>

[シミュレータ名]

AA&S Phase Field of Steel 計算ソフトのご紹介

(ナノ材料設計を支援するシミュレーションソフト)

[デモ1](#) [デモ2](#)

[商品紹介とご提案]

特に需要が大きいSteel 開発に特化したPhase Field Solver を提供します。Steel の持つ固有の問題を処理するための特別な仕組みを採用しています。現在の段階では、取り扱えるPhase および、Component は限られていますが、随時拡張し、お客様のニーズを満たすものにアップデートしていく予定です。またここで培ったノウハウは随時、弊社開発のより一般的な系を対象としたAA&S Phase Field へも組み込む予定です。

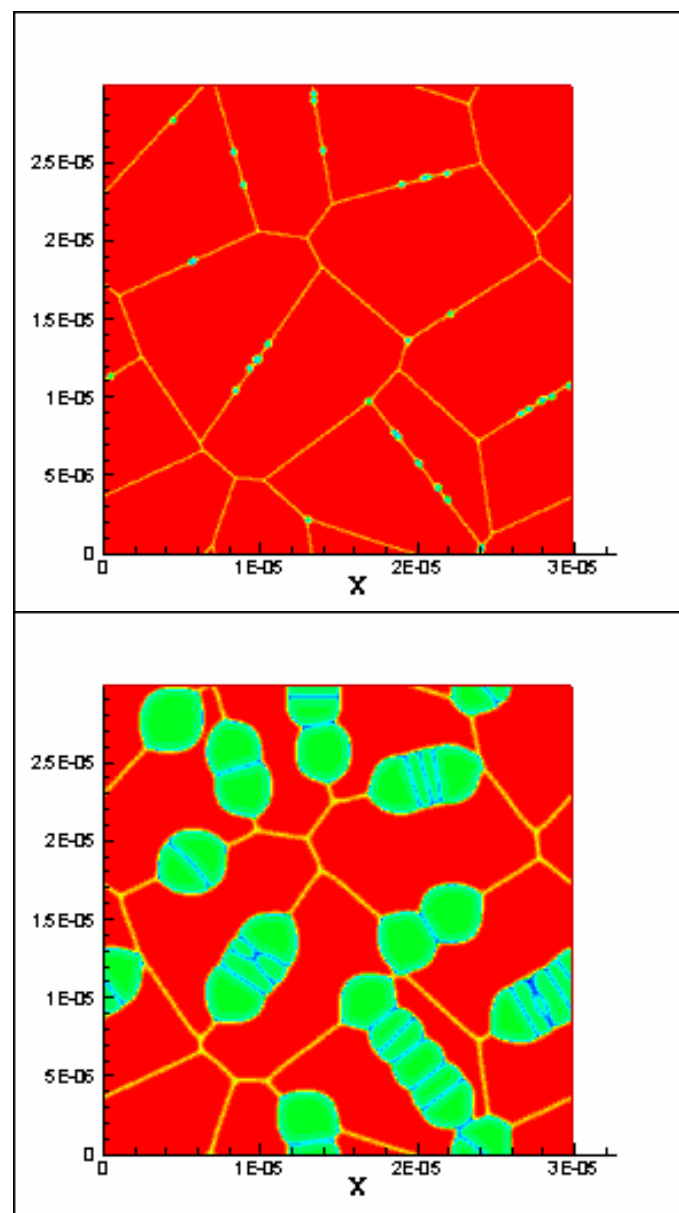
現段階では、扱える相は α 相（フェライト）、 γ 相（オーステナイト）でCarbon-Steel のみが対象です。Secant 法による力学特性計算を装備しています。

[モデル・用語説明]

今回の実装ではより粗いグリッドにおいてより正確に相界面の動力学を計算しうることを期待してI.Steinbach らによるPhase Field Model (the multi domain model)を採用しました。またPC による大規模計算を可能にする技術を導入しています。

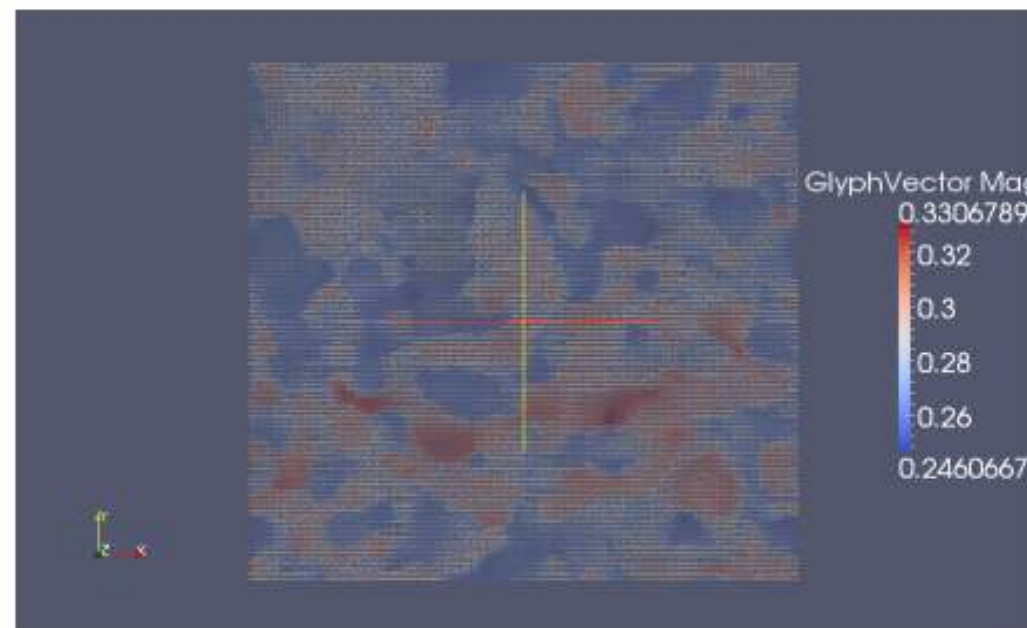
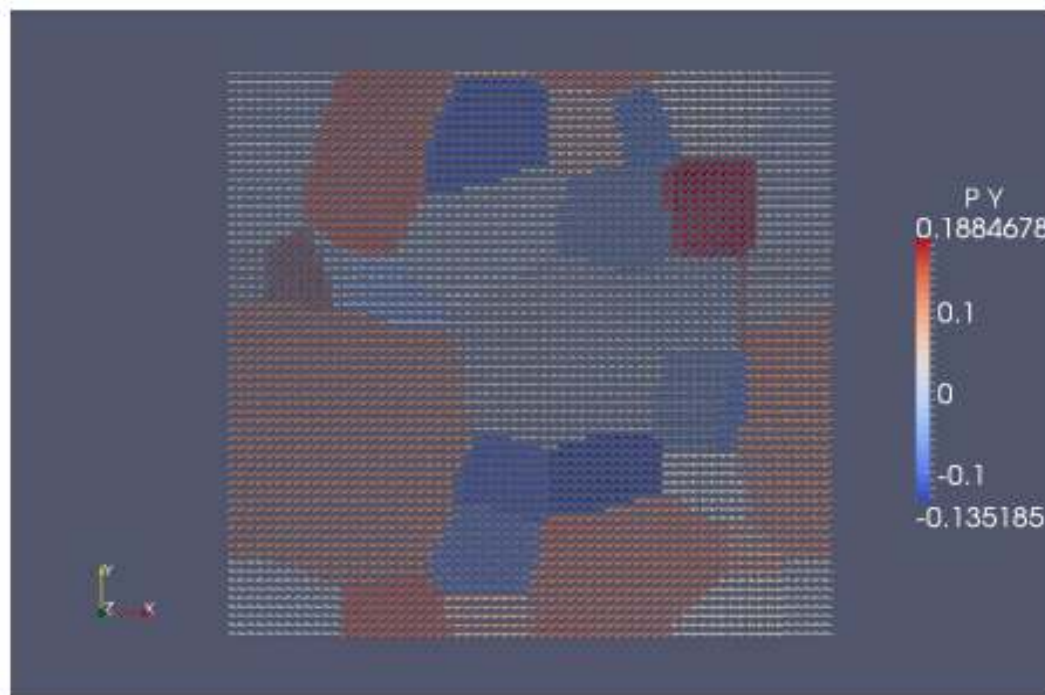
[シミュレーション結果]

Austenite からの ferrite の析出（緑色がフェライトを表す）



Phase Field法によるBaTiO₃
系強誘電材料マルチスケール
数値シミュレータ

クラック(亀裂)機能追加



Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F

TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100

URL: <http://www.aasri.jp/>

[商品シミュレータ名]

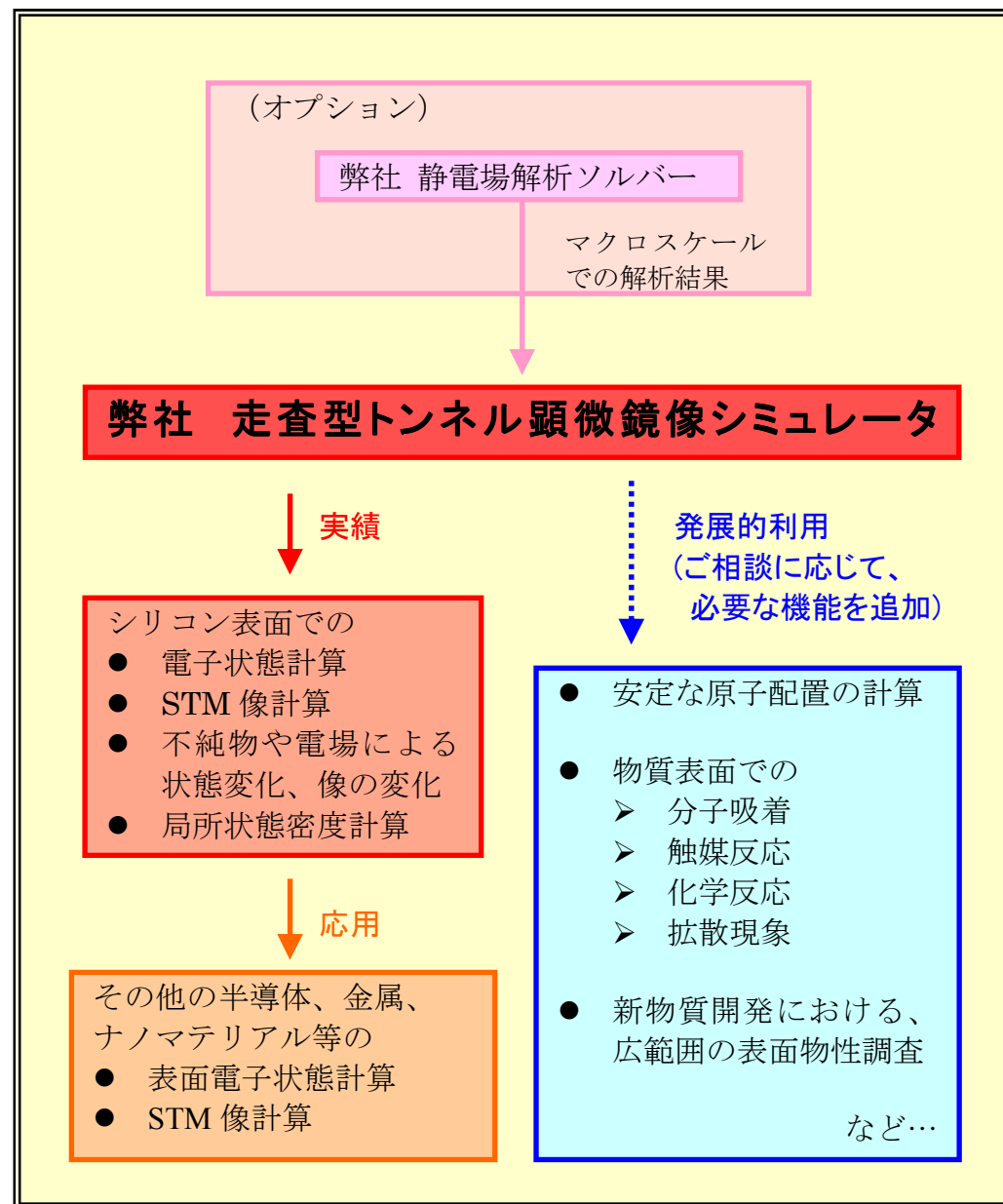
AA&S 走査型トンネル顕微鏡像シミュレータ

[商品紹介とご提案]

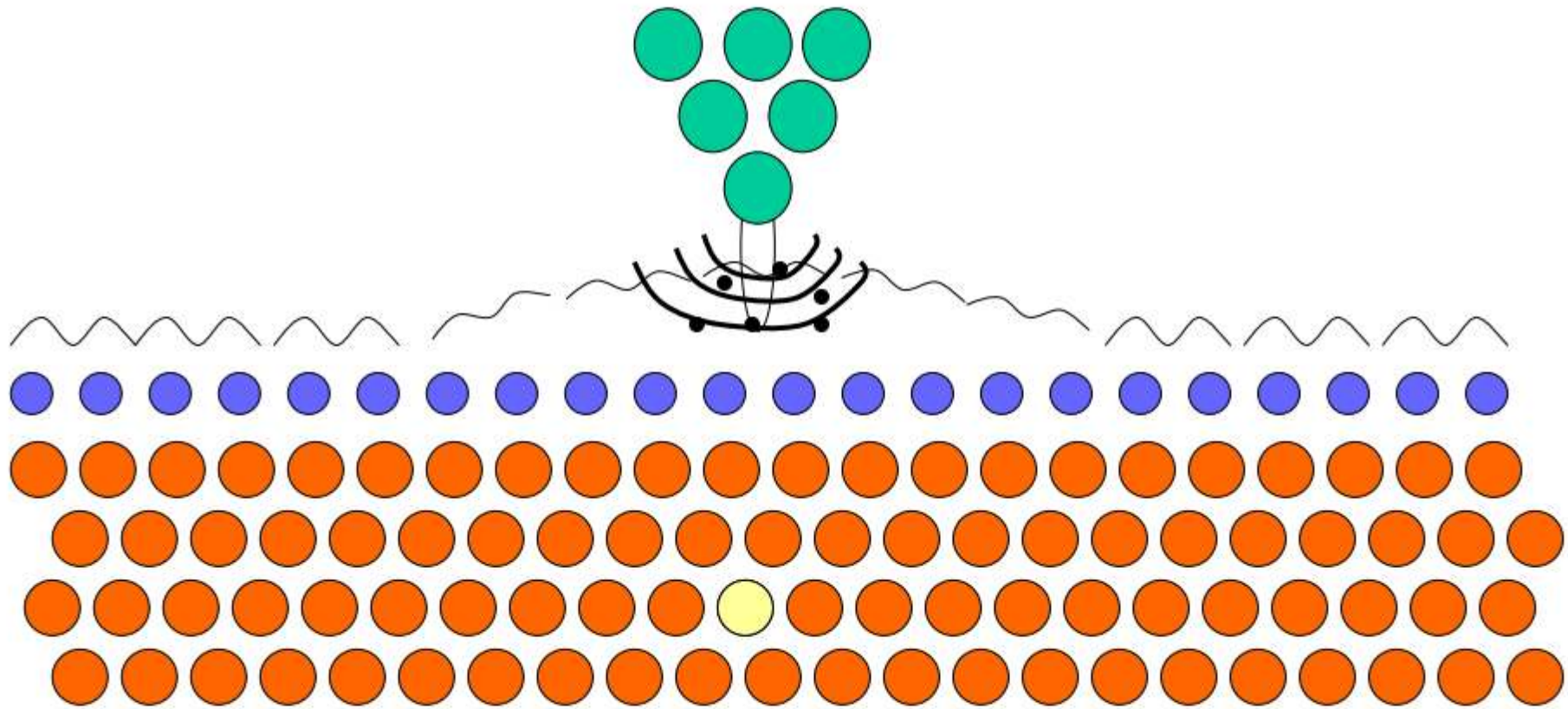
走査型トンネル顕微鏡 (Scanning Tunneling Microscope ; 以下STM と略記) は、今や、物質表面のナノスケール構造や物性を研究するのに欠かすことのできない技術となっています。しかしSTM での測定結果を正しく解釈するためには、理論的な解析、すなわち、定量的に信頼できる高精度の表面電子状態計算が必要となります。

このような目的のために、弊社では、STM 像シミュレータを開発いたしました。現在、シリコン表面での電子状態計算やSTM 像計算などを行うことに成功しております。もちろん、シリコン以外の半導体、金属、ナノマテリアル等の表面電子状態計算、STM 像計算などへもご利用いただけるものと考えております。

また弊社では、本シミュレータの販売だけでなく、新たな機能の追加などのご要望につきましても、文献調査の段階からお受けしております。お客様のニーズにあわせたシミュレータをご用意いたしますので、まずはお気軽にご相談ください。



STM(Scanning Tunneling Microscopy)
のドーパント原子による
Corrugation amplitudeの数値計算手法



極微細トランジスタ設計を視野 にいたした表面電子状態シミュ レーション

Advanced Algorithm & Systems

STMシミュレーターのご提案

Advanced Algorithm & Systems

SPM

English

Japanese

[SPMワールド](#)

[SPMの活用及び普及促進](#)

[SPMご提供の要領](#)

(ご利用希望者各位・ご相談窓口)

[SPMガイドブック](#)

[マニュアルリストと活用ガイダンス](#)

[SPMコンセプト構成要素](#)

[日本発・世界標準仕様版SPMシミュレータ](#)

[SPMソルバーの計算事例](#)

Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F

TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100

URL: <http://www.aasri.jp/>

[商品シミュレータ名]

AA&S 古典分子動力学法計算ソルバー

[商品紹介]

古典分子動力学法(以下、単に、分子動力学法と呼ぶ)は、系を構成する分子や原子一つ一つの古典力学的運動を元に、系の集団的振る舞いを調べる手法です。例えば、凝縮系・流体系のマクロな物性値(比熱、弾性定数、熱伝導率など)や相転移現象、生体高分子のような巨大分子の安定構造の決定、動的挙動の解析などの研究に広く用いられております。また、この手法は、実験が困難な環境での現象の解明はもちろんのこと、新素材のもつ物性を実験に頼らず予測することができます。よって、分子設計や材料設計にも用いることが可能です。

本カタログでは、弊社の保有する、分子動力学法における解析技術を紹介いたします。以下に述べますように計算原理は非常に単純ですので、計算例として挙げたもの以外の系につきましても、お客様のご要望に叶うソルバーをお作りすることが可能となっております。弊社では、文献調査の段階からのご依頼を承っておりますので、まずはお

気軽にご相談ください。

[対象となる系]

凝縮系 流体系 ナノマテリアル 生体高分子 など

[解析例]

- 安定構造
- 動的挙動
- 相転移(融解、結晶化、表面再構成、凝縮、蒸発)
- 物性値(比熱、電気伝導度、弾性定数、熱伝導率、拡散係数、粘性係数)
- 力学的特性(摩擦、ひっぱり、変形、ひび割れ) など

弊社 古典分子動力学法計算ソルバー
(問題に応じてカスタマイズ可能)

研究成果
分子設計
材料設計

Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F
TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100
URL: <http://www.aasri.jp/>

[シミュレータ名]

AA&S 反応速度解析ソルバー

[背景]

多成分系の反応過程、例えば、

- 種々の化学反応
- 固体中の格子欠陥
- 光励起と発光過程
- プラズマ中のイオン化・再結合反応

などは、多くの理工学的問題（特に、製造プロセスや材料の性能評価など）において重要な役割を果たします。

したがって、これらの反応過程の精度良いシミュレーションによって、大きなアドバンテージを得ることができます。

しかしながら、各反応種の濃度などの振る舞いを知りたい場合、反応速度論という確立された理論が存在するものの、

- 入力すべき反応過程が多彩で複雑である
- 数値的に不安定になりやすい

という難点がございます。

本ソルバーにおきまして、すでにこれらの難点を克服することに成功しておりますので、ここにご紹介いたします。また、より高度な機能の追加について、ご提案いたします。

[ご紹介・ご提案]

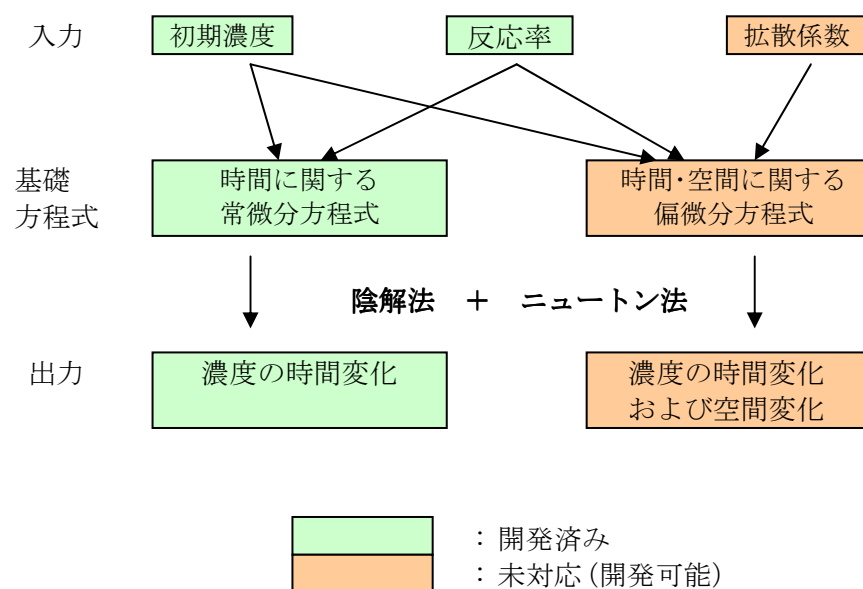
お客様のニーズに合わせて、必要となる反応過程を調査し、ソルバーに組み込むことができます。

（以下でご紹介致します照射欠陥の例では、数十種類の反応種を考慮しております。）

また、反応速度論の基本方程式における数値的な不安定性を回避するため、陰解法を用います。

（照射欠陥の例では、陰的（後退）オイラー法を用いております。）

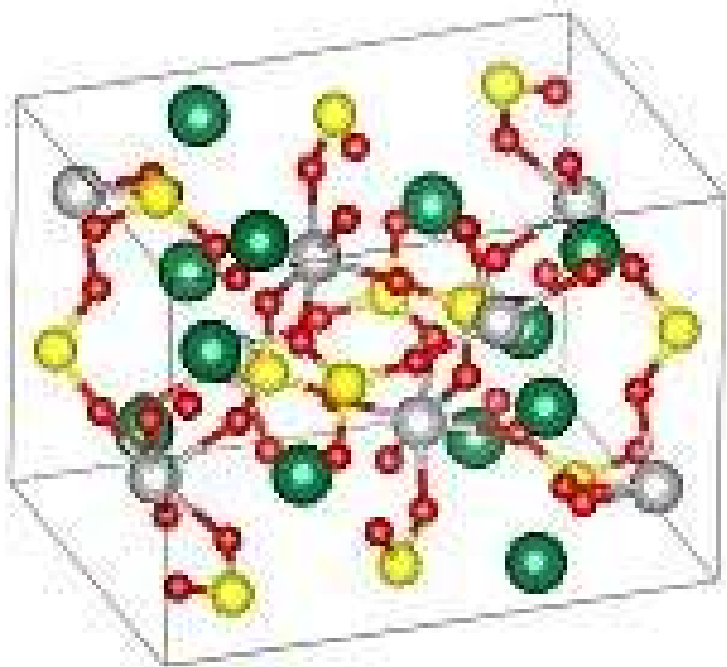
さらに、お客様のご要望にお応えして、空間依存性を考慮し、拡散項を付け加えるなど、より高度な機能を追加することができます。



電池の数学的モデルについて

あらましとシミュレーションによる
デモンストレーション

リチウムイオン電池起電力計算シミュレータ



リチウムイオン電池の起電力を計算するシミュレータです。

電池反応に伴って変化する結晶のエネルギーをMOPACにより計算し、

電気化学量論に基づいて起電力を算出します。

別途、MOPACのインストールを必要とします。

- [計算原理説明書\(PDF形式\)](#)
- [操作マニュアル\(PDF形式\)](#)
- [計算事例\(PDF形式\)](#)

「薄膜シリコン太陽電池製作用プラズマCVD シミュレーション」に
関する技術調査

太陽電池 I -V特性に関する調査報告書

Solar Cellデバイスシミュレータの御提案
プログラム基本設計仕様書

有機薄膜太陽電池材料の評価基盤技術開発