

ツール・システムのご説明



TOHOKU
UNIVERSITY

東北大学大学院工学研究科
航空宇宙工学専攻

川越 吉晃

- ✓ CoSMICとは？
- ✓ CoSMICの構成
- ✓ 第1階層モジュール紹介
- ✓ 第2, 第3, BG階層のご紹介

CoSMIC

Comprehensive
System for
Materials Integration of
CFRP

Home

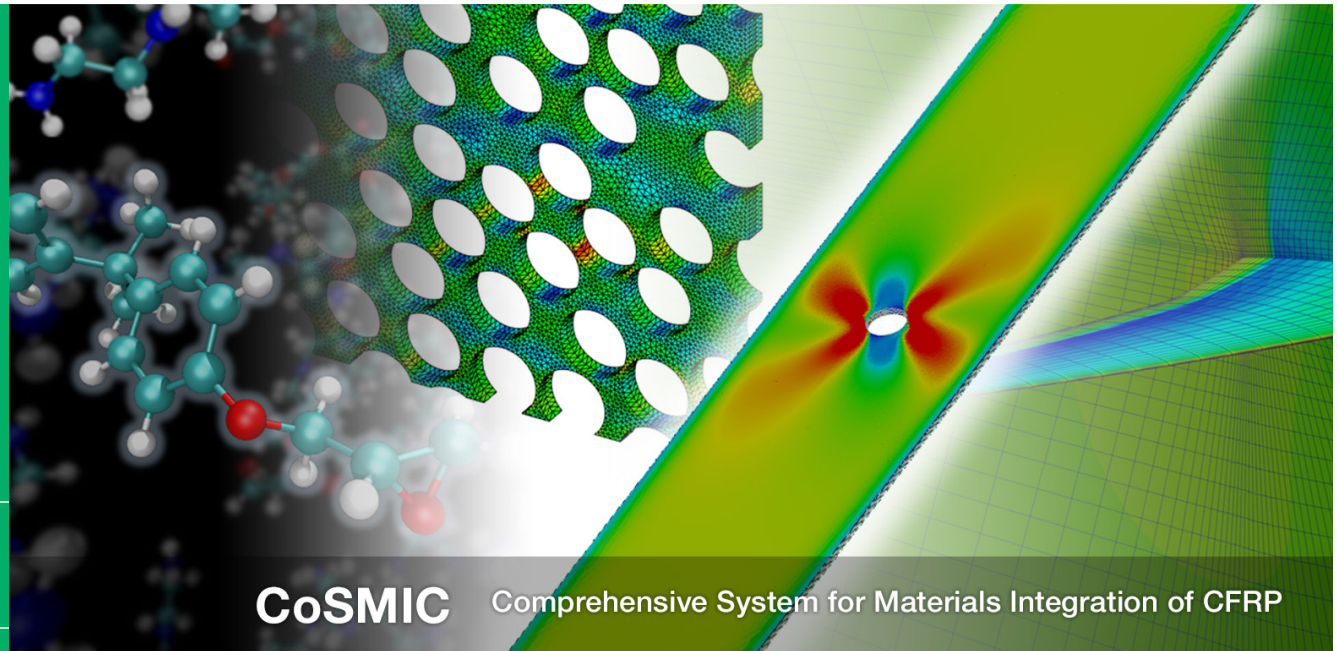
Programs

Analysis examples

Publications

English

Contact



研究概要

Research Outline

マテリアルズインテグレーション(MI)システムとは、材料工学手法に実験及び理論計算に基づいたデータ科学を活用機上でプロセス・組織・特性・性能をつないで材料開発を加速する統合型材料開発システムであり、計算機上で象をバーチャルに再現することで、材料開発の時間短縮・コスト低減を主目的としています。

CoSMIC(Comprehensive System for Materials Integration of CFRP)は炭素繊維強化プラスチック(CFRP)をシステムとして、東北大学が中心となり開発が進められています。これまでに航空機構造用のCFRP設計をターゲット12個のモジュールを開発してきており、原子・分子スケールから機体構造までのマルチフィジックス/マルチスケレーションが可能です。今後はユーザーニーズの高まりに応え、航空機産業以外の製品開発を支援するためのモジも進めていきます。

CoSMIC HPより

<http://www.cosmic.plum.mech.tohoku.ac.jp/>

モジュール構成

【第1階層】

航空機用熱硬化CFRP解析用ツール群

※主にSIPで構築したツール. テーラーメイド性が高い

【第2階層】

汎用インハウスコードによる解析ツール群

※第1階層の基になったコード

【第3階層】

商用・汎用ソルバー上で動くユーザーサブルーチン

【Background】

上記ツールの基礎コード (Backgroundコード) 群

実行環境

【GUIベース】 ※HPからGUIパッケージをダウンロードし利用

主に第1階層モジュールを実装. AOBAやその他サーバーでwebインターフェースを使って計算可能

【ターミナルベース】 ※HPから全コードダウンロード可能

ターミナル操作で計算

【第1階層】 航空機用熱硬化CFRP解析用ツール群

01. 反応硬化分子動力学シミュレーション
02. 反応硬化散逸粒子動力学シミュレーション
03. 化学反応経路自動探索 GRRM^{*1}
04. 架橋性を有するメゾ有限差分法（密度汎関数理論）シミュレーション^{*2}
05. マルチスケール残留変形シミュレーション
06. 自己組織化マップ
07. テーラリング設計支援のための有孔破壊シミュレーション
08. AFP 時のギャップ成型を考慮に入れた複合材積層板の有限要素解析ツール^{*2}
09. ばね要素モデル
10. マルチスケール破壊シミュレーション
11. 等価剛性モデル
12. 複合材主翼の多目的最適設計シミュレーター

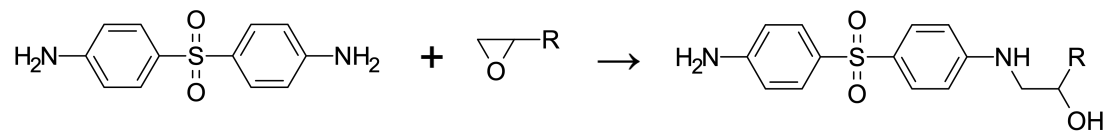
※1 量子化学探索研究所が提供するプログラム。東北大学サイバーサイエンスセンターでは、GRRMの大型計算が可能。

※2 GUI版には未実装（今後対応予定）

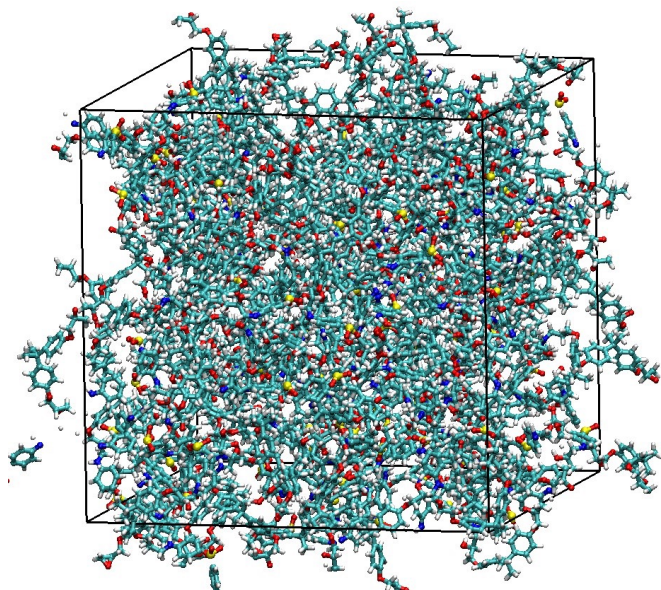
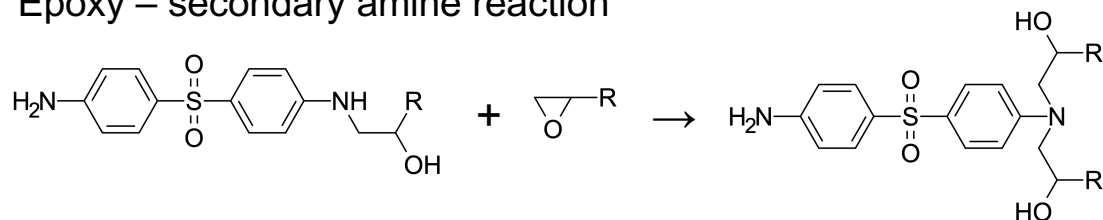
【第一階層】 01. 反応硬化分子動力学シミュレーション

DGEBA/4,4'-DDSの架橋反応

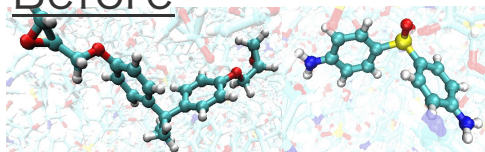
Epoxy – primary amine reaction



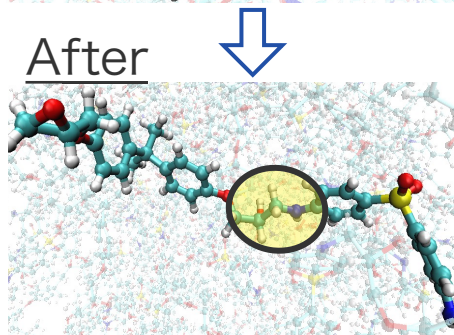
Epoxy – secondary amine reaction



Before



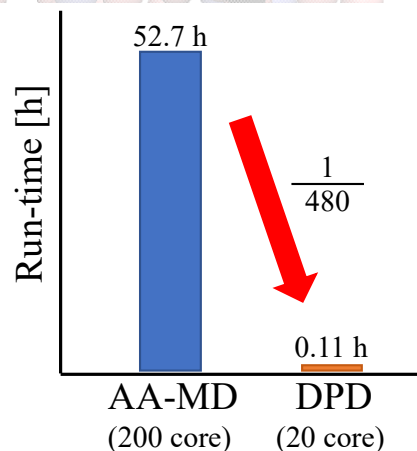
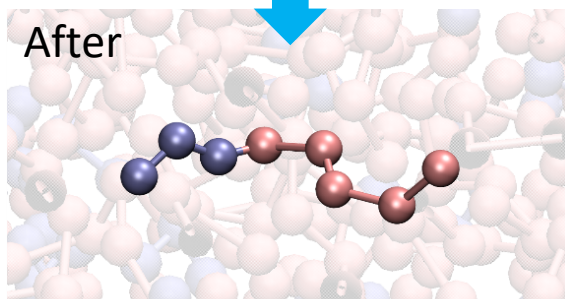
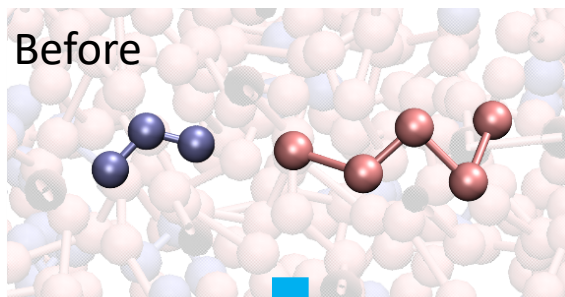
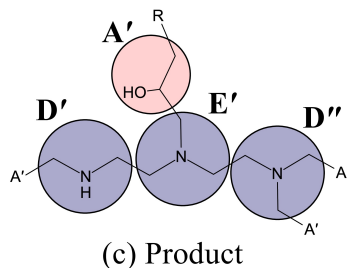
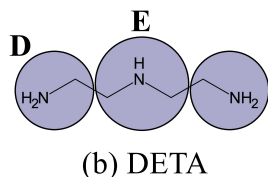
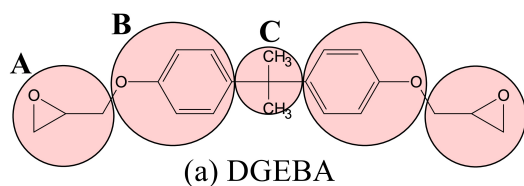
After



硬化樹脂モデルを用いて
硬化収縮や熱機械特性を計算

【第一階層】 02. 反応硬化散逸粒子動力学シミュレーション

サンプルコード：DGEBA/DETA 硬化反応DPDシミュレーション



※全原子系を復元し、
詳細解析も可能

シミュレーション全体の流れ

初期構造作成
DPD

硬化反応
コード

緩和計算
(DPD)

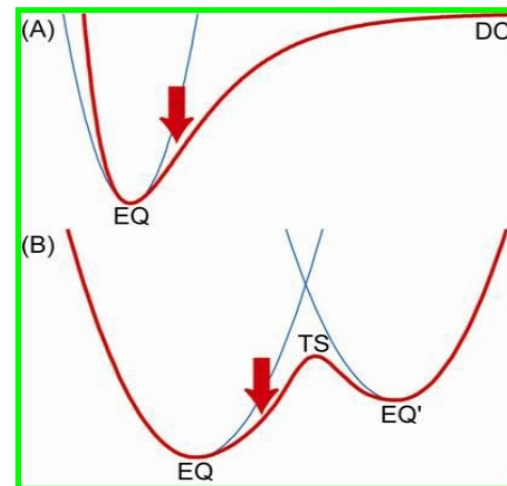
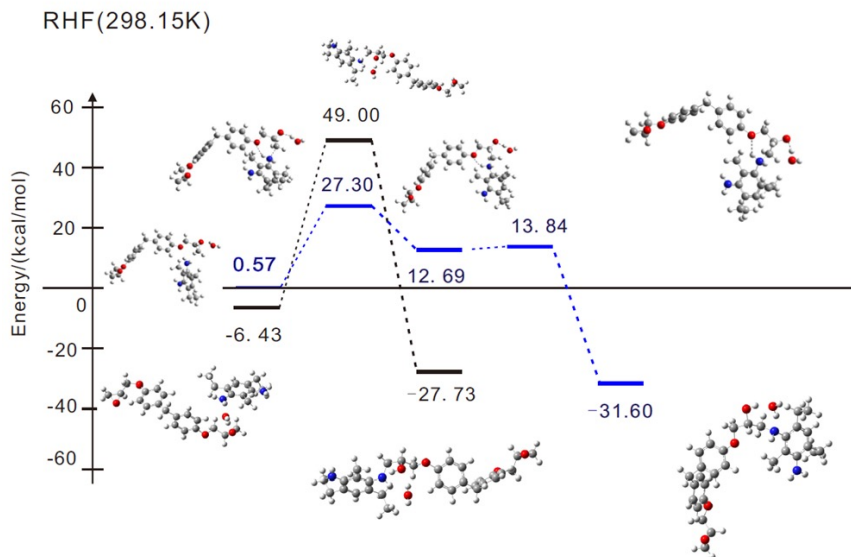
硬化後の構造を取得

リバースマッピング
(全原子MD系を取得)

指定の
硬化率以下

【第一階層】 03. 化学反応経路自動探索 GRRM

- ✓ 複数の分子が接近して反応に至るには、エネルギーの高い活性化状態(Transition State)を経由する。
- ✓ 多次元のエネルギー曲面から生成物に至るTSと反応経路を自動的に探索するアルゴリズムは東北大学・理論化学研究室で開発され、GRRMプログラムとして既に世界の280グループに利用されている。(詳細は量子化学探索研究所のサイトをご参照下さい <https://iqce.jp/>)
- ✓ 東北大学サイバーサイエンスセンターは、誰でもGRRMプログラムが使える唯一の大型計算機センターです。



ADD-Following

平衡構造 EQ から化学結合が解離(DC)する場合(A)でも、遷移構造(TS)を越えて別な平衡構造 EQ'へと結合の組換えが起こる場合(B)でも、反応が進むにつれてポテンシャルが放物線の形(青線)から下方(赤い矢印)に歪み、非調和下方歪み(Anharmonic Downward Distortion: ADD)が発生します。

ADDの大きな方向が、化学反応が進む方向の道標となり、未知の化学反応を探る「羅針盤」となります。

このADDを追跡することで化学反応経路を自動的に調べる方法をADD Following(ADDf)と呼びます。

【第一階層】 04. 架橋性を有するメゾ有限差分法 (密度汎関数理論) シミュレーション

物理ゲル，化学ゲル，溶媒の3成分系を対象に相分離構造形成の動力学を再現

→相分離構造、自由エネルギー、散乱関数を取得

熱硬化性樹脂の相分離構造を表現する上で重要な3つの要素:

“重合反応に伴う混合のエントロピーの減少”

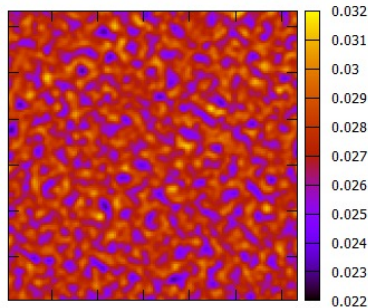
“物理ゲルに特徴的な高分子同士の絡み合い粘弾性”

“化学ゲルの弾性”

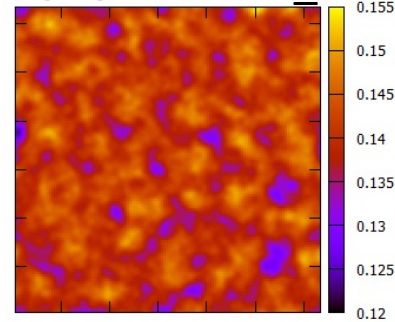
を正しく表現した密度汎関数理論を構築.

体積分率
(化学ゲル)

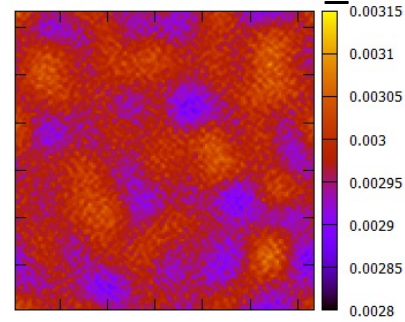
時刻:10000d_t



時刻:100000d_t



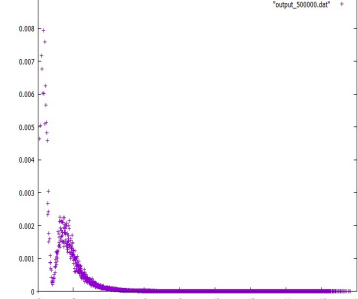
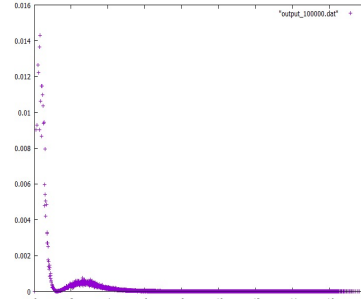
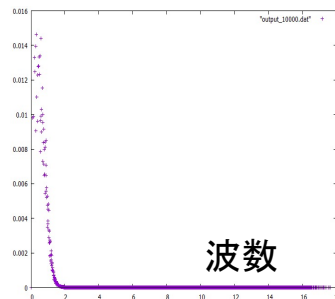
時刻:1000000d_t



散乱関数
(全高分子)

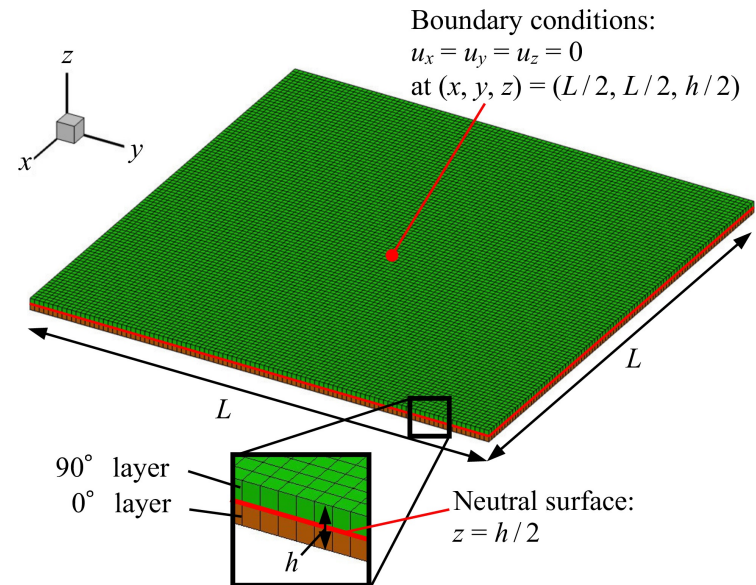
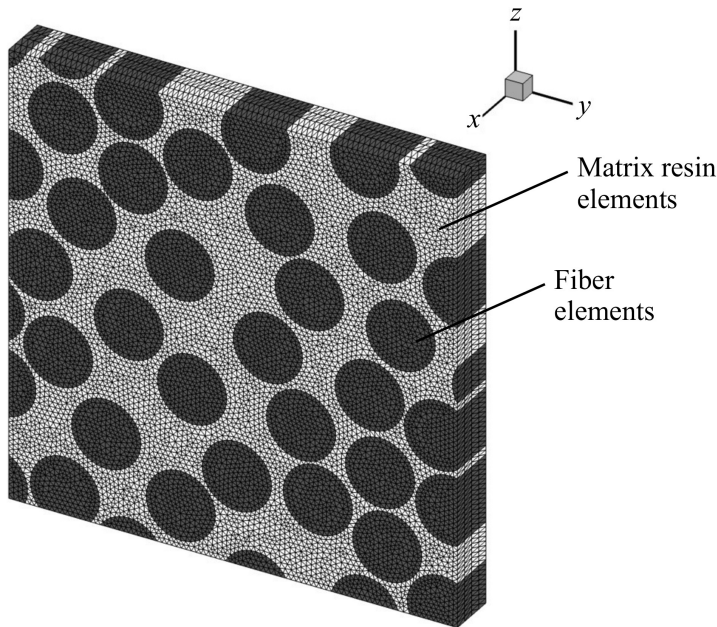
※右は独立な
10回の試行の平均

散乱強度



【第一階層】 05. マルチスケール残留変形シミュレーション

分離型2スケール解析による成型時残留変形予測



ミクロFEM :

PUC解析による均質化法

- 均質化された複合材の等価剛性
- 複合材の硬化収縮量
- 複合材の線膨張係数

マクロFEM :

均質化された直交異方性弾塑性体

(非対称積層[0,90], 幾何学的非線形)

- 硬化収縮・熱収縮に伴う変形

※樹脂物性をGRRM, 反応MDから取得可能

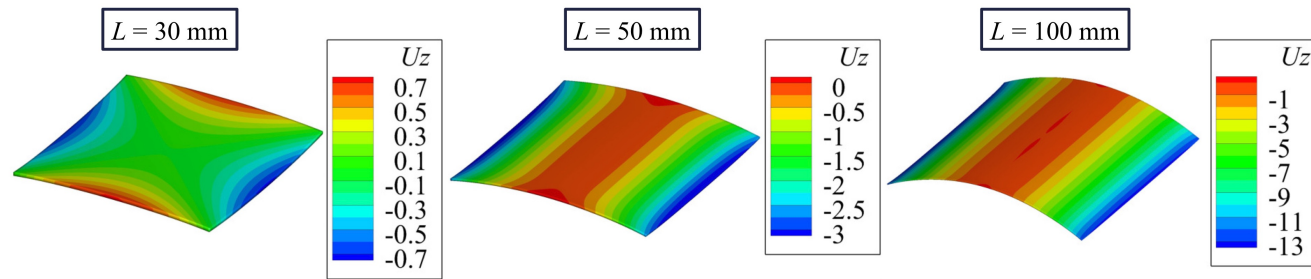
cross-ply試験片のサイズ依存性評価

※硬化収縮量はモデル樹脂として DGEBA/DETAの値を使用

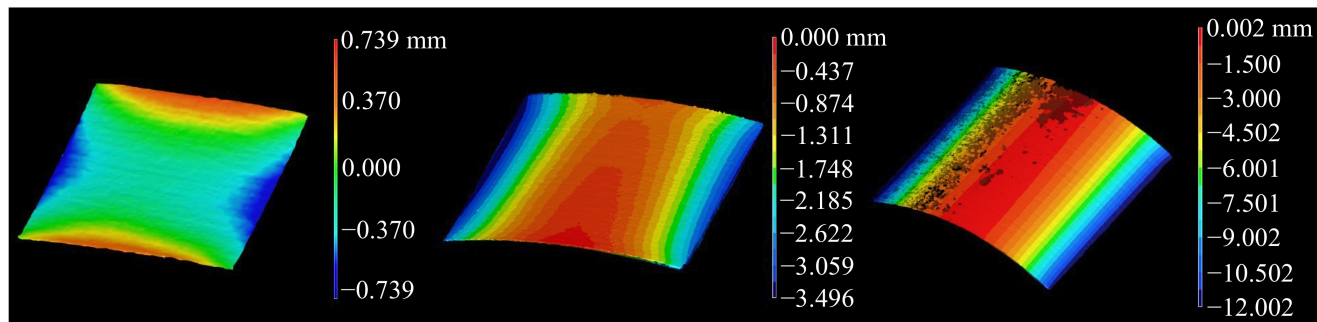
※PUCでの材料物性はT800Sおよび3900-2B模擬の値を使用

※マクロFEMはPUCで得られた等価剛性を仕様

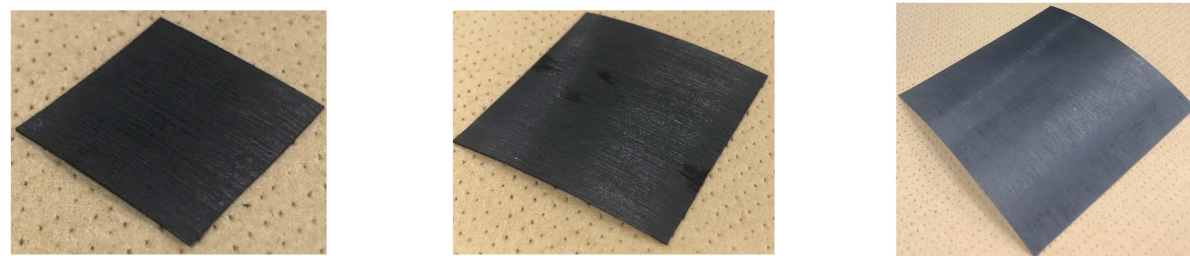
FEA



3D scan



Specimen



Saddle shape

Cylindrical shape

実験値 (T800S/3900-2B, [0/90]) とFEMの比較

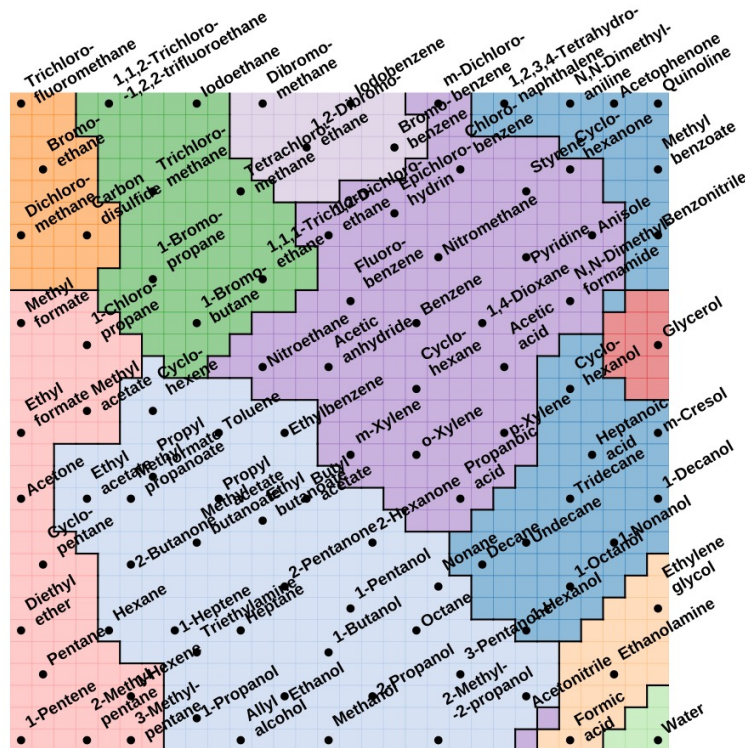
試験片 サイズ [mm]	最大変位 実験 [mm]	FEM [mm]
30	0.74	0.73
50	3.49	3.37
100	12.00	13.56

- ✓ MDで得られた硬化収縮量から成型時の残留変形を予測 → 実験とよく一致
- ✓ 実験では試験片サイズに応じて鞍型から円筒型への遷移が見られ、幾何学的非線形を考慮することでFEMでも同様な遷移を再現できた

【第一階層】 06. 自己組織化マップ

サンプル：98種類の有機材料のデータ分析

- ・ アルカン, アルコール, 芳香族化合物, カルボン酸, ケトン, エステル化合物, etc.
- ・ 8種類の熱物性(重みベクトルの次元):
質量密度, 定圧比熱, 融点, 沸点, 飽和蒸気圧,
表面張力, 粘性係数, 熱伝導率(室温 and/or 大気圧)
- ・ 複数の物性データベースよりデータを取得



機械学習条件：

- ・ SOMマップサイズ: 30×30
 - ・ k-means法におけるクラスタ数: 10
- ✓ 多次元の物性を持つ材料間の物性の近さがマップ上で可視化される.
- ✓ クラスタリングによる材料のグループ分けも可視化できる.

※黒い実線はk-means法によって決定されたクラスタ境界

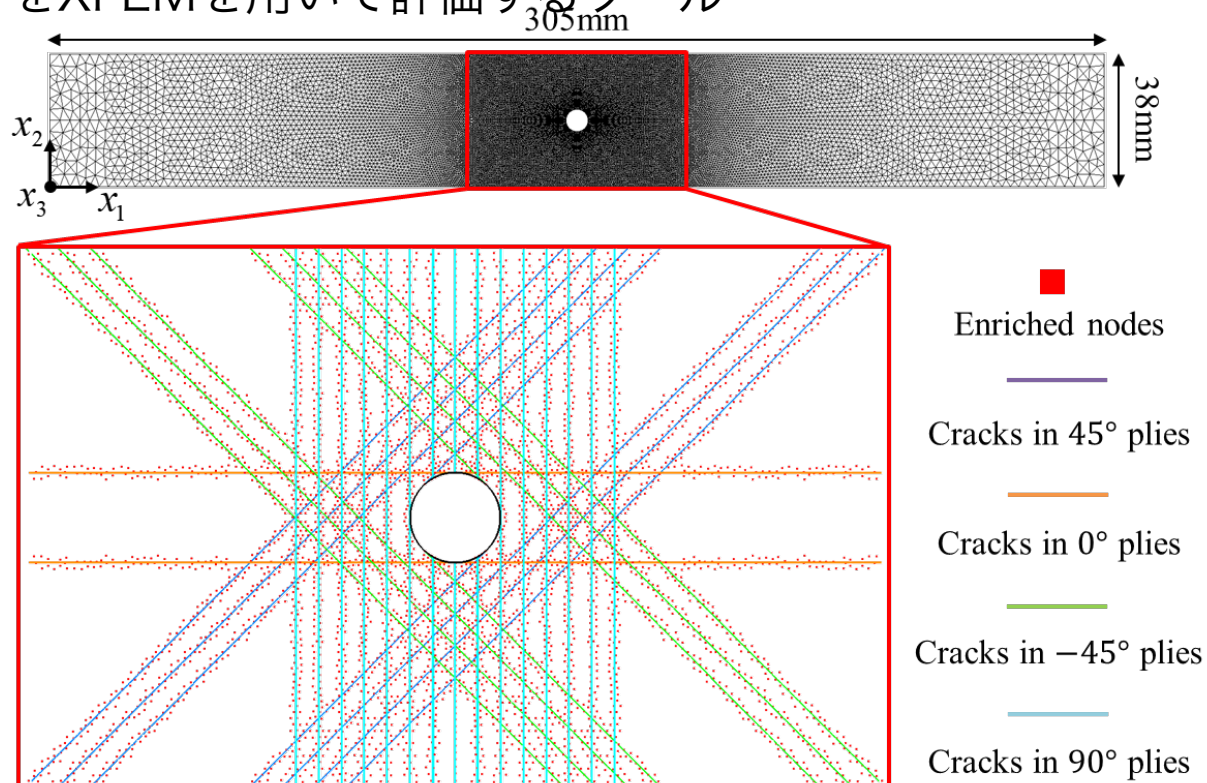
Kikugawa, et al., Chem. Phys. Lett., 728 (2019), 109

【第一階層】 07.テーリング設計支援のための有孔破壊シミュレーション

繊維強化複合材料積層板を主な対象とし，円孔材引張・圧縮(OHT・OHC)試験における

- ①荷重－変位(応力－ひずみ)応答
- ②強度・破断ひずみ
- ③破壊モード

をXFEMを用いて評価するツール



境界条件

○熱解析

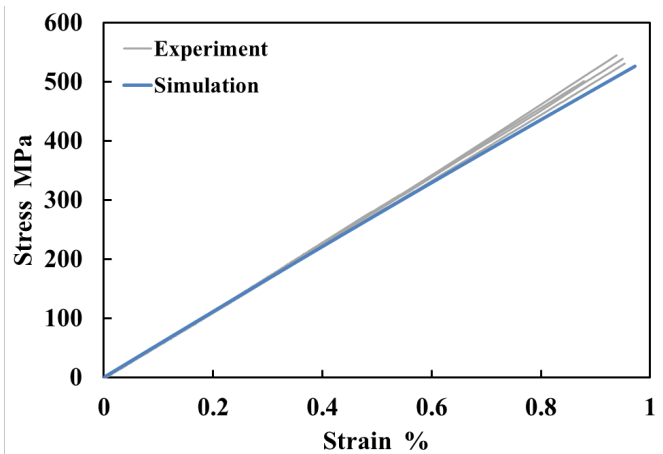
$$\begin{cases} u_1(0,0,0) = 0 \\ u_2(0,0,0) = 0 \\ u_3(x_1, x_2, 0) = 0 \end{cases}$$

○負荷解析

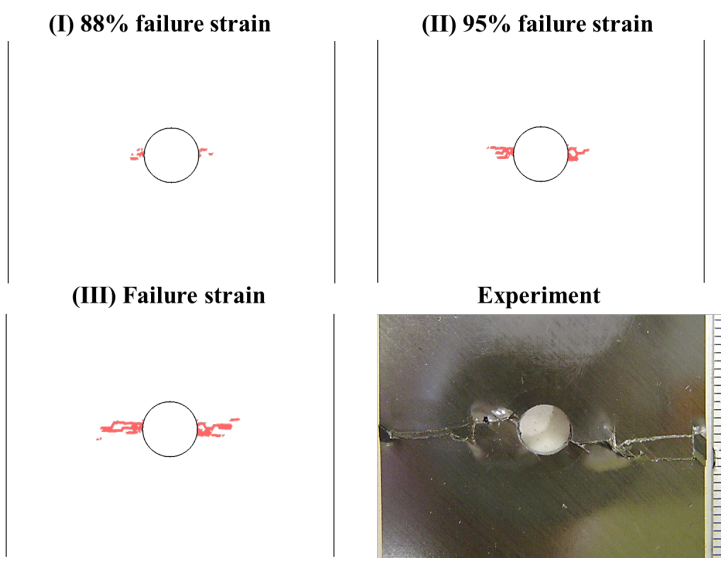
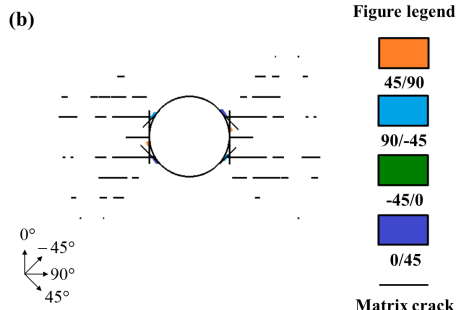
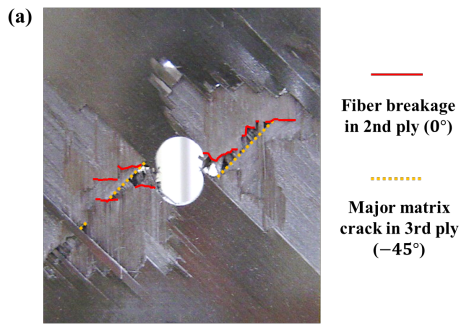
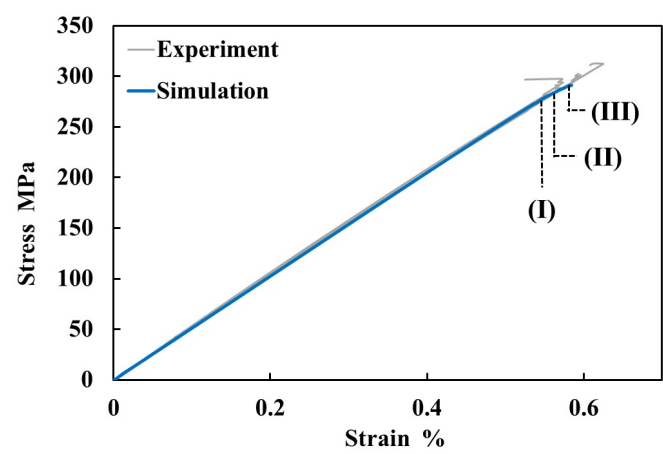
$$\begin{cases} u_1(0, x_2, x_3) = 0 \\ u_1(L, x_2, x_3) = \dot{u}_1 t \\ u_2(0,0,0) = u_2(L,0,0) = 0 \\ u_3(x_1, x_2, 0) = 0 \end{cases}$$

【第一階層】 07.テーラリング設計支援のための有孔破壊シミュレーション

OHT解析結果



OHC解析結果



【第一階層】 08. AFP 時のギャップ成型を考慮に入れた複合材積層板の有限要素解析ツール

AFP製造によるギャップやラップが内在する複合材積層板の力学的挙動を簡易なモデル化と小さい計算コストで予測する有限要素解析ツール

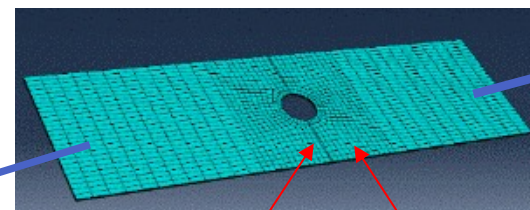
①積層構造 → ①ply-by-plyシェルレイヤーモデル

②プライ端部 → ②拡張有限要素法 (XFEM)

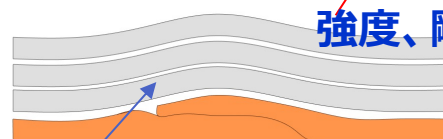
③層のうねり → ③局所剛性変化

④層厚の変化 → ④局所的板厚変化

によって簡易にモデル化する.



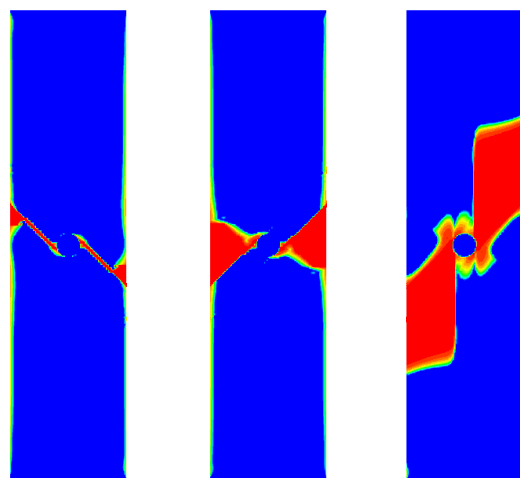
繊維うねりや
局所的なVf変化による
強度、剛性影響を模擬



繊維うねり



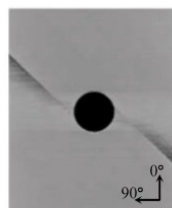
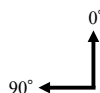
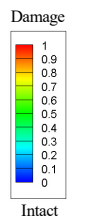
Vf変化



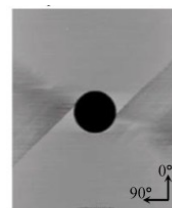
45°/90°
interface

90°/-45°
interface

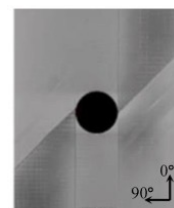
-45°/0°
interface



45°/90°
interface



90°/-45°
interface



-45°/0°
interface

軟X線観察写真[4]

【第一階層】 09. ばね要素モデル

繊維破断部近傍の隣接繊維表面に生じる応力集中係数の推定および一方向材の強度予測を行うために破壊解析モデル

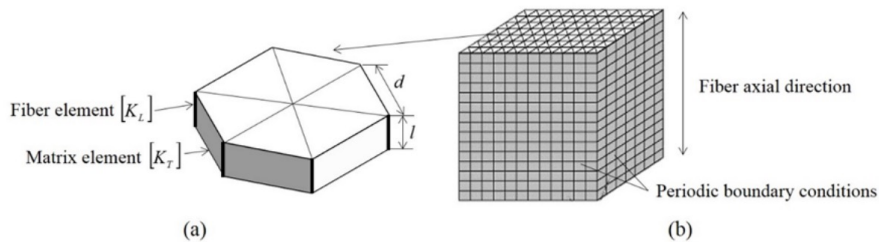
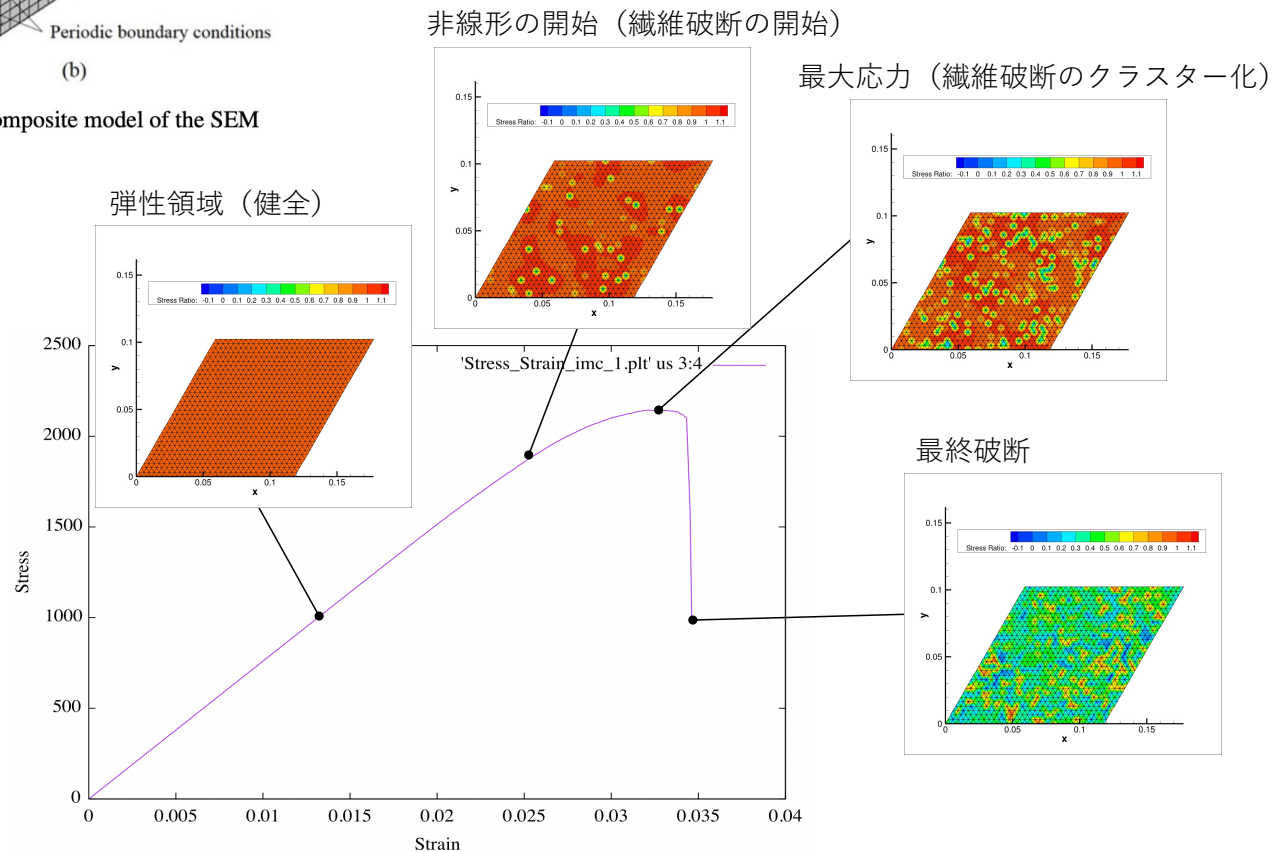
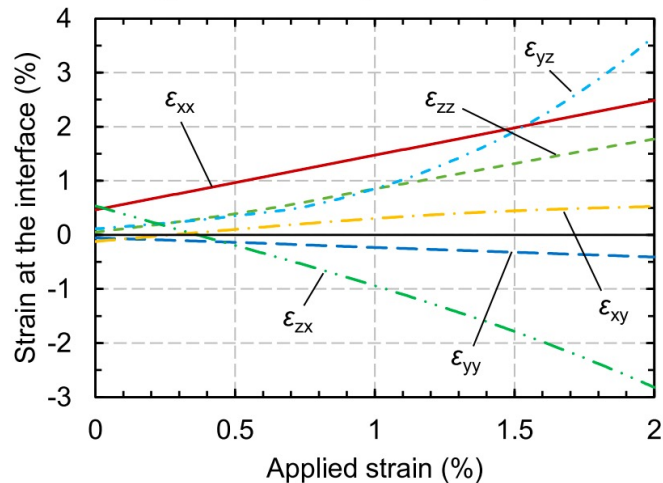
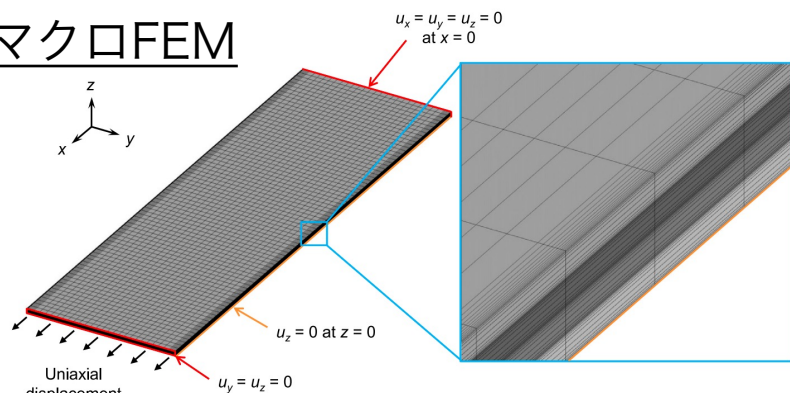


Fig. 2.9 Schematic diagram of the (a) Unit cell and (b) Composite model of the SEM



【第一階層】 10. マルチスケール破壊シミュレーション, マルチスケール解析 (巨視・微視FEM連携)

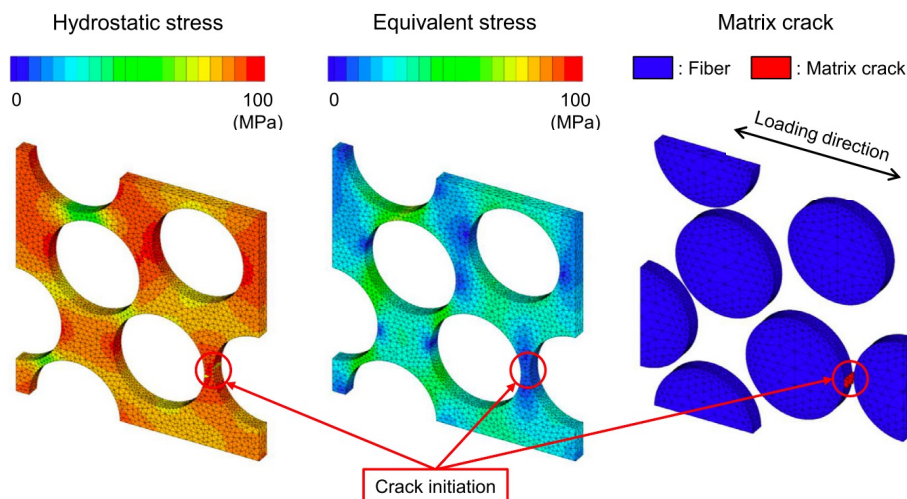
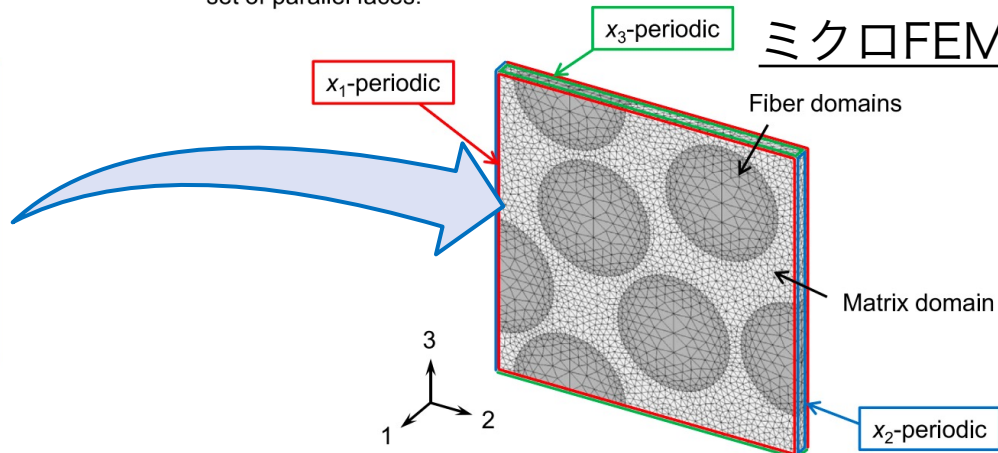
マクロFEM



積層板に単軸引張荷重を負荷し,
ひずみ履歴を取得

PBCs were applied to each set of parallel faces.

ミクロFEM



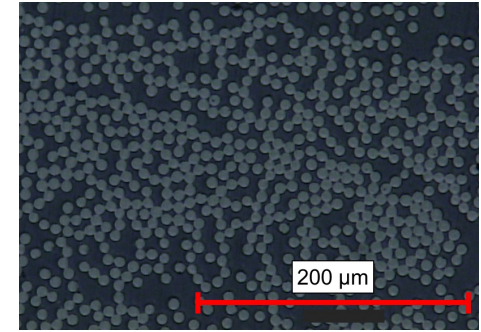
マクロFEMからのひずみ履歴下での初期亀裂予測

【第一階層】 11. 等価剛性モデル

周期セル（PUC）解析では繊維と樹脂を再現した周期的な解析モデルを使用し、等価剛性（ヤング率，ポアソン比，横弾性係数）を計算。

先行研究

C. Gonzalez, et. al., Compos. Sci. Technol., 2007.
実際のCFRPでは炭素繊維は配置が不規則であるため、
炭素繊維数30本程度の微視的有限要素モデルが必要

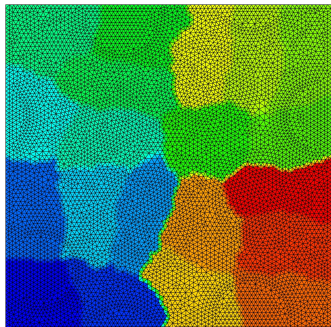


CFRPの繊維配置

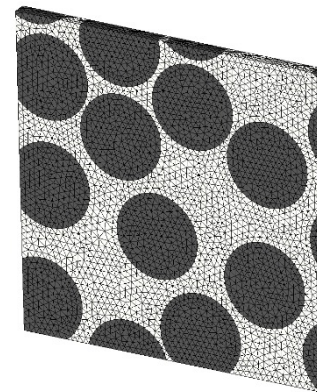
問題点

繊維数の増加に伴い解析コストが増大
（メモリ使用量，計算時間）

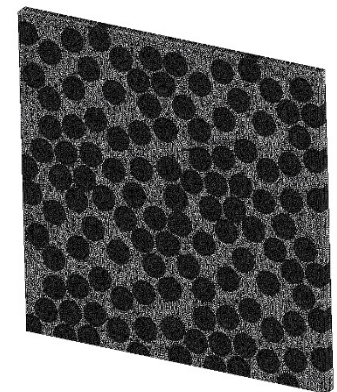
→ **大規模並列有限要素解析**が注目



←METISによる領域分割



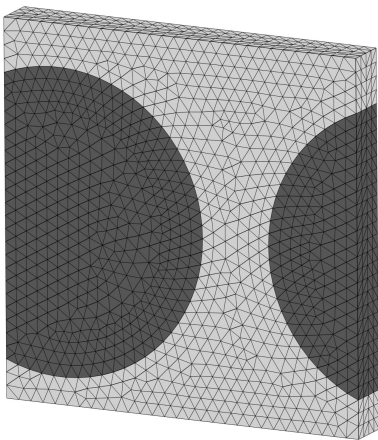
繊維数：10
自由度数：約24万



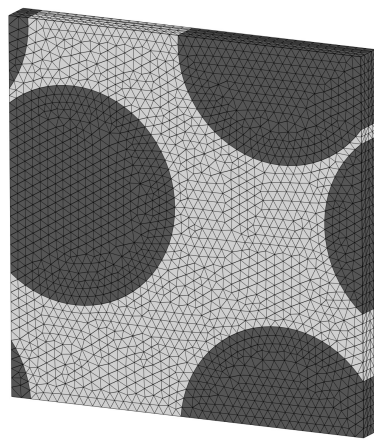
繊維数：120
自由度数：約487万

【第一階層】 11. 等価剛性モデル

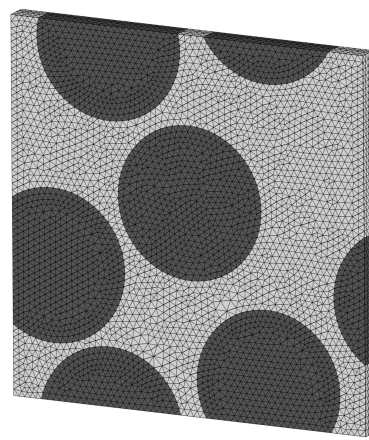
METISの導入によって数百本の繊維を配置した系の計算が可能！



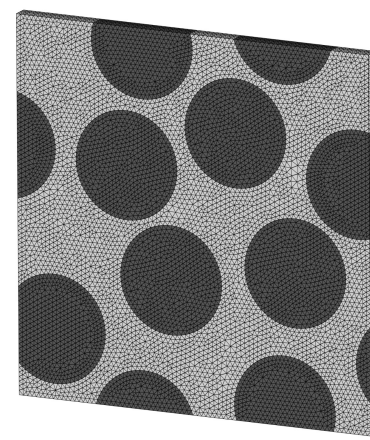
繊維数：1



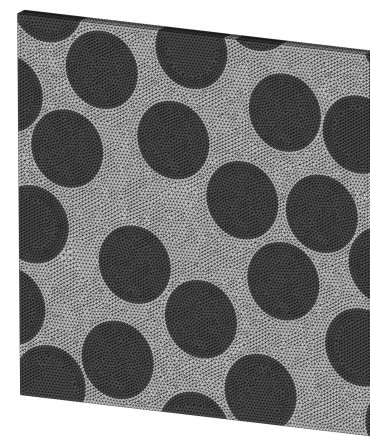
繊維数：2



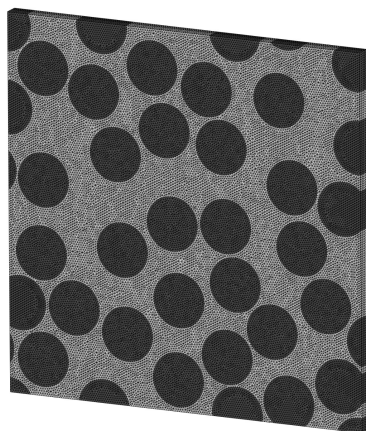
繊維数：4



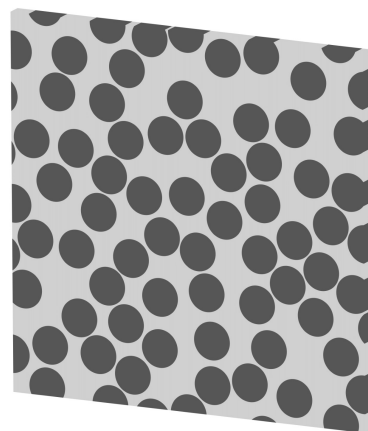
繊維数：8



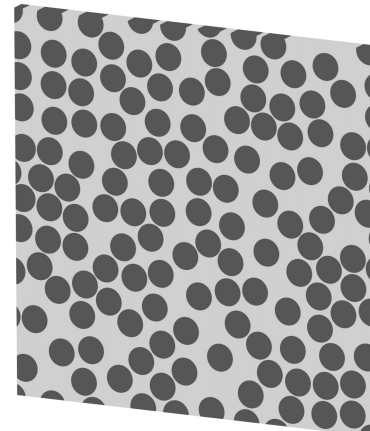
繊維数：16



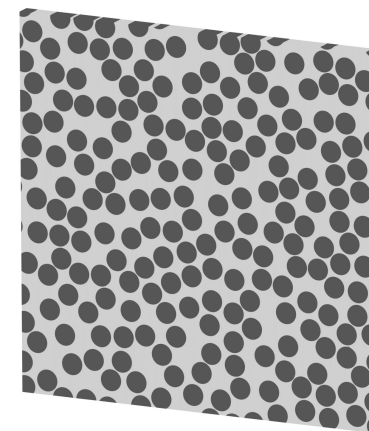
繊維数：32



繊維数：64



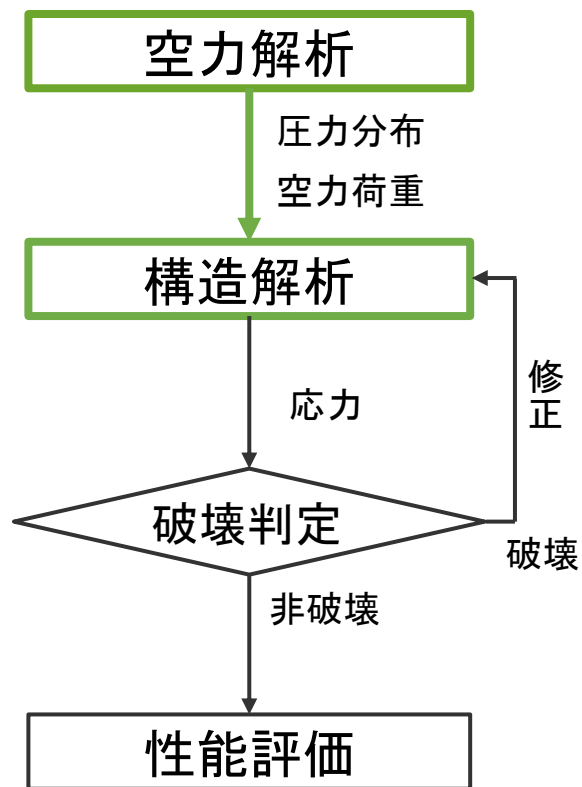
繊維数：128



繊維数：200

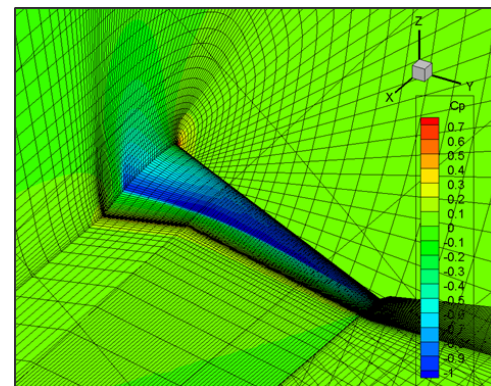
【第一階層】 12. 複合材主翼の多目的最適設計シミュレーター

解析の流れ



数値流体解析

- 数値計算手法→有限体積法
- 支配方程式→Euler方程式(非粘性/圧縮性)

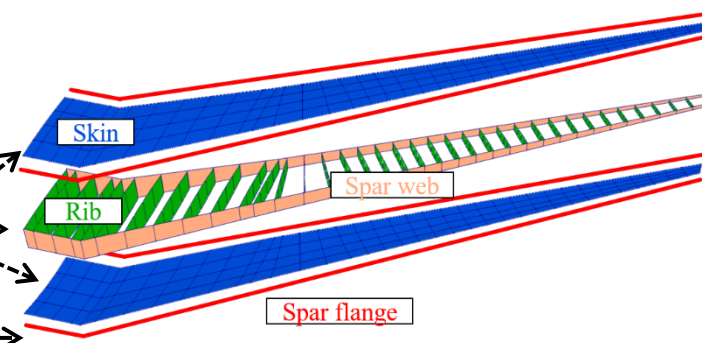


構造解析

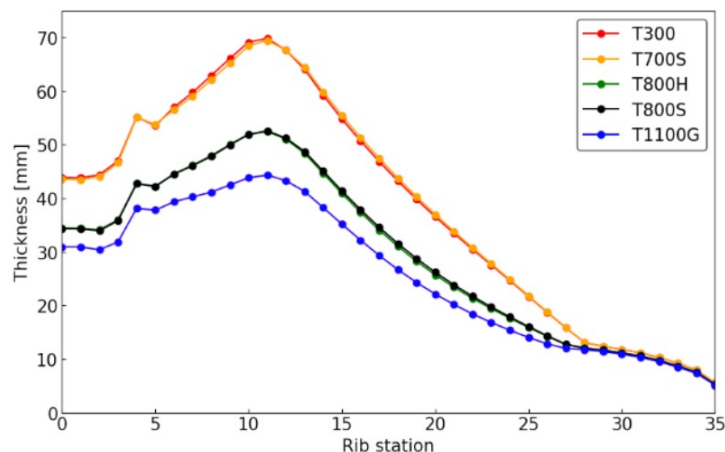
- 数値計算手法→有限要素法
(線形静解析)
- 有限要素モデル

積層板Shell要素:
外板・桁ウェブ・リブ

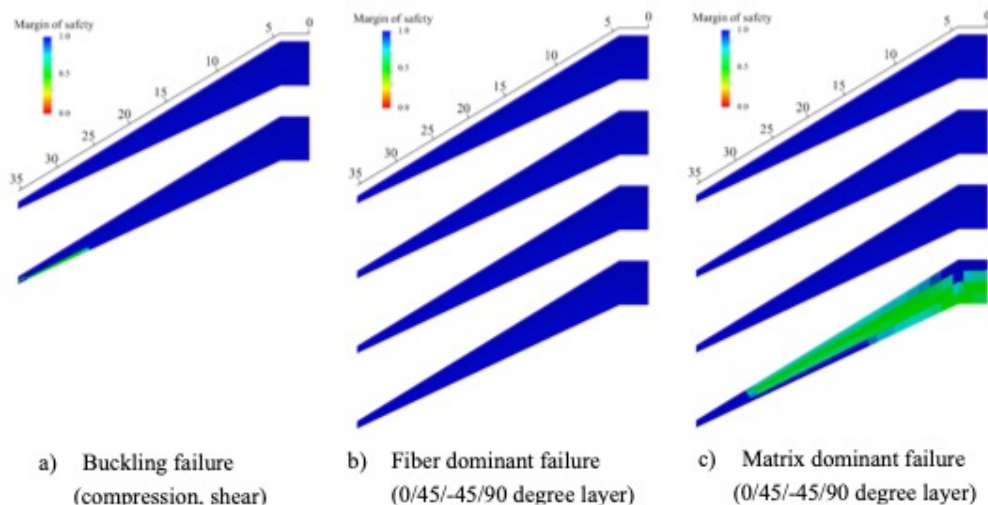
Rod要素: 桁フランジ



【第一階層】 12. 複合材主翼の多目的最適設計シミュレーター



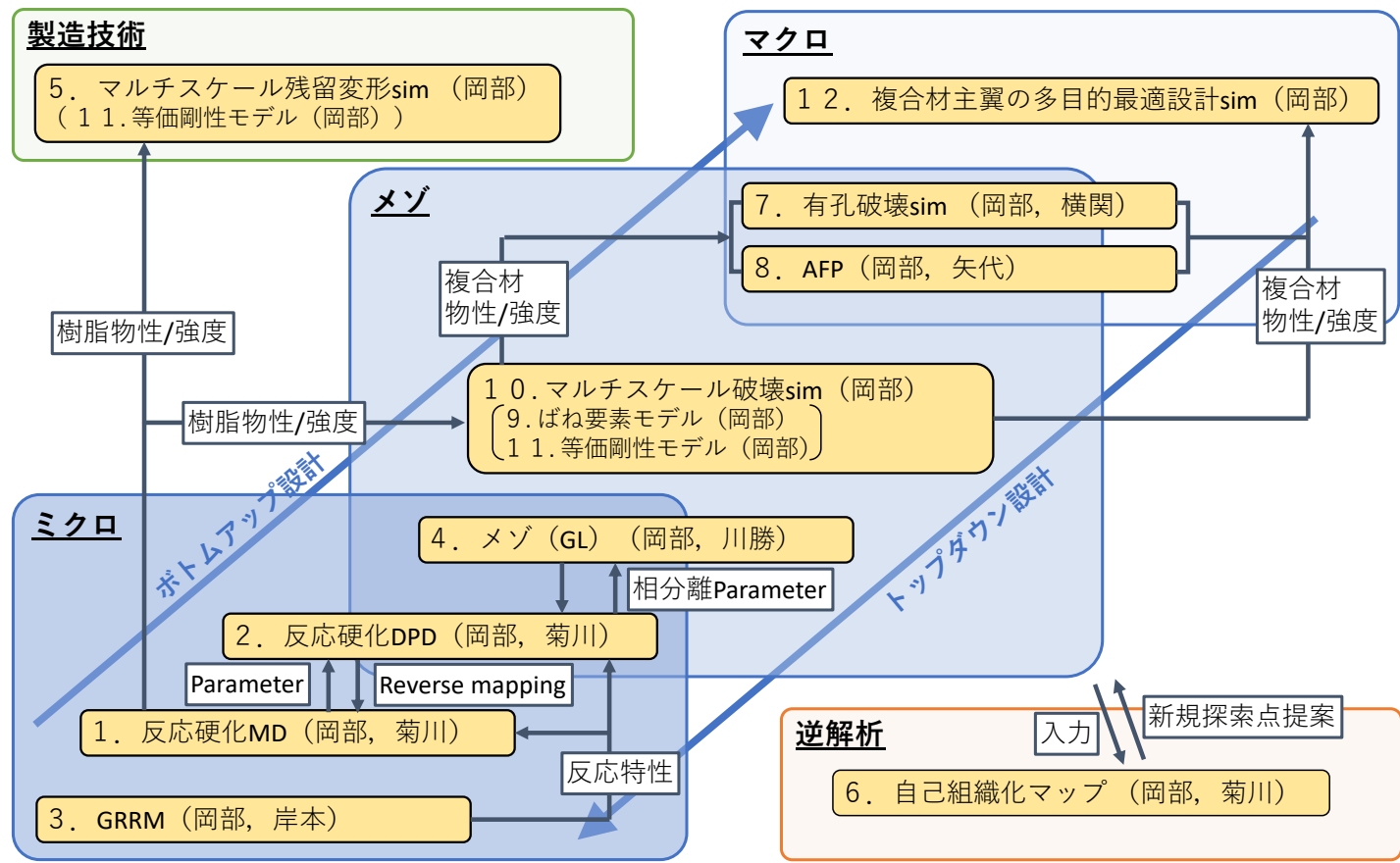
下面パネルの板厚変化（スパン方向分布）



- ✓ ボトムアップ的に樹脂種・繊維種・その他各スケールでの特性が主翼設計時にどう影響するのかを解析可能
- ✓ サイジングや形状最適化ツールとして利用

【第1階層】 航空機用熱硬化CFRP解析用ツール群

各モジュールの連携関係



【第1階層】 航空機用熱硬化CFRP解析用ツール群

HPによるコード公開

07. テーラリング設計支援のための有孔破壊シミュレーション

- [ユーザーズマニュアル](#) (2022/4/20 up)
- Xeon version [x0.0](#) (2022/4/27 up)
- Aurora version [a0.0](#) (2022/5/10 up)
- Windows version [xw0.0](#) (2022/4/27 up)

08. AFP時のギャップ成型を考慮に入れた複合材積層板の有限要素解析ツール

- [ユーザーズマニュアル](#) (2022/4/20 up)
- Xeon version [x0.0](#) (2022/5/10 up)

09. ばね要素モデル

- [ユーザーズマニュアル](#) (2022/4/20 up)
- Xeon version [x0.0](#) (2022/4/21 up)
- Aurora version

10. マルチスケール破壊シミュレーション

- [ユーザーズマニュアル](#) (2022/4/20 up)
- Xeon version [x0.0](#) (2021/7/9 up)

11. 等価剛性モデル

- [ユーザーズマニュアル](#) (2022/4/20 up)
- Xeon version [x0.0](#) (2022/4/21 up)
- Xeon + METIS version [xm0.0](#) (2022/4/21 up)
- Aurora version [a0.0](#) (2022/4/21 up)

Xeon version:

スカラー型のサーバーで実行可能

Aurora version:

SX系（ベクトル型）で実行可能

※ユーザーID, Passをお持ちの方は
全階層のコードがダウンロード可能
です.

【第1階層】 航空機用熱硬化CFRP解析用ツール群
ユーザーマニュアル

CoSMIC ユーザーマニュアル

1. 反応硬化分子動力学シミュレーション

目次

1.1. はじめに.....1

1.2. 理論・原理.....1

1.2.1. 分子動力学法 (MD) とは.....1

1.2.2. 力場 (Force field)2

1.2.3. アンサンブル.....3

1.2.4. 硬化反応モデル.....3

1.3. シミュレーション.....5

1.3.1. 本ツールのシミュレーションフロー.....5

1.3.2. 解析例.....6

➢ 例題) DGEBA/4,4'-DDS 硬化反応シミュレーション.....6

➢ ファイル一覧 (抜粋).....6

➢ インプット例①力場パラメータ.....7

➢ インプット例②分子情報.....7

➢ インプット例③MD (peachgk_md)制御ファイル.....8

➢ インプット例④硬化条件設定ファイル(1/2).....8

➢ インプット例⑤硬化条件設定ファイル(2/2).....9

➢ インプット例⑥実行条件設定ファイルと実行方法.....9

➢ 後解析例 (可視化)10

➢ 後解析例 (物性取得)10

参考文献.....11

Copyright © 2022 Tohoku University All Rights Reserved.

CoSMIC ユーザーマニュアル

1.2.1. 分子動力学法 (MD) とは

MD法とは多数の粒子から構成される仮想的な系を考え、原子の軌跡を追ひ、種々の物理量を統計力学に基づいて算出する手法である。MD法では、各原子に働く力と座標から、逐次的に運動方程式を解くことで原子の軌跡を算出する。各原子に対する運動方程式は以下のN個のニュートンの第二法則の式で表される、

$$\frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} = -\frac{1}{m_i} \nabla_i E, \quad i=1, 2, \dots, N$$

ここで $\mathbf{F}_i$, m_i , $\mathbf{r}_i$ はそれぞれ原子 i に作用する力、質量、位置を表し、力 $\mathbf{F}_i$ は原子間相互作用ポテンシャル E の微分として計算される。この微分方程式は一般に解析的に解くことが出来ないため、差分方程式に近似することで時間積分を実行する。よく用いられる時間積分法として速度ベレル法がある。速度ベレル法では時間ステップ Δt 後の位置と速度を式(2)で計算することができ、比較的アルゴリズムが容易なうえ、時間反転性を有する特徴がある、

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t+\Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m} \mathbf{F}_i(t) + O(\Delta t^3) \\ \mathbf{v}_i(t+\Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{2m} [\mathbf{F}_i(t+\Delta t) + \mathbf{F}_i(t)] + O(\Delta t^2) \end{aligned}$$

また、共有結合と非共有結合に伴う運動では正確な数値積分に必要な時間ステップが大きく異なるため、速度ベレル法では速い運動である共有結合に合わせた短い時間ステップに設定する必要がある。そこでマルチタイムステップ法 (RESPA 法) [9]を用いることで、共有結合による速い運動には短い時間ステップを、非共有結合による遅い運動には長い時間ステップを設定することができ、効率的なシミュレーションが可能となる。

1.2.2. 力場 (Force field)

MD法では原子間相互作用ポテンシャルを、原子間の結合を表すパラメータ (距離、結合長、結合角など) を変数とした関数形として表すことで、低計算コストながら精度よく原子間相互作用を再現している。この相互作用ポテンシャルを表現するために用いる関数形とパラメータのセットを力場 (Force field) と呼び、代表的な力場として AMBER, CHARMM, OPLS, COMPASS などが挙げられる。本ツールでは汎用力場である DREIDING[10]を用いている。DREIDING 力場の関数形は、

2

Copyright © 2022 Tohoku University All Rights Reserved.

CoSMIC ユーザーマニュアル

➢ インプット例①力場パラメータ

DATA Bond.dat	手入力例の説明	DATA CGH-coef.dat	1. Index
CGH	1. Index	1. Index	2. Atom type
1 B 1.00000 0.0	2. Atom type (文字)	2 C3 6.40737938e-22 3.89830000e-10 A	3. E [J]
2 C3 12.01100 0.0	3. 原子質量	3 CB 6.40737938e-22 3.89830000e-10 A	4. Bond [m]
8 B3 32.04000 0.0	4. 断熱	4 B3 5.37761612e-22 3.66210000e-10 A	
		5 B2 5.37761612e-22 3.66210000e-10 A	
		6 C3 6.44808532e-22 3.40480000e-10 A	
		7 O2 6.44808532e-22 3.40480000e-10 A	
		8 B3 2.39030570e-21 4.03000000e-10 A	
		END	

➢ インプット例②分子情報

"name".info.dat	手入力例の説明	"name".info.dat	1. Index
CGH	1. Index	1 CB 1.49324e-09 1.6034e-09 1.4723e-09 0.412021	2. Atom type
1 1 2 CB-CB	2. Index	2 CB 1.50336e-09 1.7033e-09 1.2030e-09 0.207938	3. E [J]
2 1 6 CB-CB	3. Index	4 B 2.50676e-09 1.5530e-09 1.2530e-09 0.117238	4. E [m]
1	4. Bond type	END	5. E [m]
52 24 49 C3-C	5. Angle type		6. Charge
CGH			
1 2 1 6 C-CB-C	1. Index		2. Index
2 2 1 10 B-CB-C	2. Index		3. Index
1	3. Index		4. Index
94 23 25 24 B-CB-C	4. Angle type		5. Index
			6. Index
DREIDING			
1 6 1 2 3 B-CB-CB-C	1. Index		2. Index
2 6 1 2 26 B-CB-CB-C	2. Index		3. Index
			4. Index
130 49 24 25 23 B-CB-CB-C	3. Index		4. Index
			5. Index
DREIDING_HB			
1 2 6 10 CB-S-S-C	1. Index		2. Index
2 2 26 1 3 CB-S-S-C	2. Index		3. Index
1	3. Index		4. Index
12 20 44 15 19 CB-S-S-C	4. Index		5. Index
END			

7

Copyright © 2022 Tohoku University All Rights Reserved.

✓ 各ツールの背景・理論説明および動作方法（インプット説明や後処理方法等）を記載
✓ コードと共に無料公開（マニュアルはID不要）

【第2階層】汎用インハウスコードによる解析ツール群

第二階層

- ▶ 01. アイソパラメトリック要素（一次要素） [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 02. アイソパラメトリック要素（高次要素） [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 03. アイソパラメトリック要素（固有振動解析） [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 04. アイソパラメトリック要素（動解析） [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 05. 幾何学的非線形解析（トータルラグランジュ形式） [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 06. 幾何学的非線形解析（アップデートラグランジュ形式） [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 07. 構造要素線形解析（NLFESTAR）
- ▶ 08. 弾塑性解析 [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 09. 粘塑性解析 [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 10. 粘塑性くびれ解析 [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 11. X-FEM [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 12. 平板シェル要素の固有振動解析 [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 13. 平板シェル要素の座屈解析 [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 14. Mindlin板要素 [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 15. 15_非圧縮性流体FEM [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 16. 浸透流FEM [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 17. SPH (2D) [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 18. SPH (3D) [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 19. SPH (曲線座標) [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 20. SPH (衝撃解析) [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 21. SPH (破壊解析) [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 22. SPH (変形解析) [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 23. 全原子MD [zip.file](#) (2021/7/7 up)
- ▶ 24. DPD

特徴

第1階層の基となるような基礎解析コード

高速化処理を順次適用中

- Pardisoによる直接解法の実装（スカラー機向け） 済
- Hetero solverによる直接解法の実装（ベクトル機向け）
- 反復法（CG法）による高速求解の実装（スカラー・ベクトル）
- 一部METISによる領域分割型並列化の実装

※CoSMIC HPより

http://www.plum.mech.tohoku.ac.jp/CoSMIC_main.html

※外注：合同会社PE x ProCS

【第3階層】 商用・汎用ソルバー上で動くユーザーサブルーチン

第三階層

- ▶ 01. 分子動力学シミュレーション（反応硬化，物性評価）（LAMMPSにて計算するためのサポート資料）
- ▶ 02. DCB [zip.file](#)（ABAQUSにて計算するためのサポート資料）（2021/10/11 up）
- ▶ 03. ENF [zip.file](#)（ABAQUSにて計算するためのサポート資料）（2021/9/9 up）
- ▶ 04. OHC [zip.file](#)（LS-DYNAにて計算するためのサポート資料）（2021/9/8 update）
- ▶ 05. OHT [zip.file](#)（LS-DYNAにて計算するためのサポート資料）（2021/9/8 up）
- ▶ 06. ドリリング（ABAQUSにて計算するためのサポート資料）
- ▶ 07. 面外衝撃解析（ABAQUSにて計算するためのサポート資料）

マクロ解析：

※CoSMIC HPより

http://www.plum.mech.tohoku.ac.jp/CoSMIC_main.html

ABAQUSやLS-DYNAなどの商用ソフトで実行可能なユーザーサブルーチンの提供
TIMON連携（射出，3DP）

ミクロ解析：

LAMMPSやOCTAなどの汎用コードと連携させた解析ツールの公開
Gaussian連携（量子化学計算）

上記以外にも順次追加予定

Contact



[HOME](#) > Contact

コードダウンロード用のID・パスワード希望、およびその他問い合わせはこちらまで

CoSMIC事務局（東北大学オープンイノベーション戦略機構）

松尾良夫

mail : yoshio.matsuo.a2@tohoku.ac.jp

CoSMIC HPより

<http://www.cosmic.plum.mech.tohoku.ac.jp/>