

Boundary-Fit法による流体・電磁解析

三木 一克, 梅垣 菊男, 田子 一農
(株) 日立製作所 エネルギー研究所

航空機の流体解析の分野で開発されたBoundary-Fit法は、境界形状に沿った曲線座標格子を自動的に生成でき、また領域全体にわたって格子の配置を制御できるため、複雑な境界形状内の物理現象を高精度に解析でき、また解析に要する作業量を大幅に低減できる。このため、本手法は、一般の熱流体機器内の流体解析のほか、電磁解析、構造解析、伝熱解析など、急速に応用範囲が拡大しつつある。

本報告では、Boundary-Fit法の概要を説明するとともに、流体解析への応用を熱交換器内の三次元解析及び回転移動境界内の二次元解析の例をあげて、また、電磁解析へ応用を、カラーブラウン管電子銃内の三次元電子軌道解析及び二次元半導体デバイスシミュレーションの例をあげて紹介する。

Fluid Dynamics and Electromagnetics Simulations by Boundary-Fitted Coordinate Transformation Technique

Kazuyoshi MIKI, Kikuo Umegaki and Kazutami Tago
Energy Research Laboratory, Hitachi, Ltd.
1168 Moriyama, Hitachi, Ibaraki, 316 Japan

Boundary-fitted coordinate transformation technique was developed in computational fluid dynamics for airplanes. It has capabilities to automatically generate a boundary-fitted curvilinear coordinate system and to control the system in the entire field, which lead to precise physical simulation in complicated geometries and to reduction in data preparing time. Therefore, the technique has been applied to electromagnetics, solid mechanics, and heat & mass transfer as well as fluid dynamics.

The present report describes the outline of this technique and shows our some applications in fluid dynamics and electromagnetics, such as 3-D and 2-D flow analyses in a heat exchanger and a rotating machinery, 3-D electron beam trajectory analysis in an electron gun of a color picture tube, and 2-D semiconductor device simulation.

1. はじめに

最近の電子計算機の飛躍的な発展により、計算機を高度に利用して製品性能を高精度に予測することが可能となり、新製品の開発や従来製品の大幅な改良などに効果的に活用されつつある。計算機により連続系の物理現象を数値的に解析する数値シミュレーションにおいては、物理現象を支配する偏微分方程式を解析領域内にとった多数の座標格子点で離散化し、連立1次方程式または固有値問題の計算に帰着させる方法が多くとられている。この場合、数値解の精度、安定性、収束性の観点から、離散化に際して

- (1) 境界形状を正確に取り扱うこと
- (2) 物理量が大きく変化する領域に格子点を集中すること
- (3) 解析領域全体にわたって格子点をなめらかに配置すること
- (4) 隣接する格子点間の相対関係(計算順序、相対位置など)を最適化すること

といった条件を満たすことが必要となる。特に、工学上の多くの問題では、粘性境界層、応力集中といったように、境界近傍に流速、応力等の物理量の勾配の大きな領域が存在し、領域全体の特性を支配するため、上記(1)、(2)の条件をいかに満たすかが、数値解析上重要となる。

このため差分法では、直方体領域には直交座標格子、円筒領域には円筒座標格子といったように、解析領域の幾何形状に沿った座標格子が適用されている。しかし、一般の複雑な形状に対しては、座標格子が境界と一致しないため(図1(a))、内外挿により境界条件を近似する方法が採られ、数値誤差を生じるという問題がある。一方、座標格子点を任意の空間に配置できる有限要素法では、複雑な境界形状を正確に取り扱うことができるが(図1(b))、特に3次元領域の場合、上記(2)~(4)の条件を満たす座標格子を作成するには多くの経験と作業量が必要とする。

Boundary-Fitted Coordinate Transformation
(1)
Technique(以下、Boundary-Fit法)は、実空間上

の解析領域を直交格子からなる形状の簡単な領域に座標変換し、写像空間で物理現象を支配する偏微分方程式を解く手法である(図1(c))。この方法では、写像空間から実空間への逆座標変換によって、境界形状に沿った曲線座標格子を自動的に生成することができ、さらに解析領域全体にわたって座標格子の配置を制御することができるため、上述した(1)~(4)の条件を容易に満たすことができる。本手法は、1970年代の後半に、航空機の流体(外部流れ)解析法として開発され、その後、一般の熱流体機器内の流体(内部流れ)解析のほか電磁解析、構造解析など、流体以外の工学分野に適用範囲をを広げつつある。(2)

以下では、Boundary-Fit法の概要について述べるとともに、著者らが実施した流体解析及び電磁解析への応用例を示す。

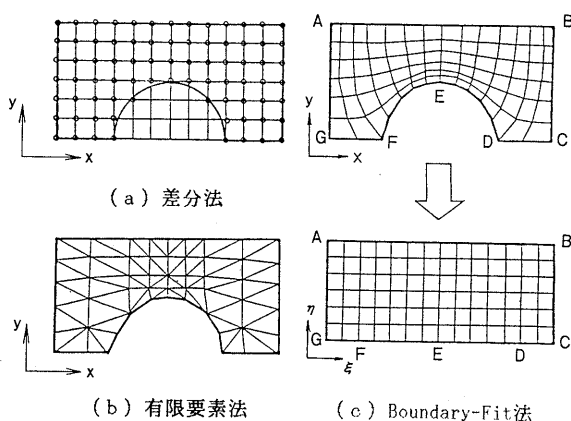


図1 座標格子の比較

2. Boundary-Fit法の概要

2.1 Boundary-Fit曲線座標系

図1に示した2次元領域の座標変換について考える。写像平面上の正方格子点(ξ , η)は、次のポアソン方程式により、実平面上の曲線座標格子点(x , y)に1対1に対応づけることができる。

$$\begin{aligned}\xi_{xx} + \xi_{yy} &= P(\xi, \eta) \\ \eta_{xx} + \eta_{yy} &= Q(\xi, \eta)\end{aligned}\quad (1)$$

物理現象を支配する偏微分方程式は、後述するように正方格子からなる写像平面上で解くため、上記のポアソン方程式の独立変数 (x, y) と従属変数 (ξ, η) を入れ換えると、下記の楕円型偏微分方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} &= -J^2 [x_{\xi} P(\xi, \eta) + x_{\eta} Q(\xi, \eta)] \\ \alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} &= -J^2 [y_{\xi} P(\xi, \eta) + y_{\eta} Q(\xi, \eta)] \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \alpha &= x_{\eta}^2 + y_{\eta}^2, & \gamma &= x_{\xi}^2 + y_{\xi}^2 \\ \beta &= x_{\xi} x_{\eta} + y_{\xi} y_{\eta}, & J &= x_{\xi} y_{\eta} - x_{\eta} y_{\xi} \end{aligned}$$

上式は、ポアソン方程式(1)に比べて関数形が複雑になるが、境界条件を $A'-B'$ 等の直線上で設定することができ、さらに写像平面の格子間隔を単位長さに採ることができるという利点がある。写像平面の格子点 (ξ, η) に対応する実平面の格子点 (x, y) は、 $A'-B'$ 等の境界上の座標値 $(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta))$ をDirichlet境界条件として与え、上式を数値的に解くことにより求めることができる。

図2に $P=Q=0$ として(2)式を用いて生成した曲線座標格子の例を示す。図中、線分AB及びCDは、写像平面の η ＝一定の境界に対応し、また、線分BC及びADは ξ ＝一定の境界に対応する。境界上の格子点の設定方法の違いによって、実平面の領域内部に生成される座標格子の配置が異なる点に注目されたい。

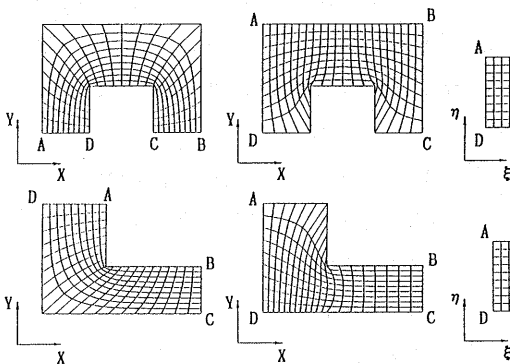


図2 実平面と写像平面の対応関係

上式の関数 P, Q は、格子間隔の粗密を制御する作用⁽³⁾があり、次式で表される。

$$\begin{aligned} P(\xi, \eta) &= -\sum_{i=1}^n a_i \operatorname{sgn}(\xi - \xi_i) \exp(-c_i |\xi - \xi_i|) \\ &\quad - \sum_{j=1}^m b_j \operatorname{sgn}(\eta - \eta_j) \\ &\quad \times \exp[-d_j \sqrt{(\xi - \xi_j)^2 + (\eta - \eta_j)^2}] \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、右辺第1項は $\xi = \xi_i$ の格子線に、また第2項は (ξ_j, η_j) の格子点に周囲の格子を引き寄せる作用をし、それぞれ係数 $(a_i, c_i), (b_j, d_j)$ によってその度合いを調節することができる。なお、 $\operatorname{sgn}(x)$ は x の符号を意味する。

図3に、上式を用いて図2の座標格子を引き寄せた結果を示す。図中、矢印で示した格子点あるいは格子線に周囲の格子を引き寄せることにより、格子サイズが領域全体にわたって一様になることがわかる。

なお、関数 P, Q を用いて、境界面と格子点との距離あるいは境界面と格子線との交差角度を設定値に自動的に調節する方法等も開発されている。図4に、半導体デバイスの電流電圧特性を解析するために生成した座標格子の例を示す。本例では、 SiO_2 の絶縁体境界面の近傍に電流が集中するため、絶縁体境界面近傍に座標格子を集中するとともに、格子線を絶縁体境界面に直交させ、解析精度の向上を図っている。

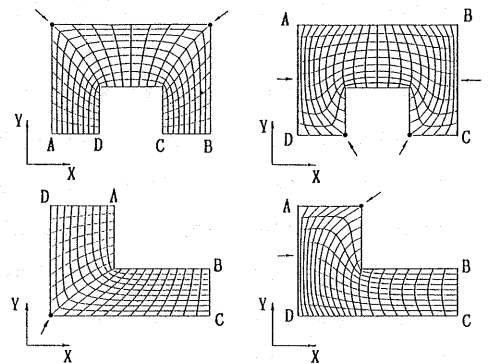


図3 関数 P, Q による座標格子の制御

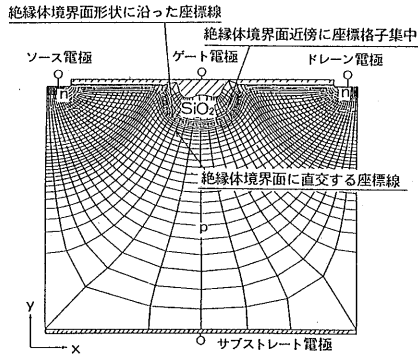


図4 半導体デバイス解析用の座標格子例

2.2 偏微分方程式の変換

解析領域を実平面から写像平面に変換するのに伴って、物理現象を支配する偏微分方程式の独立変数を (x, y) から (ξ, η) に変換する必要がある。例えば、微分可能な任意の関数 f の x, y に関する1次微分は、写像平面上的変数 ξ, η を用いて、次のように表わすことができる。

$$f_x = \frac{1}{J} [(y_\eta f)_\xi - (y_\xi f)_\eta] \quad (4)$$

$$f_y = \frac{1}{J} [-(x_\eta f)_\xi + (x_\xi f)_\eta]$$

正方格子からなる写像平面上で偏微分方程式を解く場合、実平面上的解析領域の幾何形状に関する情報は、1次微分 $x_\xi, x_\eta, y_\xi, y_\eta$ および α, β, γ , ヤコビアン J を通して考慮されることになる。これらの量は(2)式の楕円型偏微分方程式を解き、正方格子点 (ξ, η) に対する曲線座標格子点 (x, y) の1対1対応が求まれば、容易に計算することができる。したがってBoundary-Fit法では、曲線座標格子を生成し、上記諸量を計算する部分と、写像平面上で物理量を計算する部分とを互いに独立にした構成が普通採られる。前者は、流れ場、応力・歪場、電磁場などを支配する偏微分方程式に共通に利用することができ、後者は解析領域の幾何形状とは独立に、写像平面上の正方格子で離散化したアルゴリズムが適用できる。

3. 流体解析への応用⁽⁶⁾

3.1 複合立体内の流体解析

実際の製品形状は一般に、複合の基本立体から構成された複合立体形状をしている場合が多い。このような体系内に三次元曲線座標格子を生成するには、第2.1節で述べた方法を三次元に拡張し、実空間上の複合立体を写像空間上の直方体に座標変換する方法が考えられる。しかしこの場合、境界条件として直方体の6つの表面に複合立体表面を対応させることが難しく汎用性に欠ける。また生成された曲線座標格子の疎密および歪みが大きくなる可能性がある。複雑な三次元領域内に曲線座標格子を生成する有効な方法の一つとして、解析領域をいくつかの部分領域に分け、部分領域ごとに曲線座標格子を生成する方法(Patched Subregions)が開発されている。⁽⁷⁾ この方法の最大の問題点は、部分領域間の境界面で座標格子が折れ曲がり、物理計算における数値誤差を増大させることである。

⁽⁸⁾ この問題点を解決するため、6面体分割法を開発した。以下にその概要を示す。

図5に示すように、三次元領域を複数の部分領域(6面体)に分割し、個々の6面体ごとに作成した曲線座標格子を合成することにより領域全体の座標格子を生成する。その際、6面体間に重複領域を設定し、一方の領域の内部格子を他方の領域の境界上の格子に一致させる。6面体内の座標格子は、重複領域にある隣接する6面体の内部格子を境界条件として、第2.1節で述べた方法を三次元に拡張した方法により求める。この6面体分割法⁽⁹⁾は、関数論の分野で用いられているシュワルツの交替法をBoundary-Fit曲線座標変換法に組み合わせたものと考えられる。この方法では、

- (1) 球、円柱、直方体のような基本立体形状の組合せにより、任意の三次元形状を系統的に取り扱うことができる(図6に円柱、シェル、半球を用いて合成した例を示す)。
- (2) 重複領域の設定により、6面体間の境界面において座標格子線の1次微分連続性が保証され、

前述の数値誤差増大の問題が解消できる。

- (3) 領域分割により計算機記憶容量を低減することができる。

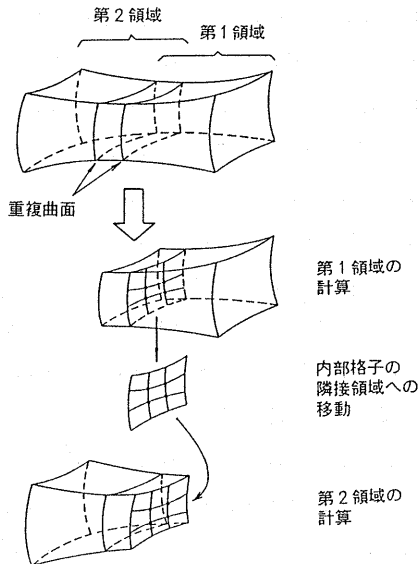


図5 6面体分割法

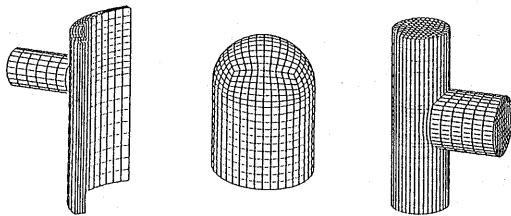


図6 6面体分割法による基本立体の合成

6面体分割法は、三次元の曲線座標格子生成だけでなく、物理計算にも適用できる。

流体解析への応用例として、熱交換器シェル部の非圧縮性流れ ($Re=10^6$) の解析結果を図7に示す。シェル部は管群の配列ピッチが異なる二領域から構成されている。本例では、この管群領域の対称性から60度セクターを対象とし、上部及び下部の配管をそれぞれ1個の6面体に、また、シェル部を6個の6面体に分割した。これにより、計算機主記憶容量は、2個の配管とシェル部の3分割に比べて約1/4に低減できた。熱交換器内の燃焼ガスは、配管内を下降し、バッフル板によって直角に向きを変え、半径方向の外向きに放射状に流れ、さらに、バッフル板と外筒との間隙からシェル部下半部に流入し、半径方向の内向きに寄り集まって、配管から、下方向に流出する。シェル部上半部では、上部案内板の下側で大きな渦が発生し、流入を阻害していることがわかった。本解析によって、上部案内板の内径を最適化し、案内板で二分された流路での流量を均等に配分することが可能となった。

3.2 回転移動境界内の流体解析⁽¹⁰⁾

前述したように、Boundary-Fit法では、曲線座標格子を生成する部分と、写像平面上の正方格子で物理量を計算する部分とを独立に取扱うことができる。後者の計算では、実際の形状は一次微分 x_ξ やヤコビアン J など

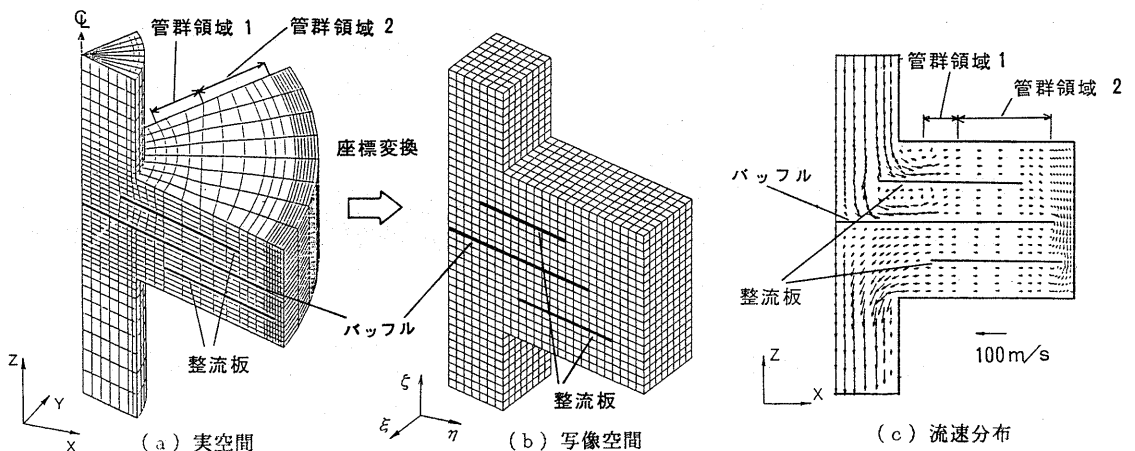


図7 熱交換器内の非圧縮性流体解析結果

により考慮される。したがって、この手法を自由液面の
ように境界形状が時間的に変化する、いわゆる移動境界
問題に適用した場合、一次微分 x_t やヤコビアン J の値
は時間的に変化するが、物理現象は写像平面上の固定さ
れた座標格子を用いて解析することができる。また、移
動する境界に沿った曲線座標格子を各時間ステップごと
に自動的に生成することができる。

移動境界問題に応用した例として、回転する翼まわり
の二次元非圧縮性層流の解析結果を図8に示す。本例で
は内側に6枚の回転翼、外側に6枚のバッフルが存在し、
回転翼は10rpmで回転している。解析体系は対称性を考
慮して1/6セクタを採った。図8は、静止状態から0.5
秒及び1.0秒経過したときの座標格子及び流速分布を
表している。座標格子は移動する回転翼の形状に沿って各
時間ステップごとに自動的に生成される。翼の回転によ
って生じる周方向の流れとともに、翼先端部に局所的な
渦が生じ、さらに翼がバッフルを通過することによって
渦が縮小する様子がわかる。

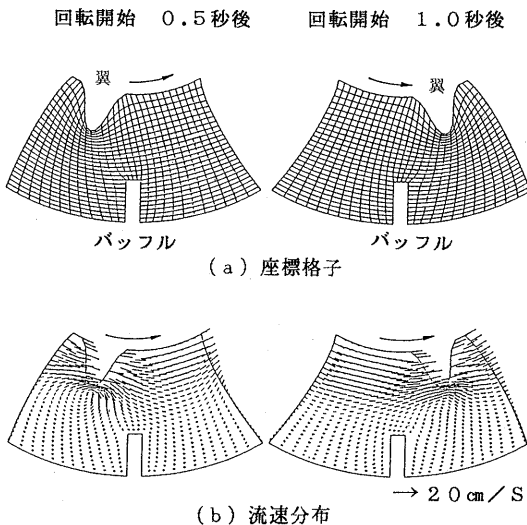


図8 回転体内の流体解析結果

4. 電磁解析への応用 (11)

4.1 カラーブラウン管電子銃の電子軌道解析 (12)

解析対象としたB-U P F型(Bi-Uni Potential Fo-
cus型)電子銃の電極形状を図9(a)に示す。図に示すよ
うにB-U P F型電子銃は、3極部、プリフォーカス部
を形成する3個の電極(K, G_1 , G_2)と主レンズ部を形
成する4個の電極(G_3 , G_4 , G_5 , G_6)からなる。主レ
ンズ部は、 G_3 と G_4 、 G_4 と G_5 、 G_5 と G_6 の間に形成さ
れる3個の複合レンズからなっている。

図9(b), (c)に、領域分割図及び座標格子の鳥瞰図
を示す。本例では、90度セクタを対象とし、全体を27
個の6面体分割した。体系全体の格子総数は、101,
500点であるが、上記分割により、計算機主記憶容量を
分割しない場合の1/6以下に低減し、計算を6MBで
実行可能とした。図9(c)に示すように、座標格子は、
電子ビームによって作られる空間電荷の密度が高い3極
部および、電子軌道が集中する中心軸近傍に集中させ、
解析精度の向上を図った。隣り合う格子点間の距離をメ
ッシュサイズとすれば、z方向のメッシュサイズは、主
レンズ出口付近で250 μm 、カソード近傍で4 μm である。

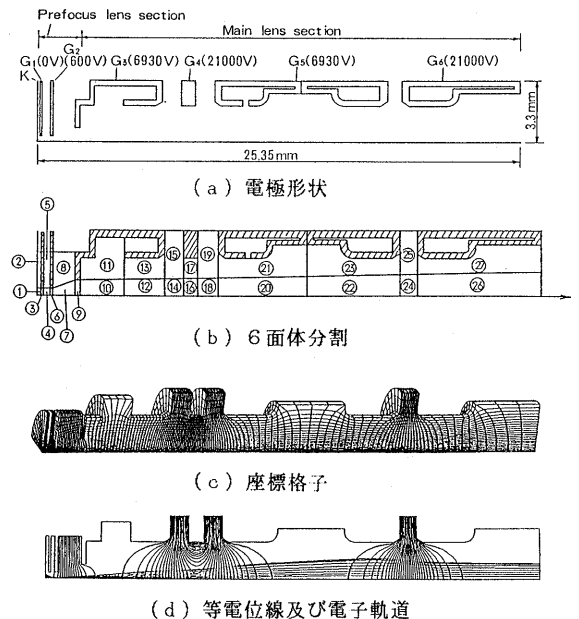


図9 カラーブラウン管電子銃の電子軌道解析結果

図9(d)に、電位分布及び電子軌道を示す。同図と図(c)を比較してわかるように、等電位線と座標格子線はほぼ同じ形状をしている。これは、Boundary-Fit法で使用する座標格子生成方程式と電位方程式がともにポアソン方程式をもとにしていることによる。このように座標格子線を物理量の等高線に近い形状にすることにより、精度の高い解析が可能となる。

主レンズ部を通り、集束力を与えられた電子ビームは、無電界空間部を通過し、スクリーンに到達する。主レンズ部出口での電子の速度及び位置を初期条件として、無電界空間部についても、電子銃と同様の計算を行った結果、スクリーン上のビームスポット径(電流密度分布でピーク値の1/10となる径)は実測値と15%以内の範囲で一致した。

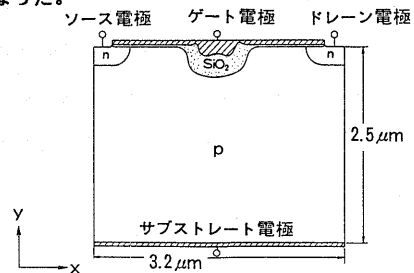
(5) 4.2 半導体デバイスシミュレーション

曲面形状の絶縁体界面を有する、図10(a)に示すようなアイソレーションの寄生MOSFETにおいて、ドレインに $V_D = 5\text{ V}$ を印加し、ゲート電圧を変えたときの電子密度の変化を解析した。基盤アクセプタ濃度は 10^{21} m^{-3} 、ソース、ドレインのドナー濃度はピーク値 $2 \times 10^{26}\text{ m}^{-3}$ である。アイソレーションは、 SiO_2 絶縁膜の下でP形基盤の不純物濃度を高くして、負キャリアが近づきにくいように作成されている。デバイス間の電流の漏れが起こり易い所は、各デバイス共通のゲート電極の下の部分であり、隣合うデバイスの電極の間に寄生するMOSFETを形成する。したがって、図10(a)のように隣接するデバイスの電極をそれぞれドレイン電極とソース電極としたアイソレーション寄生MOSFETの特性を評価することにより、アイソレーションの特性が評価できる。曲線座標格子は図4に示したものをを用いて、境界形状を正確に扱った。本解析例では、曲面境界をはさんで存在する SiO_2 領域を解析領域に含めている。

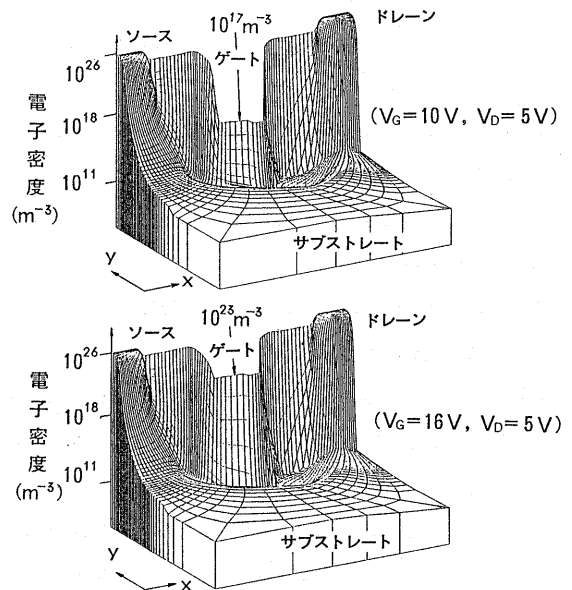
電子密度 n のゲート電圧 V_G による変化を $V_G = 10\text{ V}$ と $V_G = 16\text{ V}$ について図10(b)に示す。 $V_G = 10\text{ V}$ ではゲ-

ートでの n は基盤アクセプタ濃度より4けた小さく、ソースとドレイン間には分離されている。一方、 $V_G = 16\text{ V}$ においてはゲートの電子密度 n が基盤濃度より2けた大きく、ソースとドレイン間には導通している。電流保存の精度については、 $V_G = 10\text{ V}$ のときの微小電流に対しても、電極での流出入電流が $10^{-2}\%$ の差で一致しており、しきい電圧等の解析に適用可能と考える。

チャンネルでの電子密度は急激に変化しており、ドレイン側のpn接合面近傍には空乏層が存在し、電子密度 n はドレインから空乏層にかけて急激に減少する。図4に示した曲線座標格子を用いることにより、このようなドレイン、ゲート付近の急激な n の変化も安定に解析可能となった。



(a) アイソレーション寄生MOSFET



(b) ゲート電圧による電子密度分布の変化

図10 半導体デバイスシミュレーション結果

5. おわりに

航空機の流体解析の分野で開発されたBoundary-Fit法の概要と流体解析及び電磁解析への応用を紹介した。本稿では、複雑な境界形状の取扱いに主眼をおいて説明したが、Boundary-Fit法では、座標格子線に流線、等圧線等の物理的意味を持たせ、物理現象を支配する偏微分方程式を簡単にすることも可能である。また、この手法を発展させて、境界形状だけでなく物理量の変化の大きい解析領域内部に座標格子を自動的に集中するAdaptive Mesh 法が開発され、衝撃波、プラズマシミュレーション等に適用されている。

米国では航空機学会(AIAA)はもとより、機械学会(ASME)においても、これら新しい数値解法を包摂したGrid Generation というセッションが設定されており、急速な勢いで応用範囲が拡大しつつある。我国においても、今後、種々の分野で応用されるものと期待される。

参考文献

- (1) Thompson, J. F., et al., : J. Comput. Phys., 15, 209 (1974) .
- (2) Thompson, J. F. (ed.): "Numerical Grid Generation", (1982), Elsevier.
- (3) Thompson, J. F., et al.: J. Comput. Phys., 24, 274 (1977) .
- (4) Sorenson, R. L., et al.: ASME Fluid Eng. Conf., (1983), 181.
- (5) 田子一農: "Boundary-Fit 座標変換とVoronoi 離散化法を用いた半導体デバイスシミュレーション", 電子情報通信学会 (1987) .
- (6) Takagi, T., Miki, K. : 6th GAMM-Conf. Numerical Methods in Fluid Mechanics, 13, 351 (1985) .
- (7) Rubbert, P. E., et al: "Numerical Grid Generation," P.235 (1982) Elsevier.
- (8) Miki, K. and Takagi, T.: J. Comput. Phys., Vol.53, No.2, 319 (1984) .
- (9) Courant, R., Hilbert, D.: "Methods of Mathematical Physics," Vol. II, John Wiley & Sons, 1962.
- (10) Umegaki, K., et al.: 4th Int. Conf. on Numer. Methods in Laminar and Turbulent Flow, (1985).
- (11) Takagi, T., Miki, K., Sano, H.: Applied Numerical Mathematics, 3, 305 (1987).
- (12) 山崎, 川島: 日経エレクトロニクス, 1984.6.12号, P.126
- (13) Rosch, H., et al.: ICAS-80-113, (1980).
- (14) Brackbill, J. U., et al.: J. Comput. Phys., 46, 342 (1982).