

COMSOL Multiphysics利用 の手引き

Table of contents

1. はじめに	3
1.1. 利用できるバージョン	3
1.2. 概要	3
1.3. マニュアル	3
1.4. COMSOL Multiphysicsの利用の流れ	3
2. COMSOL Multiphysicsの使用方法	5
2.1. COMSOL Multiphysicsのコマンドライン実行	5
3. COMSOL Desktopの使用方法	15
3.1. COMSOL Desktopの概要	15
3.2. TSUBAME4.0上でのCOMSOL Desktopの起動	15
3.3. COMSOL Desktopの画面説明	17
3.4. COMSOL Desktopによるモデル作成と計算投入、データ解析	23
改訂履歴	44

1. はじめに

本書は、COMSOL Multiphysicsを東京工業大学学術国際情報センターのTSUBAME4.0で利用する方法について説明しています。また、TSUBAME4.0を利用するにあたっては、[TSUBAME4.0利用の手引き](#)もご覧ください。利用環境や注意事項などが詳細に記述されています。COMSOLの開発元ではCOMSOLに関するWebページを公開しています。次のアドレスを参照してください。

<https://www.comsol.com>

また、計測エンジニアリングシステム株式会社のCOMSOLのページは次の通りです。

<https://kesco.co.jp/service/comsol/>

本書は計測エンジニアリング株式会社様作成の [はじめのCOMSOL Multiphysics](#) の操作を元に作成しております。



COMSOL Multiphysicsは有償アプリケーションのため、学内利用者のみ使用可能です。
COMSOL Multiphysicsの利用には別途アプリケーション利用料が必要になります。
詳細は[利用料の概略](#)のアプリケーション (TSUBAME4.0で一部有償化) をご覧ください。

1.1. 利用できるバージョン

TSUBAME4.0で利用可能な最新バージョンについてはTSUBAME計算サービスWebサイトの [サポートされているアプリケーション ページ](#) をご確認ください。研究に支障がない限り、バグ修正の入っている最新版をご利用下さい。

1.2. 概要

COMSOL Multiphysicsはマルチフィジックス解析を前提として設計されている有限要素法(FEM)ベースの汎用物理シミュレーションソフトウェアです。

最大の特徴は「マルチフィジックス(連成)解析に対する柔軟性とソフトウェアのオープン性」。マルチフィジックス機能はあらゆる物理現象の組み合わせに対応(3種類以上の物理現象を無制限かつ自由に組み合わせで連成解析)できるので、実工学現象に即した高精度モデリング シミュレーションが可能です。

伝熱・流体・構造・電磁場・音響・物質輸送・移動メッシュのような基本物理、そして一般偏微分方程式系のためのシミュレーション機能を搭載しています。コアソルバが一般的な偏微分方程式系に対応しているため、分野を問わず物理現象全般に対しシミュレーションが実行可能です。

モデル作成/CADデータ読み込み フィジックス選択 材料設定 初期条件/境界条件設定 メッシュ作成 ソルバ処理 ポスト処理(グラフや3D動画面生成を含む)まで一貫して1つのソフトウェアのGUI上で処理できるため、今までのように対象とする物理現象によっていくつもモデルを用意したり、次の処理のためにパラメータを加工したり、ソフト間でデータを受け渡したりする必要はありません。

1.3. マニュアル

comsol起動後にHELP>Documentationより確認したい項目のマニュアルを参照ください。

</apps/t4/rhel9/ism/comsol/<version>/multiphysics/doc/pdf/>以下にpdfファイルもございますので、ブラウザから参照できない場合はこちらをご利用下さい。

1.4. COMSOL Multiphysicsの利用の流れ

COMSOL Multiphysicsを利用する場合は大きく分けて、COMSOL Desktopの統合環境を利用して計算を行う場合とコマンドラインから直接、各種計算プログラムを実行する場合の2種類がございます。基本的にはCOMSOL Desktopでモデルを作成し、作成したモデルをTSUBAME4.0上で解析する流れを想定しております。COMSOL Desktopにもジョブの投入機能はありますが、ライセンス数が少ないため、TSUBAMEではサーバデーモンはオ

MITTされております。

本書ではCOMSOL環境の概要を、COMSOL Desktopのモデルビルダの使用方法を示す例とともに解説します。

2. COMSOL Multiphysicsの使用方法

2.1. COMSOL Multiphysicsのコマンドライン実行

2.1.1. インタラクティブ実行

ログイン方法を参考にログインノードにログイン後、インタラクティブノードを利用したX転送を参考にノードをX転送付きで確保して下さい。以下以降の例では、全て計算ノードにログインした状態でいきます。

2.1.1.1. CUI実行

プラズマモジュールのアルゴンガス充填サンプルを用いたインタラクティブ処理を以下に示します。計算ノードにログインし、実行してください。

以下はあくまでもコマンドサンプルです。実際の計算には入力ファイルが必要となります。

```
$ cd <利用したいディレクトリ>
$ module load comsol/62_u2
$ comsol batch -inputfile argon_dbd_ld.mph
```

28CPUを利用した並列計算

*mphファイルの構成によっては並列計算を行いません。

```
$ cd <利用したいディレクトリ>
$ module load comsol/62_u2
$ comsol batch -np 28 -inputfile argon_dbd_ld.mph
```

ヘルプコマンドの内容

comsol -helpコマンドでコマンドオプションの確認ができます。バージョンによって内容が異なる場合がありますので、利用されるバージョンに合わせてオプションの詳細については適宜確認してください。

62アップデート2のヘルプコマンド例

```
$ module load comsol/62_u2
$ comsol --help
Usage: comsol [options] [target] [target arguments]

COMSOL commands:

  comsol                Run COMSOL Multiphysics Desktop
  comsol batch          Run a COMSOL job
  comsol compile        Compile a model file for Java or compile an
                        application into an executable application
                        (the latter option requires COMSOL Compiler)
  comsol mphclient      Run COMSOL Multiphysics Desktop client
  comsol mphserver      Run COMSOL Multiphysics Server
  comsol mphserver matlab Run MATLAB with COMSOL Multiphysics Server
  comsol hydra          Run Hydra commands

COMSOL options:

  -3drend <{ogl}|sw>    3D renderer: OpenGL or software rendering
  -alloc <{auto}|native|scalable>
                        Select from using the native memory allocator
                        or a scalable memory allocator
  -applicationsroot <path>
                        Specify custom path to the COMSOL Application
                        Libraries root directory
  -autosave <{on}|off>  Control saving of recovery files
  -blas <{auto}|mkl|blas|aocl|path>
                        BLAS library to use
  -blaspath <path>      Set path to BLAS library
  -c <path>              Path to license file
  -ckl                  Use class-kit license
  -comsolinfile <path>  Path to .ini-file to use when launching
                        COMSOL
  -configuration <path>
                        Path to directory for storing the state for
                        the GUI between sessions, and for performing
                        different caching tasks
  -data <path>          Path to data directory
  -docroot <path>       Specify custom path to the COMSOL documentation
                        root directory
  -forcecomsolgcc       Force load of GCC libraries shipped with
                        COMSOL
  -forcegcc             Force load of GCC libraries
  -h, -help            Show this help message
  -keeplicenses <on|off>
                        Keep checked out licenses throughout session
```

```

-mpmode <throughput|
  turnaround|owner> Set multiprocessor mode
-np <no. of cores|(auto)> Set number of cores
-numafirst <numa number> Set first NUMA node to bind process to
-numasets <no. of sets> Set number of NUMA nodes to optimize
  processor usage
-prefdir <path> Path to preference directory
-recoverydir <path> Path to recovery directories
-tmpdir <path> Path to temporary directory
-v, -version Show version information

Cluster options:

-clusterpartmethod <{off}|
  mo|nd|
  wnd> Cluster partitioning method
-clusterstorage <{all}|
  single|
  shared> Cluster storage format
-f <path> Set path to hostfile
-mpi <{auto}|mpich2|intel|
  intelmt|user|path> MPI library to use. path requires
  environment variable COMSOL_MPI_PATH
  to be set
-mpiarg <arg> MPI cluster-specific command arguments
-mpibootstrap <{ssh}|rsh|
  fork|slurm|
  ll|lsf|
  pdsh|pbs|
  pbsdsh|
  persist|
  sge|jmi> Set bootstrap server (for Hydra)
-mpibootstrapexec <path> Set executable used by bootstrap server
-mpidebug <debug level> Set the MPI debug level
-mpienablex Enable Xlib forwarding
-mpifabrics fabric1:fabric2 Select network fabrics where
  fabric1 is one of <shm,ofi>
  and fabric2 is one of <ofi>
-mpihosts <list of hosts> Comma separated list of hosts
-mpiio <{on}|off|gpfs|
  lustre|panfs|
  ufs|nfs|daos> Set MPI IO mode
-mpiofiprovider <mlx|tcp|
  psm2|psm3|
  sockets|
  efa|rxm|
  verbs> Choose Open Fabrics interface
-mpiofiroot <path> Set path to Open Fabrics installation root
-mpirmk <slurm|ll|lsf|sge|
  pbs|cobalt> Select resource management kernel
-mpipath <file> MPI shared library file
-mpiroot <path> Set path to root of MPI library installation
-nn <no. of nodes> Number of nodes
-nnhost <no. of nodes> Number of nodes on each host
-scalapack <{auto}|mk1|
  scalapack|
  user|path> ScaLaPACK library to use. path requires
  environment variable COMSOL_SCALAPACK_PATH
  to be set
-scalapackpath <file> Set path to ScaLaPACK library

-open <filename> The file to open
-edit <filename> The application file to edit
-run <filename> The application file to run

Options when running an application:

-appargnames <names> Comma-separated list of argument names
-appargvalues <values> Comma-separated list of argument values
-appargsfile <filename> A file with arguments to the application
  Each line in the file should have the format
  <name>=<value>
-appargvarlist <names> Comma-separated list of argument names
  whose values are on file
-appargfilelist <filenames> Comma-separated list of file names
  Each file contains the value for one argument

Example:

comsol -open <filename>

```

`-tmpdir` オプション付きで起動することで、COMSOL Multiphysics ソフトウェアは指定ディレクトリをテンポラリファイル保存ディレクトリとして使用します。また、環境変数 `COMSOL_TMPDIR` を使用することもできます。COMSOL Multiphysics が環境設定ファイルを格納するディレクトリを指定するには、`-presdir` オプションを使用します。

2.1.1.2. GUI実行

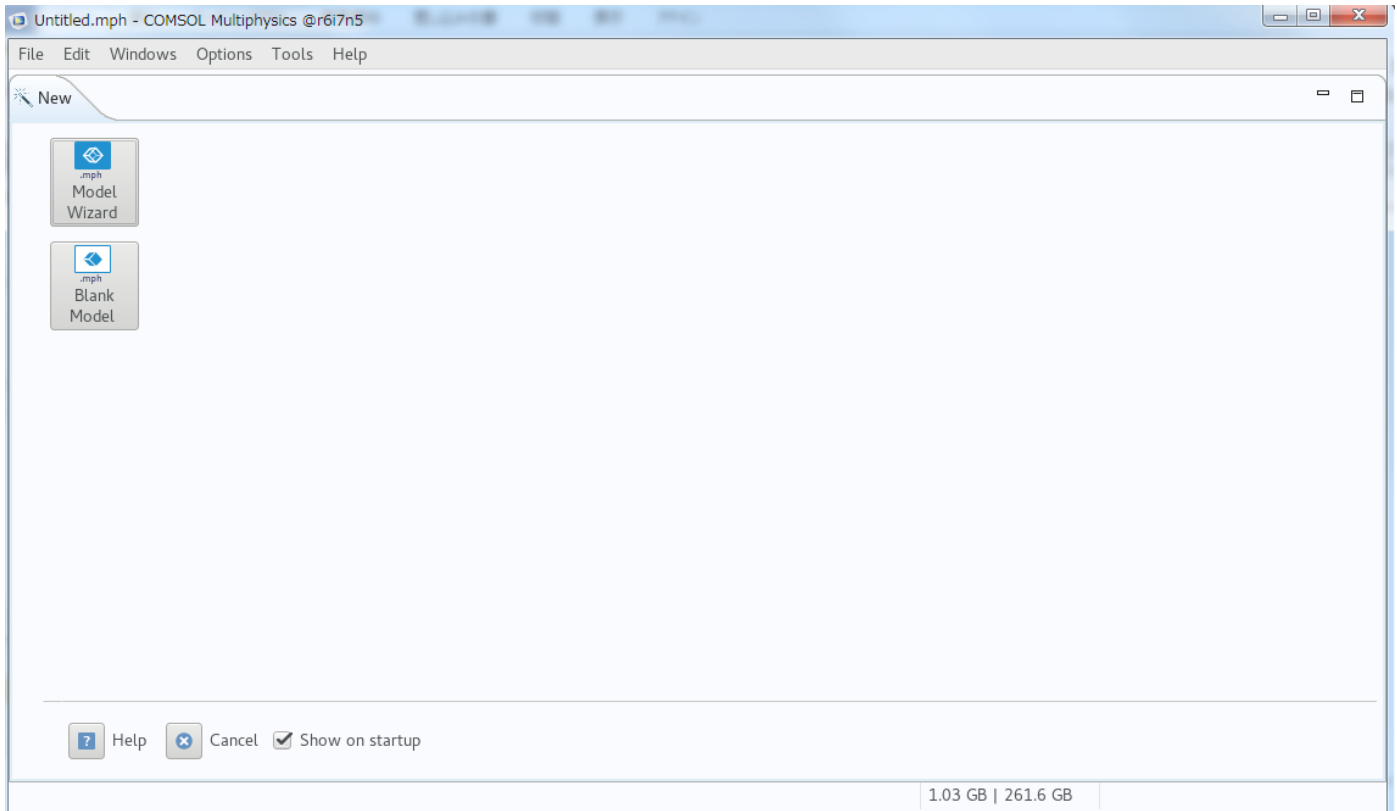
qrshで接続したノードから直接X転送を行う場合は、下記の手順にて接続ください。なお、`node_f`のみが対象となります。`node_f`以外を利用する場合は、SSHが利用できないため、マルチノードでの実行はできません。

コマンド実行例

例では1ノードを2時間接続で、割り当てノードとしてr1n1が割り当てられた場合を想定しております。

割り当てノードはコマンド実行時に空いているノードですので、明示的にノードを指定することはできません。

```
#qrshの実行
$ qrsh -g [TSUBAMEグループ] -l node_f=1 -l h_rt=2:00:00
Tue Apr 02 08:17:19 JST 2024
r1n1:~> module load comsol/62_u2
r1n1:~> comsol
```



comsolスタートアップ画面

GUIでのマルチノード計算を行う場合は以下の例のように実施することで計算可能です。以下の例では GSICGROUP に所属している GSICUSER が node_f を4ノード、3時間利用する場合の例でr4n3, r6n5, r2n0 および r2n4 がNode0から3にそれぞれアサインされています。実際の投入は所属グループを指定してください。

GUI並列実行の場合はライブラリの問題があるため、Run Application機能による計算が利用できませんのでcomputeによる計算を実行ください。

```
login1:~> qrsh -l node_f=4,h_rt=3:: -g GSICGROUP
r4n3:~> module load comsol/62_u2
r4n3:~> comsol -mpibootstrap ssh -mpihosts `awk '{ print $1 }' $PE_HOSTFILE |xargs | sed -e 's/ //g'` -nn `cat $PE_HOSTFILE | wc -l`
(r4n3:0)
(r6n5:1)
(r2n0:2)
(r2n4:3)
Node 0 is running on host: r4n3
Node 0 has address: r4n3
Node 1 is running on host: r6n5
Node 1 has address: r6n5
Node 2 is running on host: r2n0
Node 2 has address: r2n0
Node 3 is running on host: r2n4
Node 3 has address: r2n4
```

各ノードでの実行確認の例

以下はaluminum_extrusion_fsi.mphをGUIで実行した例となります。Node0のr4n3でmpexec.hydra が実行され、comsolclusterが全ノードで実行されていることが確認できます。topコマンド等でも確認は可能です。

アサインされた全ノードで echo \$HOSTNAME; date; ps aux | grep comsollauncher コマンドを実行した結果

```

r4n3
Thu Apr 11 14:43:38 JST 2024
GSICUSER 20394 0.0 0.0 17788 3136 pts/0 S+ 14:30 0:00 /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/ext/impi/glnxa64/bin64/mpiexec.hydra -
hosts r4n3 r6n5 r2n0 r2n4 -bootstrap ssh -print-rank-map -env LD_PRELOAD /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/java/glnxa64/jre/lib/amd64/
libjsig.so:/apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/ext/impi/glnxa64/lib64/libmpi.so -n 4 -envall /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/
multiphysics/bin/glnxa64/comsollauncher --launcher.ini /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/bin/glnxa64/comsolcluster.ini
GSICUSER 20402 1680 1.5 16195576 4127184 pts/0 S1 14:30 213:41 /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/bin/glnxa64/comsollauncher --
launcher.ini /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/bin/glnxa64/comsolcluster.ini

r6n5
Thu Apr 11 14:43:38 JST 2024
GSICUSER 15069 1744 1.3 11840084 3600304 ? S1 14:30 221:39 /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/bin/glnxa64/comsollauncher --
launcher.ini /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/bin/glnxa64/comsolcluster.ini

r2n0
Thu Apr 11 14:43:38 JST 2024
GSICUSER 10435 1743 1.5 11840084 4152340 ? S1 14:30 221:35 /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/bin/glnxa64/comsollauncher --
launcher.ini /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/bin/glnxa64/comsolcluster.ini

r2n4
Thu Apr 17 14:43:38 JST 2024
GSICUSER 22310 1742 1.5 12019600 3981912 ? S1 14:30 221:27 /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/bin/glnxa64/comsollauncher --
launcher.ini /apps/t4/rhel9/ism/comsol/comsol62_u2/multiphysics/bin/glnxa64/comsolcluster.ini

```

2.1.2. バッチジョブスケジューラーAGEによる実行

qsubコマンドによるバッチ投入が可能です。

```
$ qsub -g [TSUBAMEグループ] スクリプト名
```

以下のtest.shスクリプトをGSICGROUPに入っているユーザが投入する場合は以下のような例となります。
実際の投入は自分が所属しているグループを指定してください。

```
$ qsub -g GSICGROUP test.sh
```

スクリプト例(test.sh)

オプションの詳細についてはTSUBAME4.0利用の手引きのジョブスクリプトをご確認ください。

```

#!/bin/bash
#$ -cwd
#$ -N COMSOL_test_job
#$ -e uge.err
#$ -o uge.out
#$ -l node_f=2
#$ -l h_rt=0:10:00
#$ -V

module load comsol/62_u2

export COMSOL_TMPDIR=${TMPDIR}

comsol batch -mpibootstrap ssh -mpihosts `awk '{ print $1 }' $PE_HOSTFILE |xargs | sed -e 's/ /,/g'` -nn `cat $PE_HOSTFILE | wc -l` -inputfile
inputfile.mph -outputfile outputfile.mph

```

インプットにサンプリファイルmicromixer_cluster_noc.mphを利用した場合のログ(uge.out)

r6n4とr2n1の2ノードで計算が完了している。

```

(r6n4:0)
(r2n1:1)
Node 0 is running on host: r6n4
Node 0 has address: r6n4
Node 1 is running on host: r2n1
Node 1 has address: r2n1
*****
***COMSOL 5.3.1.275 progress output file***
*****
Tue Jul 17 15:54:13 JST 2018
COMSOL Multiphysics 5.3a (Build: 275) starting in batch mode
Opening file: /gs/bs/tga-hpe_group00/apptest/ism/comsol/comsol/batch/micromixer_cluster_noc.mph
Open time: 6 s.
Running: Study 1
Settings for Cluster Computing 2 are ignored in distributed mode.
<---- Compile Equations: Stationary in Study 1/Solution 1 (sol1) -----
Started at 17-Jul-2018 15:54:20.
Geometry shape order: Linear
Running in distributed mode using 2 nodes.
Running on 2 x Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2680 v4 at 2.40 GHz.
Using 2 sockets with 28 cores in total on r6i4n4.
Available memory: 257.59 GB.
Current Progress: 0 % - Free Tetrahedral 1

```



```

----- Compile Equations: Stationary 2 in Study 1/Solution 1 (sol1) ----->
----- Current Progress: 52 % - Dependent Variables 2
Memory: 3409/14198 11418/24309
<----- Stationary Solver 2 in Study 1/Solution 1 (sol1) ----->
Started at 17-Jul-2018 15:58:44.
----- Current Progress: 55 % - Stationary Solver 2
Memory: 3487/14198 11487/24309
Nonlinear solver
Number of degrees of freedom solved for: 238542 (plus 30978 internal DOFs).
----- Current Progress: 55 % - Assembling matrices
Memory: 3492/14198 12378/24309
----- Current Progress: 55 % - Constraint handling
Memory: 3431/14198 11418/24309
----- Current Progress: 55 % - Assembling matrices
Memory: 3524/14198 11688/24309
----- Current Progress: 55 % -
Memory: 3466/14198 11452/24309
Nonsymmetric matrix found.
Scales for dependent variables:
Concentration (compl.c): 27
Orthonormal null-space function used.
----- Current Progress: 55 % - Constraint handling
Memory: 3493/14198 11481/24309
----- Current Progress: 55 % - Matrix factorization
Memory: 3430/14198 11418/24309
Iter      SolEst      ResEst      Damping      StepSize #Res #Jac #Sol  LinErr  LinRes
----- Current Progress: 55 % - Solving linear system
Memory: 4204/14198 12341/24309
----- Current Progress: 55 % - Assembling matrices
Memory: 4257/14198 12430/24309
----- Current Progress: 55 % - Solving linear system
Memory: 4235/14198 12366/24309
  1      0.66      2.2e+15      0.0100000      0.67  2    1    2  6.5e-13  3.5e-15
----- Current Progress: 59 % - Assembling matrices
Memory: 4241/14198 12366/24309
----- Current Progress: 59 % -
----- Current Progress: 59 % - Assembling sparsity pattern
Memory: 4248/14198 12373/24309
----- Current Progress: 59 % - Assembling matrices
Memory: 4649/14198 13618/24309
----- Current Progress: 59 % -
Memory: 4326/14198 12451/24309
----- Current Progress: 59 % - Constraint handling
Memory: 4382/14198 12507/24309
----- Current Progress: 59 % - Matrix factorization
Memory: 4279/14198 12404/24309
----- Current Progress: 59 % - Solving linear system
Memory: 4310/14198 12436/24309
----- Current Progress: 59 % - Assembling matrices
Memory: 4393/14198 14164/24309
----- Current Progress: 59 % - Solving linear system
Memory: 4312/14198 12436/24309
  2      0.63      2e+04      0.1000000      0.7   3    2    4  4.6e-13  3.7e-15
----- Current Progress: 64 % -
----- Current Progress: 64 % - Assembling sparsity pattern
Memory: 4313/14198 12436/24309
----- Current Progress: 64 % - Assembling matrices
Memory: 4498/14198 13422/24309
----- Current Progress: 64 % -
Memory: 4360/14198 12483/24309
----- Current Progress: 64 % - Constraint handling
Memory: 4423/14198 12546/24309
----- Current Progress: 64 % - Matrix factorization
Memory: 4281/14198 12404/24309
----- Current Progress: 64 % - Solving linear system
Memory: 4312/14198 12436/24309
----- Current Progress: 64 % - Assembling matrices
Memory: 4367/14198 14164/24309
----- Current Progress: 64 % - Constraint handling
Memory: 4313/14198 12436/24309
----- Current Progress: 64 % - Solving linear system
----- Current Progress: 90 % -
Memory: 4314/14198 12436/24309
----- Current Progress: 90 % - Assembling sparsity pattern
----- Current Progress: 90 % - Assembling matrices
Memory: 4604/14198 13446/24309
----- Current Progress: 90 % -
Memory: 4301/14198 12422/24309
----- Current Progress: 90 % - Constraint handling
Memory: 4398/14198 12520/24309
----- Current Progress: 90 % - Matrix factorization
Memory: 4282/14198 12404/24309
----- Current Progress: 90 % - Solving linear system
Memory: 4314/14198 12436/24309
----- Current Progress: 90 % - Assembling matrices
Memory: 4446/14198 14164/24309
----- Current Progress: 90 % - Constraint handling
Memory: 4315/14198 12436/24309
----- Current Progress: 90 % - Solving linear system
  4      0.041      3.6e+04      1.0000000      0.073  5    4    8  4.4e-13  4.3e-15
----- Current Progress: 81 % -
----- Current Progress: 81 % - Assembling matrices
Memory: 4503/14198 13182/24309

```

```

----- Current Progress: 81 % -
Memory: 4368/14198 12489/24309
----- Current Progress: 81 % - Constraint handling
Memory: 4431/14198 12552/24309
----- Current Progress: 81 % - Matrix factorization
Memory: 4283/14198 12404/24309
----- Current Progress: 81 % - Solving linear system
Memory: 4315/14198 12436/24309
----- Current Progress: 81 % - Assembling matrices
Memory: 4389/14198 14164/24309
----- Current Progress: 81 % - Solving linear system
Memory: 4316/14198 12436/24309
      5      0.024      2e+04      1.0000000      0.05      6      5      10      4.4e-13      4.3e-15
----- Current Progress: 87 % -
Memory: 4317/14198 12436/24309
----- Current Progress: 87 % - Assembling sparsity pattern
Memory: 4330/14198 12500/24309
----- Current Progress: 87 % - Assembling matrices
Memory: 4795/14198 13933/24309
----- Current Progress: 87 % -
Memory: 4367/14198 12487/24309
----- Current Progress: 87 % - Constraint handling
Memory: 4431/14198 12550/24309
----- Current Progress: 87 % - Matrix factorization
Memory: 4285/14198 12404/24309
----- Current Progress: 87 % - Solving linear system
Memory: 4317/14198 12436/24309
----- Current Progress: 87 % - Assembling matrices
Memory: 4448/14198 14172/24309
----- Current Progress: 87 % - Constraint handling
Memory: 4323/14198 12444/24309
----- Current Progress: 87 % - Solving linear system
      6      0.013      1.2e+04      1.0000000      0.027      7      6      12      5.4e-13      3.5e-15
----- Current Progress: 91 % -
Memory: 4324/14198 12444/24309
----- Current Progress: 91 % - Assembling sparsity pattern
----- Current Progress: 91 % - Assembling matrices
Memory: 4550/14198 13391/24309
----- Current Progress: 91 % -
Memory: 4343/14198 12463/24309
----- Current Progress: 91 % - Constraint handling
Memory: 4406/14198 12525/24309
----- Current Progress: 91 % - Matrix factorization
Memory: 4292/14198 12412/24309
----- Current Progress: 91 % - Solving linear system
Memory: 4324/14198 12444/24309
----- Current Progress: 91 % - Assembling matrices
Memory: 4399/14198 14172/24309
----- Current Progress: 91 % - Constraint handling
Memory: 4325/14198 12444/24309
----- Current Progress: 91 % - Solving linear system
      7      0.0061      8.2e+03      1.0000000      0.014      8      7      14      6.1e-13      2.7e-15
----- Current Progress: 94 % -
----- Current Progress: 94 % - Assembling matrices
Memory: 4509/14198 13262/24309
----- Current Progress: 94 % -
Memory: 4368/14198 12488/24309
----- Current Progress: 94 % - Constraint handling
Memory: 4431/14198 12550/24309
----- Current Progress: 94 % - Matrix factorization
Memory: 4324/14198 12443/24309
----- Current Progress: 94 % - Solving linear system
Memory: 4356/14198 12475/24309
----- Current Progress: 94 % - Assembling matrices
Memory: 4433/14198 14203/24309
----- Current Progress: 94 % - Solving linear system
Memory: 4356/14198 12475/24309
      8      0.0033      5.6e+03      1.0000000      0.0063      9      8      16      5.3e-13      2.2e-15
----- Current Progress: 95 % -
----- Current Progress: 95 % - Assembling matrices
Memory: 4528/14198 14130/24309
----- Current Progress: 95 % -
Memory: 4342/14198 12461/24309
----- Current Progress: 95 % - Constraint handling
Memory: 4405/14198 12524/24309
----- Current Progress: 95 % - Matrix factorization
Memory: 4293/14198 12412/24309
----- Current Progress: 95 % - Solving linear system
Memory: 4325/14198 12444/24309
----- Current Progress: 95 % - Assembling matrices
Memory: 4491/14198 14172/24309
----- Current Progress: 95 % - Constraint handling
Memory: 4325/14198 12444/24309
----- Current Progress: 95 % - Solving linear system
      9      0.0021      3.9e+03      1.0000000      0.0033      10      9      18      6.2e-13      2.2e-15
----- Current Progress: 96 % -
----- Current Progress: 96 % - Assembling matrices
Memory: 4533/14198 14212/24309
----- Current Progress: 96 % -
Memory: 4344/14198 12463/24309
----- Current Progress: 96 % - Constraint handling
Memory: 4407/14198 12525/24309
----- Current Progress: 96 % - Matrix factorization
Memory: 4293/14198 12412/24309

```


2.1.4. 利用可能なモジュール一覧

利用可能なcomsolモジュールの確認には、Options->licensed and Used Productsをご確認下さい。

Licensed and Used Products in Session @r1n11 ✕

— License number: 5094742 —

Clear a check box to block your use of a product.
 Grayed out product is used in the current session.

Keep checked out licenses when creating or opening an application.

- COMSOL Multiphysics
- AC/DC Module
- CFD Module
- Heat Transfer Module
- Plasma Module
- RF Module
- Structural Mechanics Module
- Wave Optics Module
- CAD Import Module

— Other products —

Acoustics Module	Molecular Flow Module	File Import for CATIA® V5
Battery Design Module	Multibody Dynamics Module	LiveLink™ for AutoCAD®
Chemical Reaction Engineering Module	Nonlinear Structural Materials Module	LiveLink™ for Excel®
Composite Materials Module	Optimization Module	LiveLink™ for Inventor®
Corrosion Module	Particle Tracing Module	LiveLink™ for MATLAB®
Electrochemistry Module	Pipe Flow Module	LiveLink™ for PTC® Creo® Parametric™
Electrodeposition Module	Polymer Flow Module	LiveLink™ for Revit®
Fatigue Module	Porous Media Flow Module	LiveLink™ for Simulink®
Fuel Cell & Electrolyzer Module	Ray Optics Module	LiveLink™ for Solid Edge®
Geomechanics Module	Rotordynamics Module	LiveLink™ for SOLIDWORKS®
Liquid & Gas Properties Module	Semiconductor Module	COMSOL Compiler

3. COMSOL Desktopの使用方法

3.1. COMSOL Desktopの概要

COMSOL DesktopはCOMSOL Multiphysicsの統合GUI環境です。モデルビルダとアプリケーションビルダの切り替えが随時可能で、使いやすいように工夫されており、モデルビルダは単独 多重複合の物理現象の数学モデルを設定する機能をもった操作ウィンドウです。物理モデリング、シミュレーション、そしてアプリケーション設計一式の統合環境が備わっており、モデル用に使いやすいインターフェースを構築するために必要なツールがあります。デスクトップは、ユーザそれぞれのニーズに合わせてカスタマイズでき、ウィンドウは、サイズ変更、移動、ドッキング、切り離しが可能です。レイアウトを変更すると、セッションの終了時に保存され、次回以降も利用できます。モデルを構築する際には、さらに追加のウィンドウとウィジェットが表示されます。ジョブの投入機能はありますが、ライセンス数が少ないため、サーバデーモンはオミットされています。

3.2. TSUBAME4.0上でのCOMSOL Desktopの起動

下記コマンドでTSUBAME4.0にログインしてください。

```
$ ssh login.t4.gsic.titech.ac.jp -l USER-ID -i 鍵ファイル -YC
```

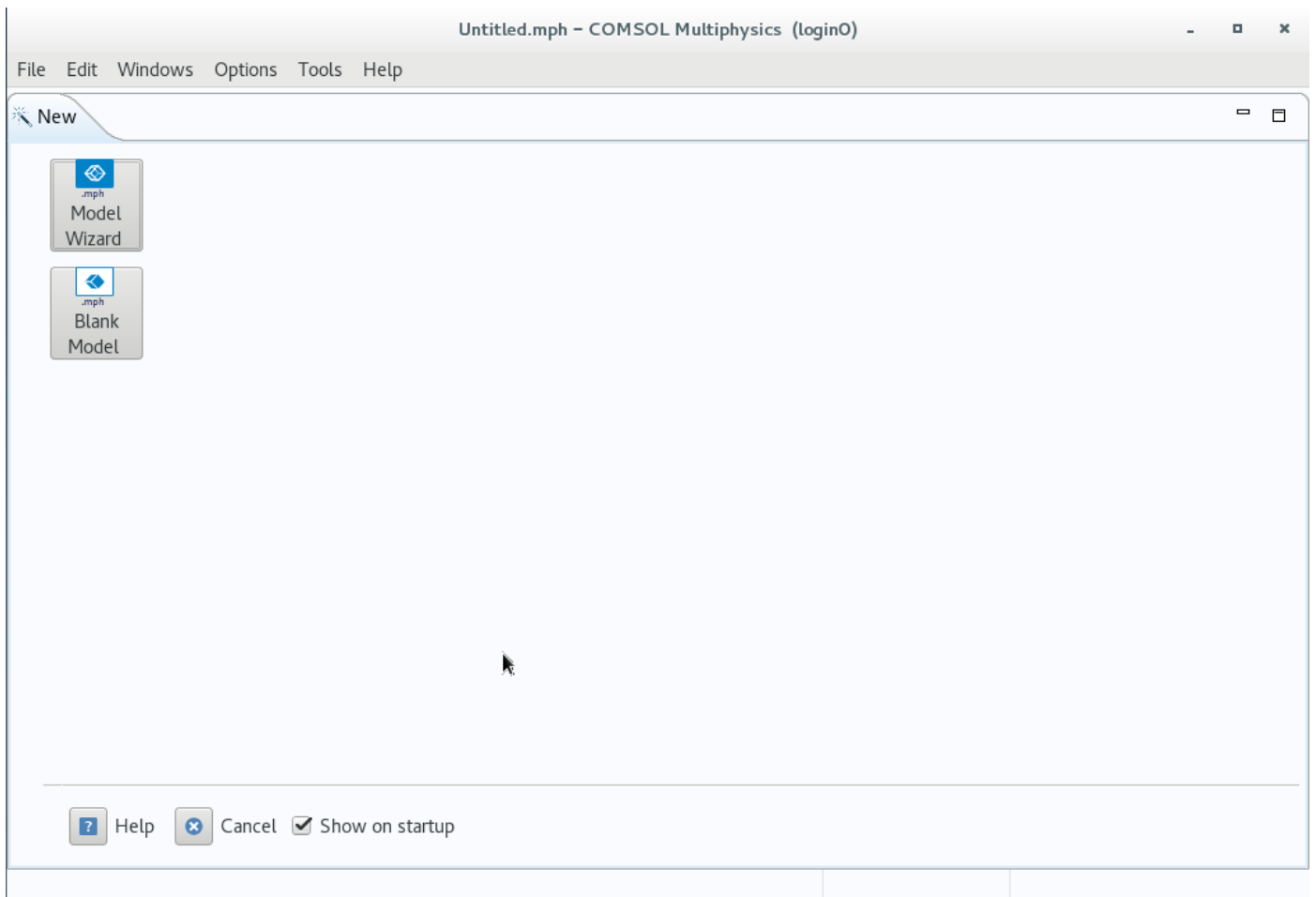
コマンド実行例

例では2時間接続で、割り当てノードとしてr1n1が割り当てられた場合を想定しております。割り当てノードはコマンド実行時に空いているノードですので、明示的にノードを指定することはできません。

```
#qrshの実行
$ qrsh -g [TSUBAMEグループ] -l node_f=1 -l h_rt=2:00:00
Tue Apr 02 08:17:19 JST 2024
r1n1:~> module load <読み込みたいアプリケーション>
r1n1:~> <実行したいアプリケーションの実行コマンド>
```

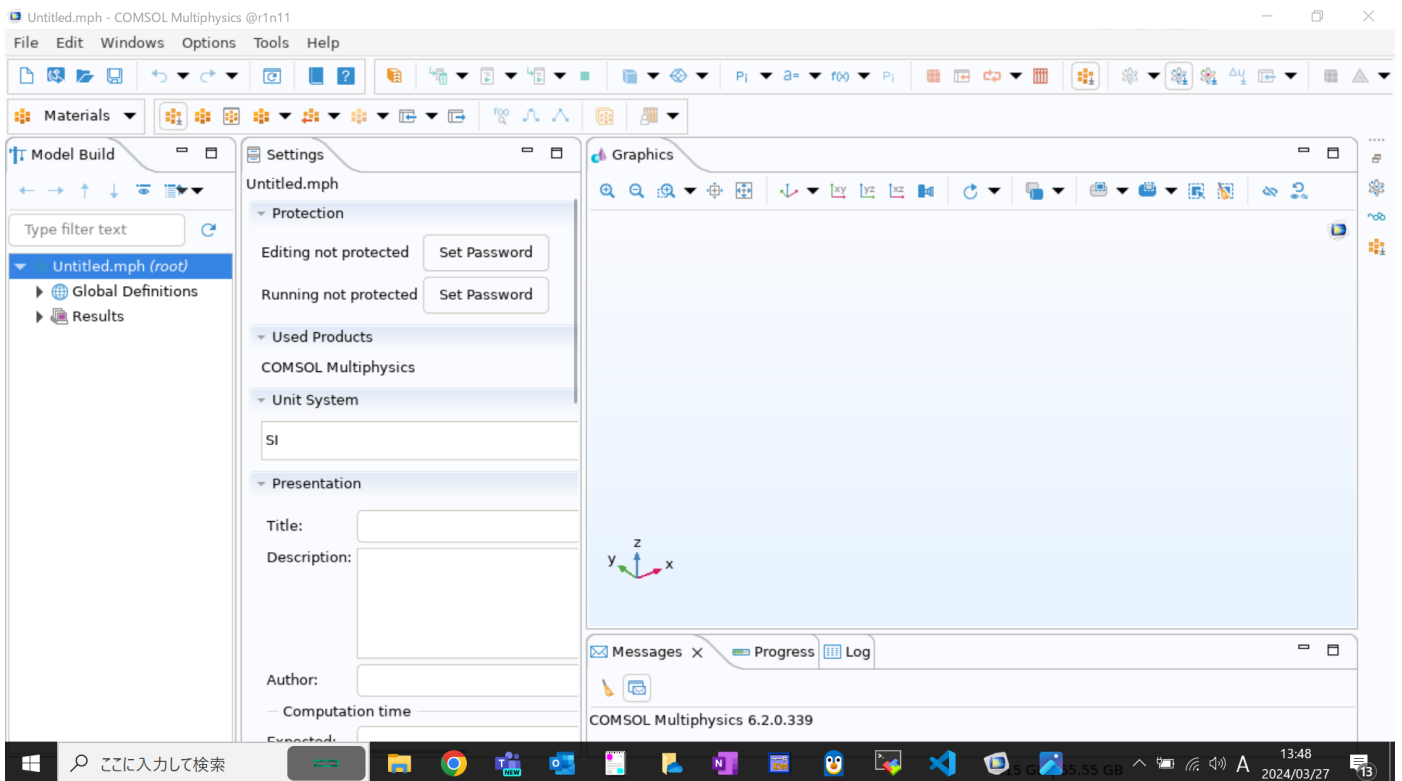
例えば、COMSOL 62_u2を利用する場合は、以下のようにモジュールファイルを読み込み、COMSOL Desktopを起動します。

```
r1n1:~> module load comsol/62_u2
r1n1:~> comsol
```



comsolスタートアップ画面

上記のスタートアップ画面はShow on Startupのチェックをオフにすることで非表示にすることができます。



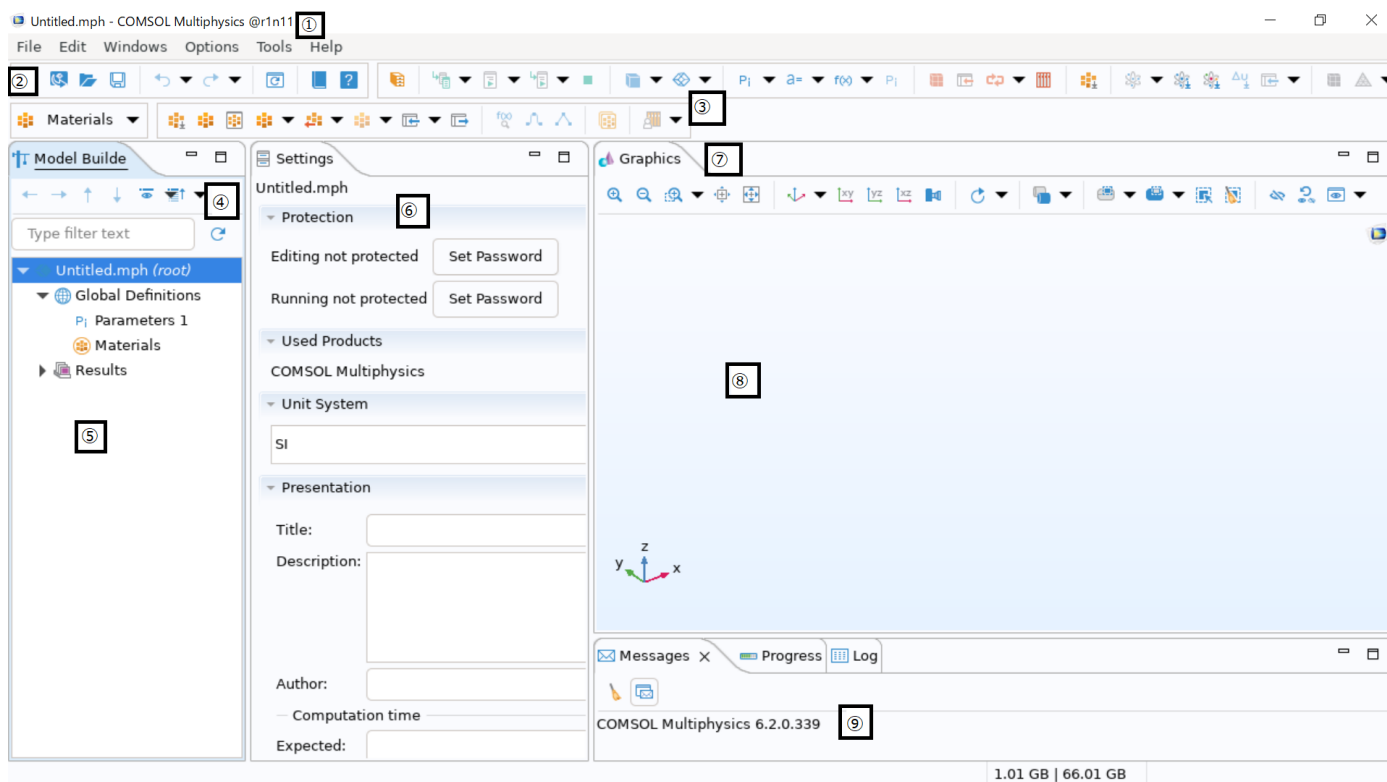
COMSOL Desktop画面

*利用しているX環境によってはエラーが発生する場合があります。その場合は以下コマンドを実行し、ヘルプを表示させ、環境に合わせたオプションを指定し、実行してください。

```
$ comsol -h
```

3.3. COMSOL Desktopの画面説明

COMSOL Desktopは以下のような複数の要素で構成されております。本項目では各項目についての説明を行います。



COMSOL Desktop画面

COMSOL Desktop画面の機能概要

図内番号	名称	概要
1	メインメニュー	詳細機能を提供します。
2	クイックアクセスツールバー	これらのボタンは、ファイルを開く/保存、取り消し/やり直し、コピー/貼り付け、削除などの機能を呼び出すときに使用します。
3	ツールバー (Windowsにはリボン)	モデリングプロセスのステップを制御するボタンとドロップダウンリストがあります
4	モデルビルダーツールバー	モデルツリー内で利用するツールを提供します。4 5をあわせてモデルビルダといいます。
5	モデルツリー	モデルツリーにはモデルの概要の他、モデルの構築と求解、結果処理に必要な機能や操作が示されます。
6	設定ウィンドウ	モデルツリーの任意のノードをクリックすると、モデルビルダの横にそのノード関連の設定ウィンドウが表示されます。
7	グラフィックスウィンドウ ツールバー	グラフィックウィンドウ内で利用するツールを提供します
8	グラフィックスウィンドウ	グラフィックスウィンドウでは、ジオメトリノード、メッシュノード、結果ノードの相互作用的なグラフィックスが表示されます。操作には、回転、パン、ズーム、選択があります。
9	情報ウィンドウ	情報ウィンドウには、求解時間、求解の進捗状況、メッシュ統計、ソルバログの他、場合によっては、結果テーブルなど、シミュレーション時に不可欠なモデル情報が表示されます。

3.3.1. メインメニュー

メインメニューは詳細な機能を提供するためのアクセスポイントです。機能の概要については下記の通りです。

File Edit Windows Options Tools Help

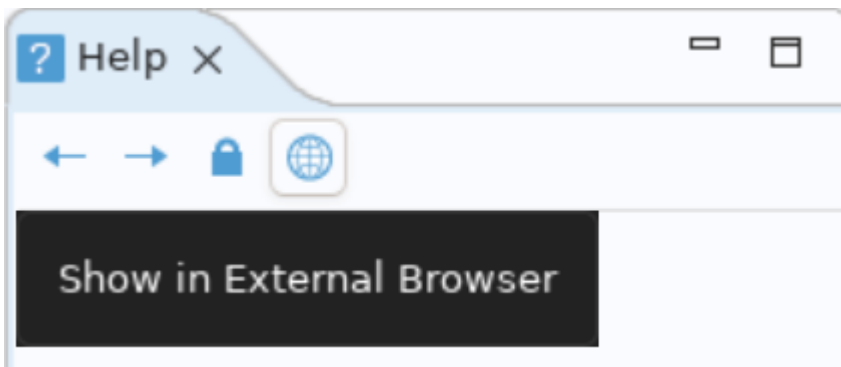
メインメニュー

メインメニューの機能

項目	機能
File	すべてのアプリケーションおよびモデルに関するアクション(COMSOL Desktopの終了も含まれます)
Edit	アプリケーションおよびモデルの変更に関連するアクション。
Window	各種機能ウィンドウのアクセスポイント。レイアウト変更についても含まれます。
Options	ライセンスおよびCOMSOL Desktopの設定
Tools	ツールバーの表示/非表示
Help	ヘルプ、キーボードショートカット、チュートリアルなどへのアクセス。テクニカルサポートへのアクセスが含まれています。



計算ノードで `Help` を参照する場合、Helpウィンドウの"Show in External Browser"アイコンをクリックします。



3.3.2. クイックアクセスツールバー

ワークスペースはリガンドなどの低分子構造やタンパク質の立体構造などといった中 大規模分子構造を可視化する領域です。



クイックアクセスツールバー

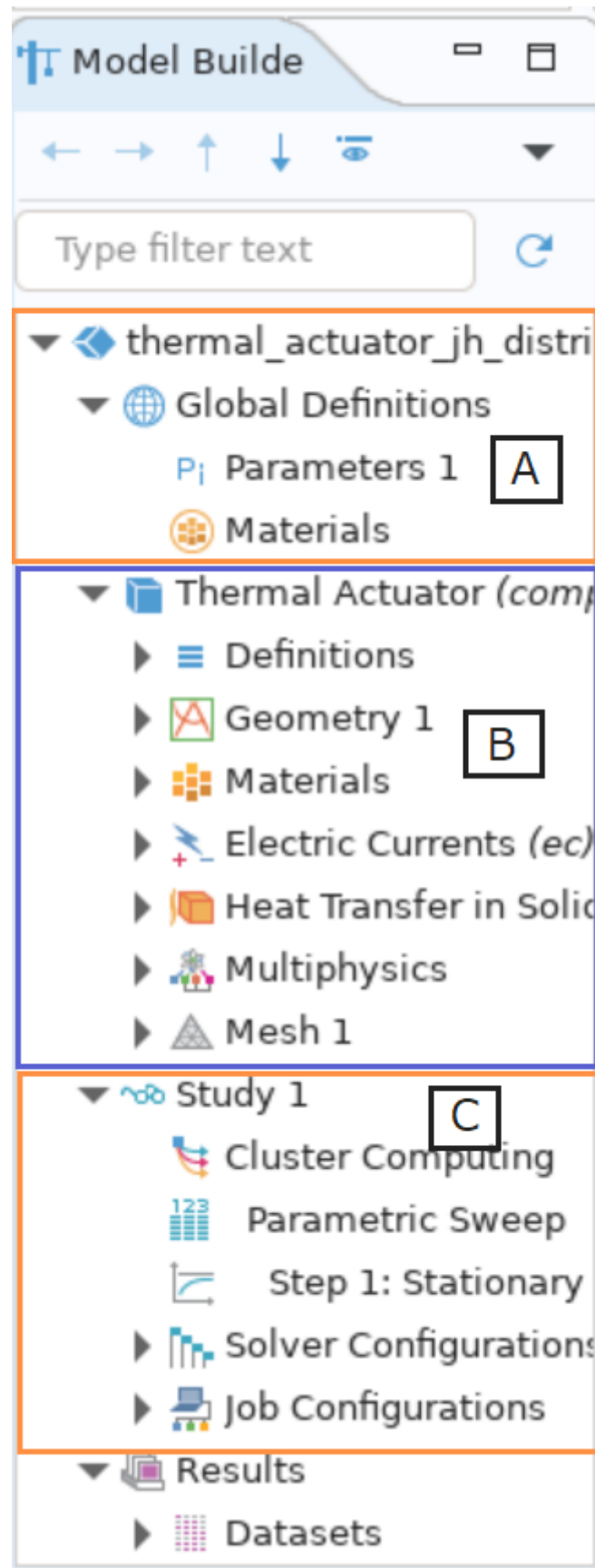
3.3.3. ツールバー



ツールバー

モデリングプロセスのステップを制御するボタンとドロップダウンリストを提供します。

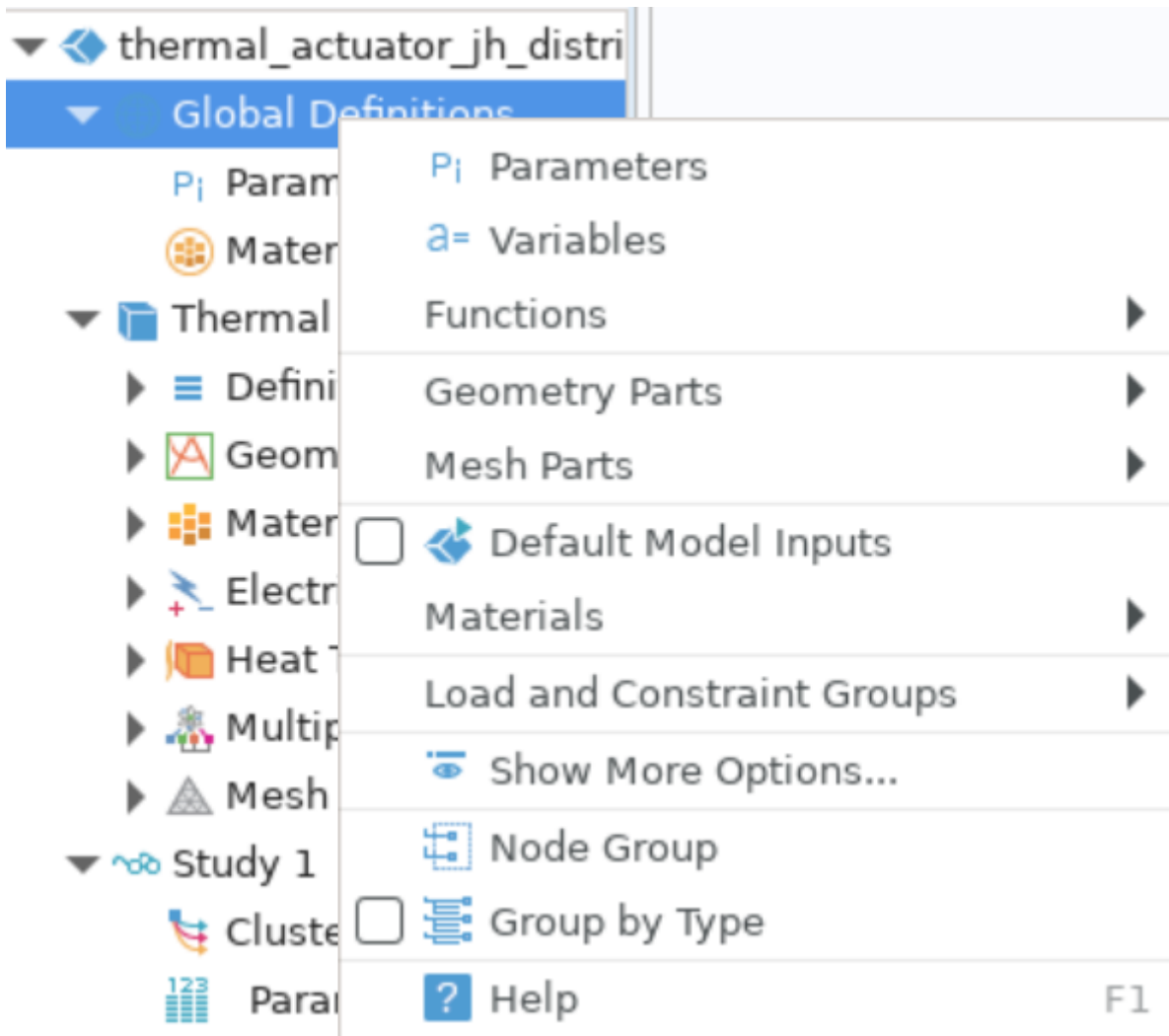
3.3.4. モデルビルダ



モデルビルダ

モデルビルダには設定項目が記載されており、右クリックして開くことで詳細な項目がツリー状に展開する コンテキストメニューという ため、あらゆる設定箇所へのアクセスが瞬時に可能になります。ここで、各設定項目、すなわちツリー状構造の各要素をノードといいます。モデルビルダの代表的なノードを以下に示します。

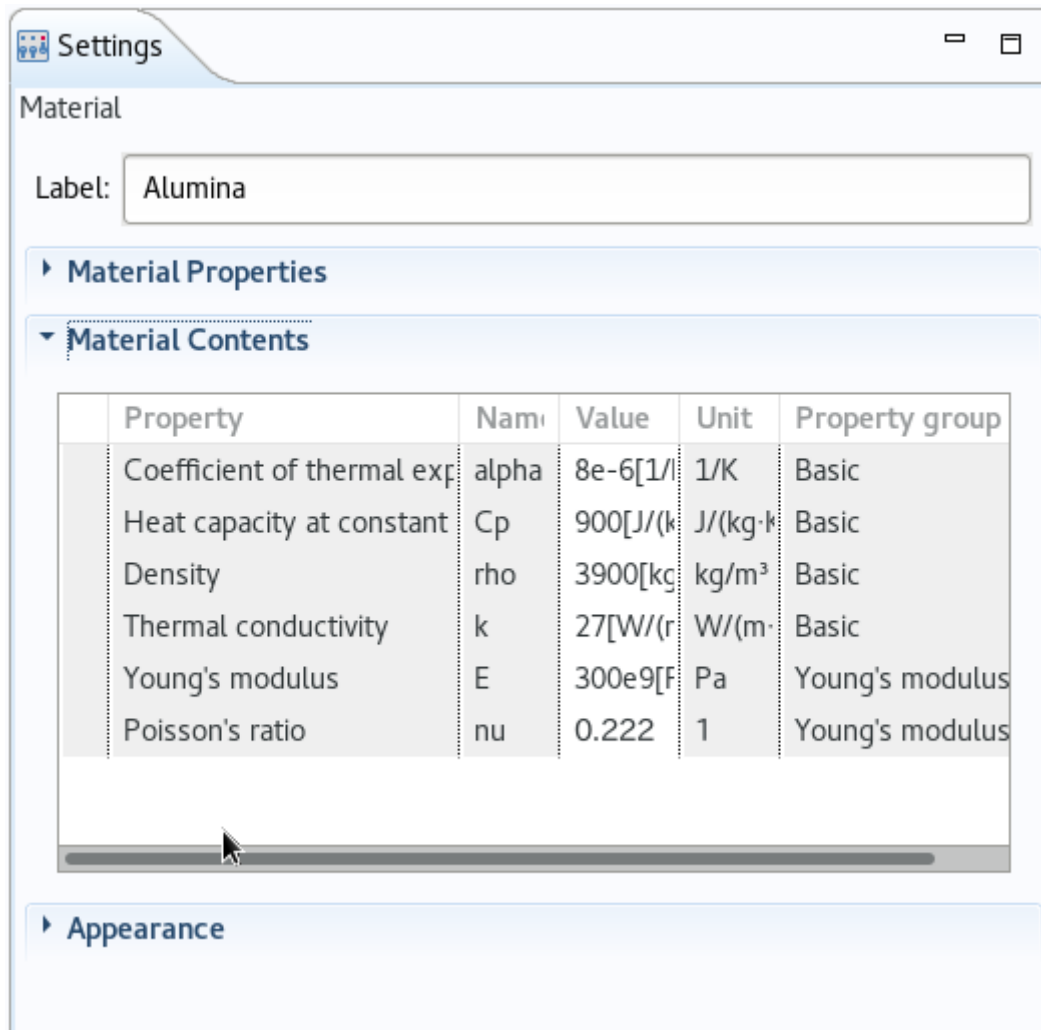
- ・グローバル定義[A] ファイル全体に使われるパラメータや変数を設定します。
- ・コンポーネント[B] モデルビルダの中にある部品という意味合いをもっています。モデルビルダが扱う現象のある側面をとらえるためにジオメトリ、材料、フィジックス、メッシュを含んでいます。
- ・スタディ-[C] モデルビルダの内容をもとに数値解析します。



コンテキストメニュー

例えば、コンテキストメニューを利用して、グローバル定義のパラメータを開く場合、グローバル定義を右クリックしてパラメータを選択することで設定したいパラメータを開くことができます。

3.3.5. 設定ウィンドウ



設定ウィンドウ

ジオメトリの寸法、材料のプロパティ、境界条件、初期条件、ソルバでシミュレーションを実行するのに必要なその他情報など、モデルの仕様をすべて入力するためのメインウィンドウです。

紹介している図は、ジオメトリノードの設定ウィンドウです。

3.3.6. プロットウィンドウ

グラフィックス出力用のウィンドウです。グラフィックスウィンドウ以外に、結果の可視化にはプロットウィンドウも使用します。複数の結果を同時に表示する場合は、複数のプロットウィンドウを使用できます。特別な例としては、モデルの実行中に求解プロセスの収束状況をグラフィカルに表示する収束プロットウィンドウがあります。これは自動的に生成されるプロットウィンドウです。

3.3.7. 情報ウィンドウ

これらは、非グラフィックス情報のウィンドウです。情報ウィンドウには、以下の種類があります

- メッセージ このウィンドウには、現在のCOMSOL Multiphysicsセッションに関する各種情報が表示されます。
- 進捗 ソルバからの進捗状況情報。停止ボタンがあります。
- ログ 自由度、求解時間、ソルバ反復データなど、ソルバからの情報。
- テーブル 結果ノードに定義されたテーブル形式の数値データ。
- 外部プロセス クラスタージョブ、クラウドジョブ、バッチジョブのコントロールパネルがあります。

3.3.8. その他のウィンドウ

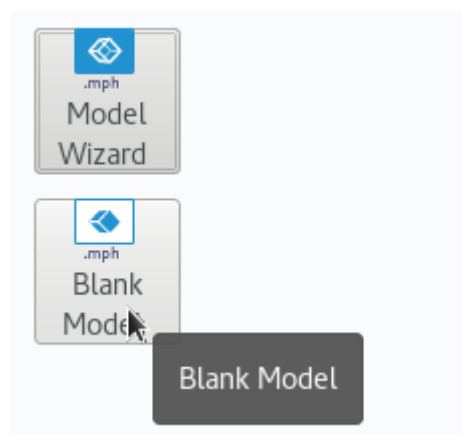
- 材料を追加と材料ブラウザー 材料プロパティライブラリ。材料ブラウザーでは、材料プロパティを編集できます。
- 選択リスト 現在選択できるジオメトリオブジェクト、ドメイン、境界、エッジ、ポイントのリスト。
- キャンセルボタンのある進捗バー 現在の計算をキャンセルするボタン付きの進捗バーは、COMSOL Desktopインターフェースの右下隅にあります。
- ダイナミックヘルプ ヘルプウィンドウでは、ウィンドウとモデルツリーノードに関するコンテキスト依存のヘルプテキストを利用できます。(たとえばF1を押して)デスクトップでヘルプウィンドウを開いて、ノードやウィンドウをクリックすると、ダイナミックヘルプ(英語のみ)を呼び出すことができます。ヘルプウィンドウからは、メニュー項目など、その他のトピックスも検索できます。

3.4. COMSOL Desktopによるモデル作成と計算投入、データ解析

ここでは「はじめてのCOMSOL Multiphysics」の14ページ以降の問題を利用してモデル作成を行います。
モデル作成後にTSUBAME4.0を用いた解析を実施します。
10cmx1cmx1cmの直方体の1面に圧をかけた際の変形を解析します。

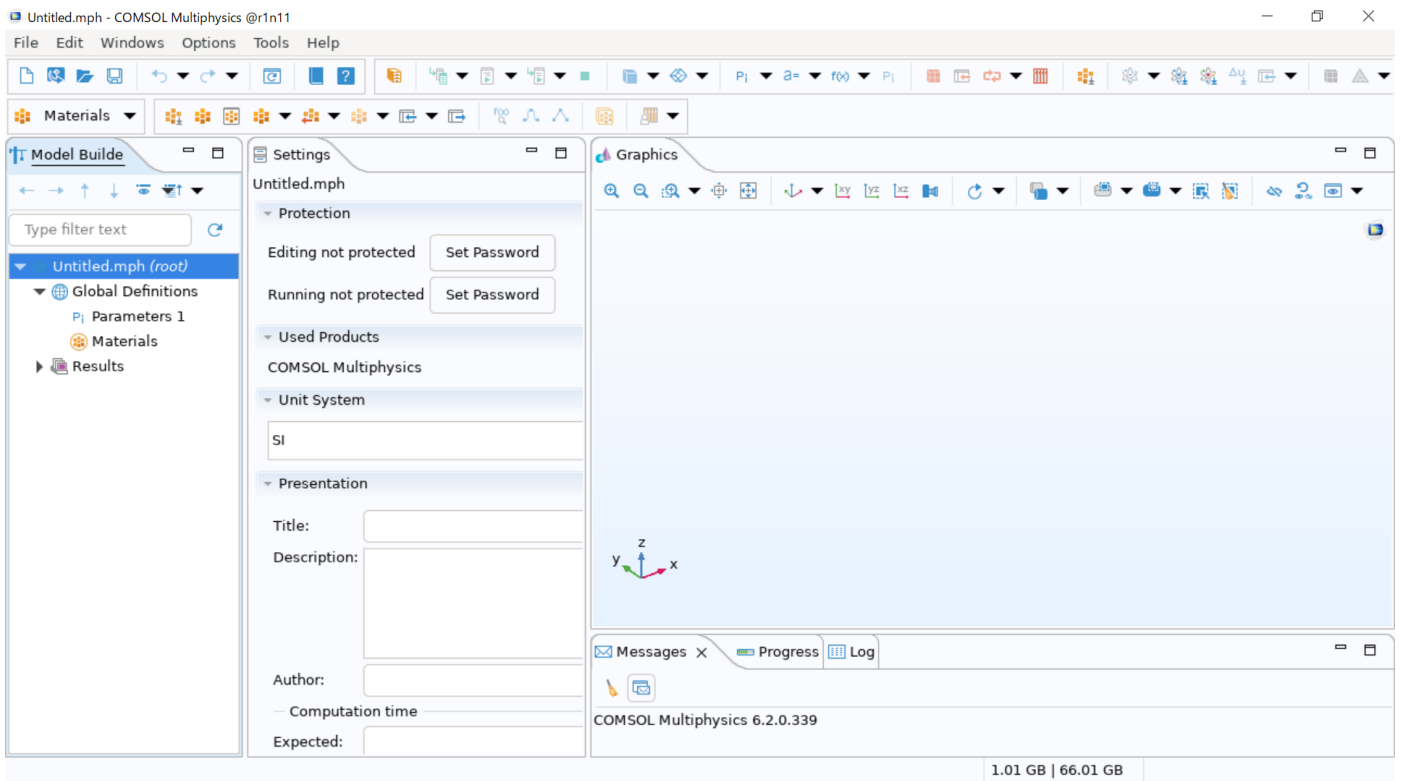
3.4.1. 固体力学の設定

COMSOL Desktopを起動してください。



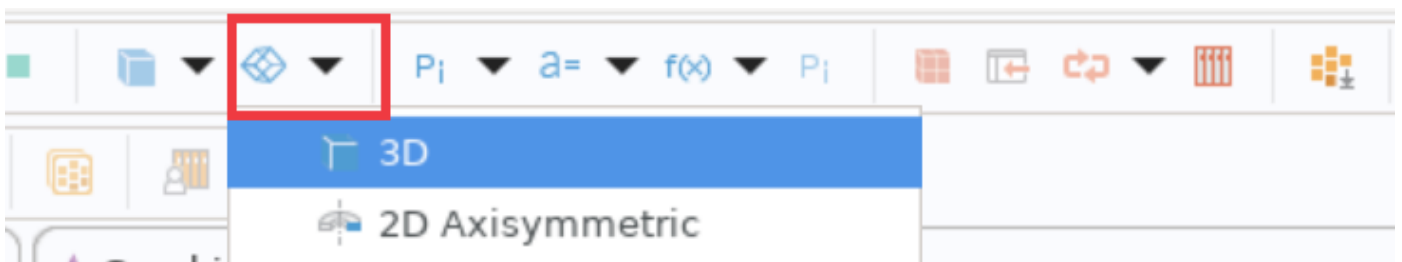
Blank Modelの呼び出し

今回の操作ではBlank Modelを選択してください。 Show on Startupのチェックをオフにしていた場合は次の操作に移ってください。



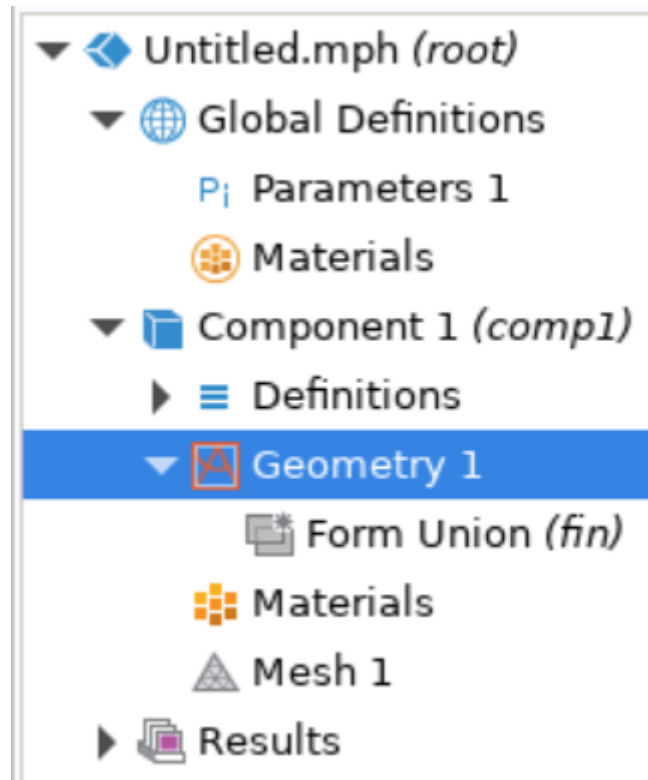
COMSOL Desktop

COMSOL Desktopが表示されます。



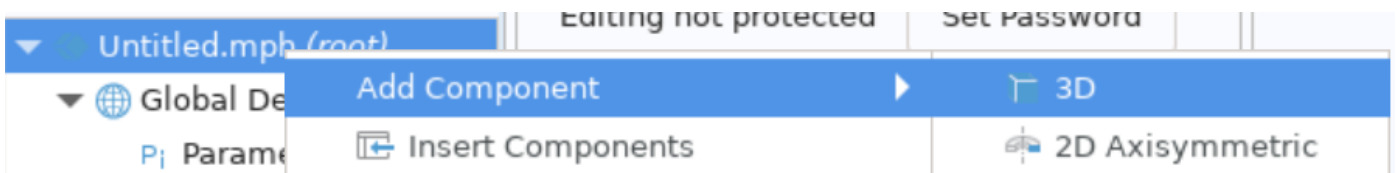
コンポーネントの追加(メニュー)

COMSOL Desktopが表示されたらツールバーの上記画面の赤枠をクリックし、3Dをクリックしてください。



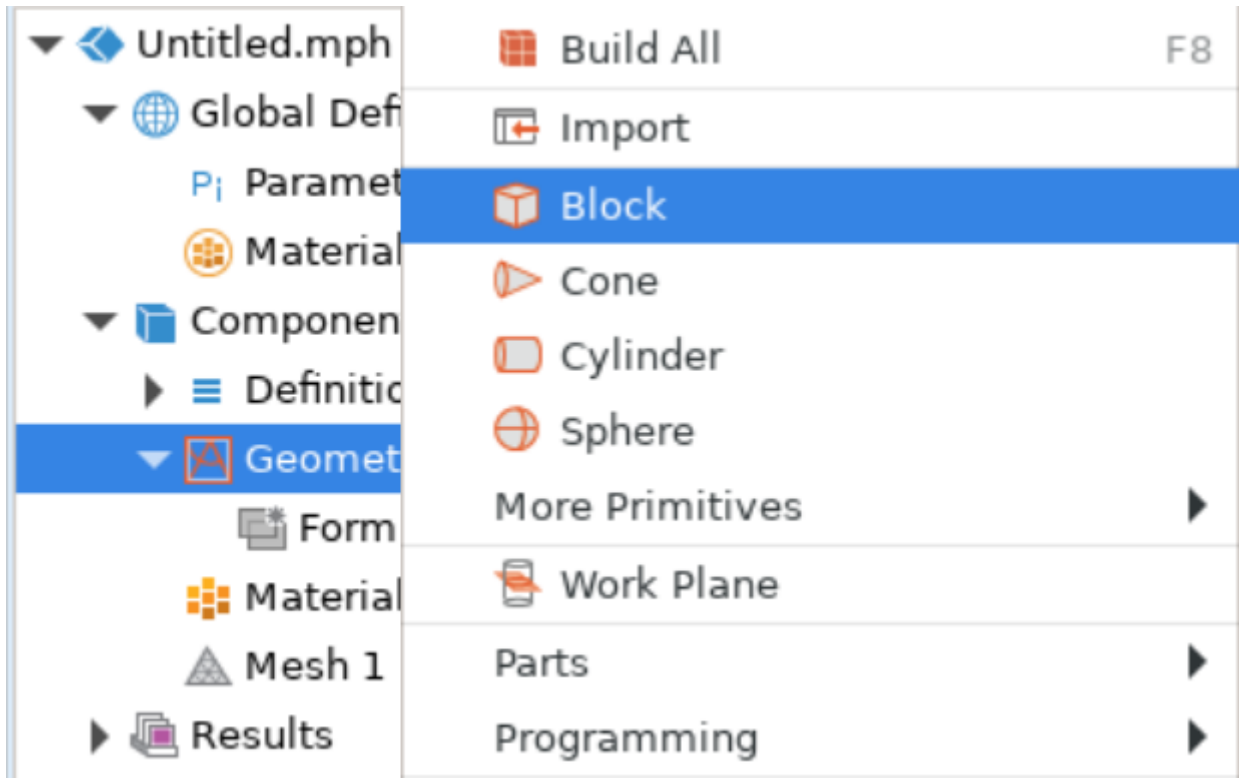
追加されたコンポーネント

コンポーネントが追加されます。



コンポーネントの追加(コンテキストメニュー)

以下は参考ですが、コンテキストメニューで行う場合は、Untitled.mphを右クリックし Add Component>3Dをクリックしてください。



ブロックの追加

ジオメトリを選択して、ブロックを追加します。(メニュー、コンテキストメニューのどちらでも構いません)

Settings

Block

Build Selected ▼ Build All Objects

Label: Block 1

▼ Object Type

Type: Solid ▼

▼ Size and Shape

Width: 10 m

Depth: 1 m

Height: 1 m

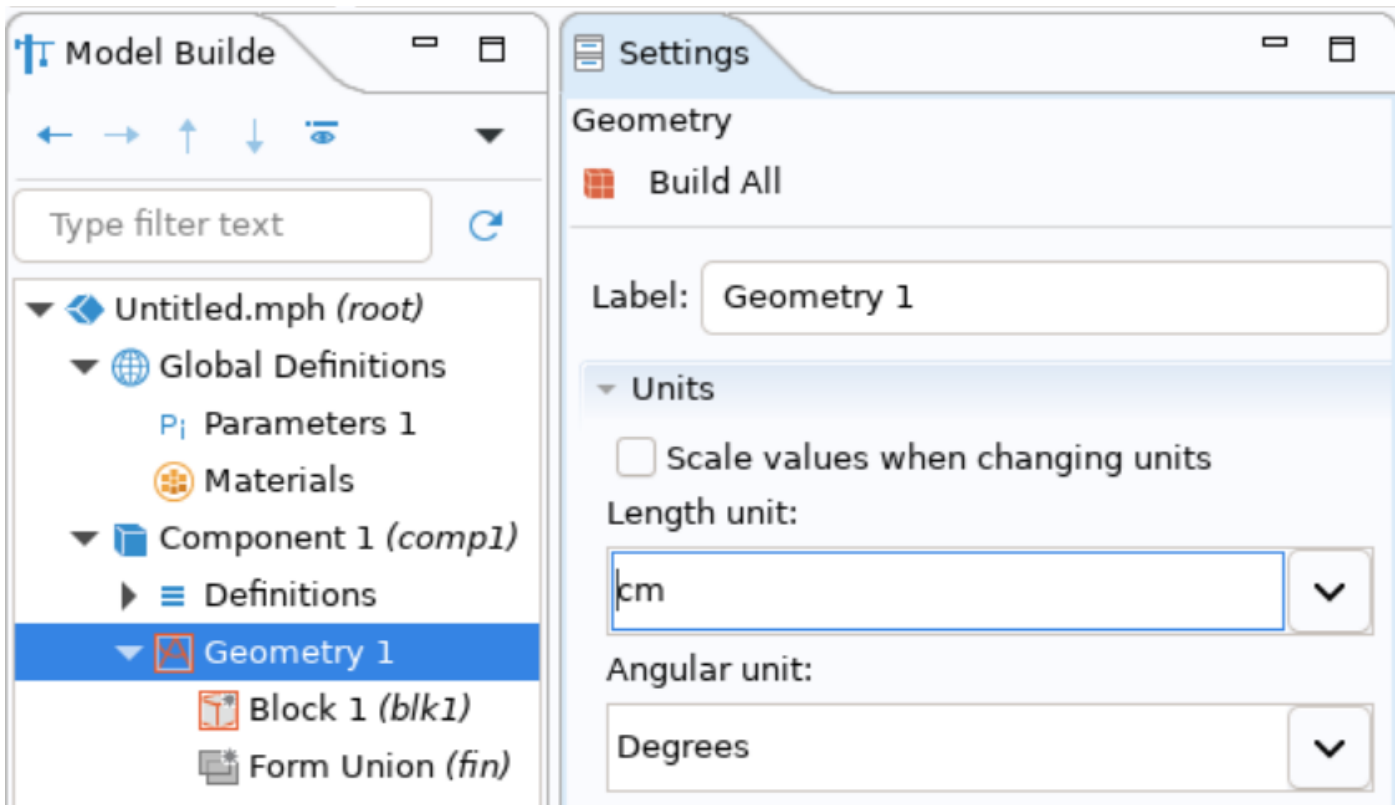
▼ Position

Base: Corner ▼

x: 0 m

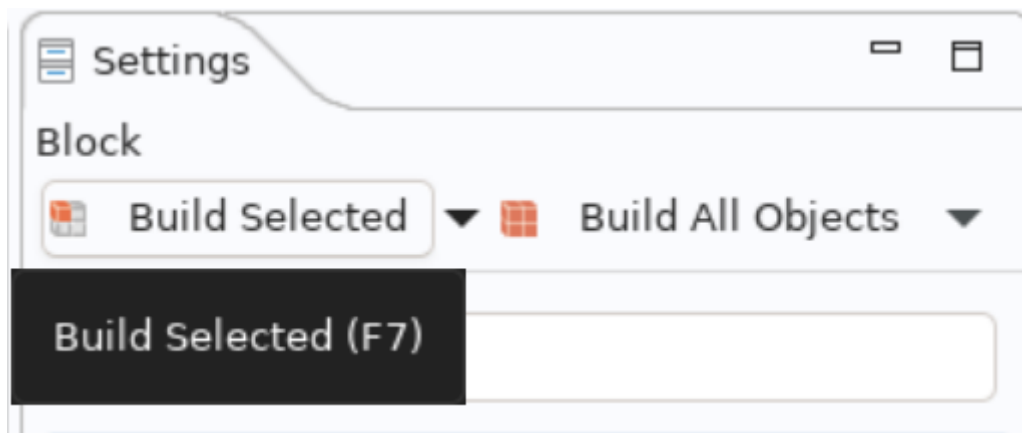
ブロックの設定

追加されたブロックの設定ウィンドウを開き、10cmx1cmx1cmの直方体とするため、画面の様に設定を行います。画面ではmとなっていますが、次の操作で変更しますので、無視してください。



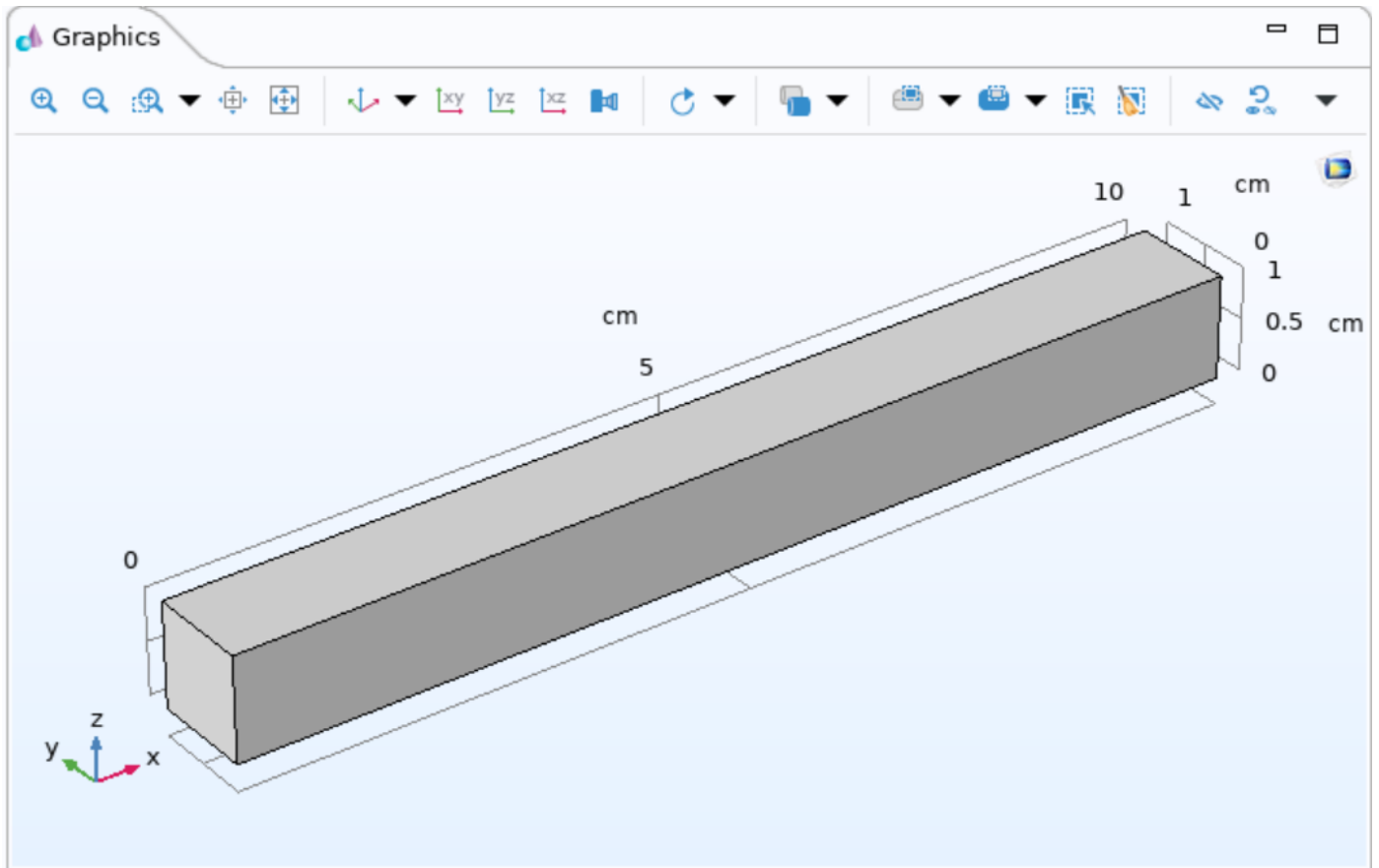
ブロックの設定

ブロックの親ノードのジオメトリを選択し、Length Unitをcmに変更します。



ブロックの設定

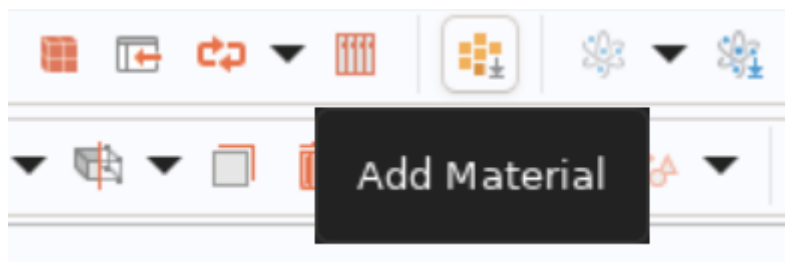
ブロックを選択し、Build Selectedをクリックするとジオメトリが生成されます。



生成されたブロック

3.4.2. 材料の設定

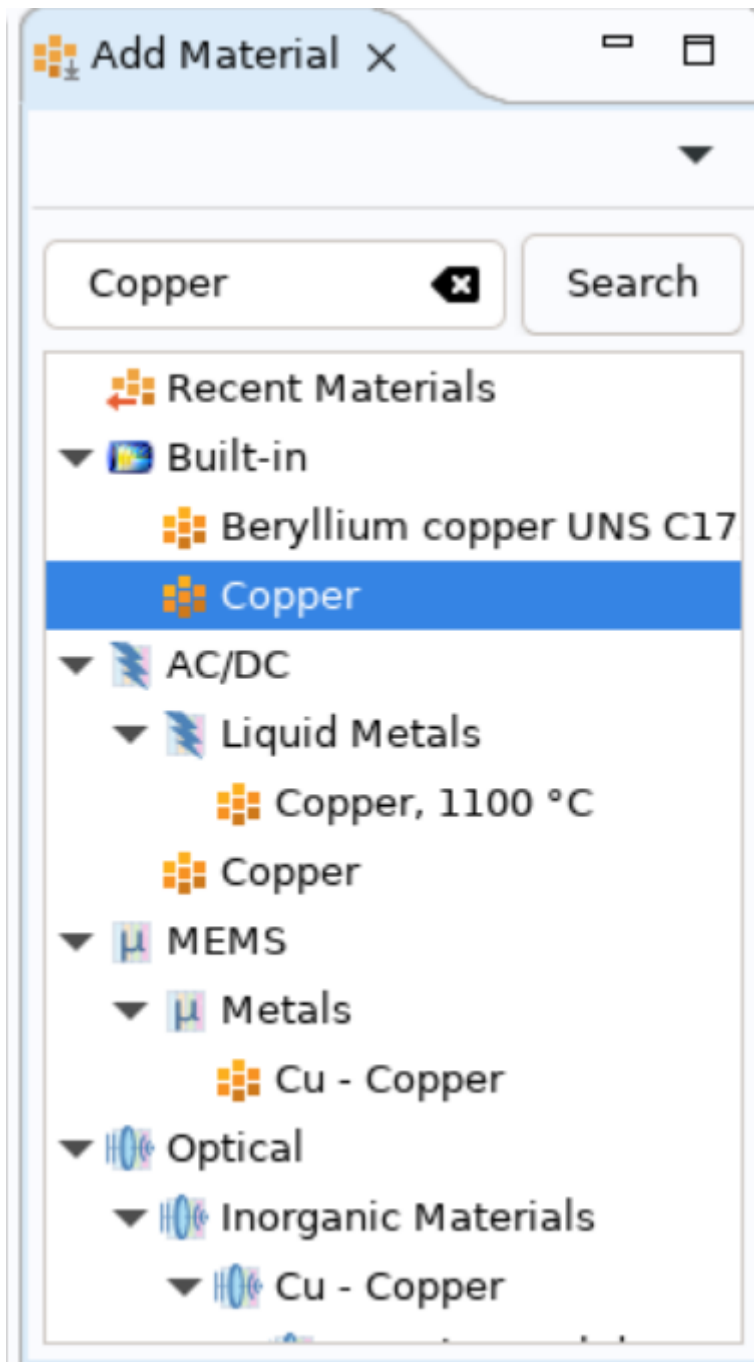
系内ジオメトリの材料を設定します。「はじめてのCOMSOL Multiphysics」と同様に銅を設定します。



マテリアルの読み込み

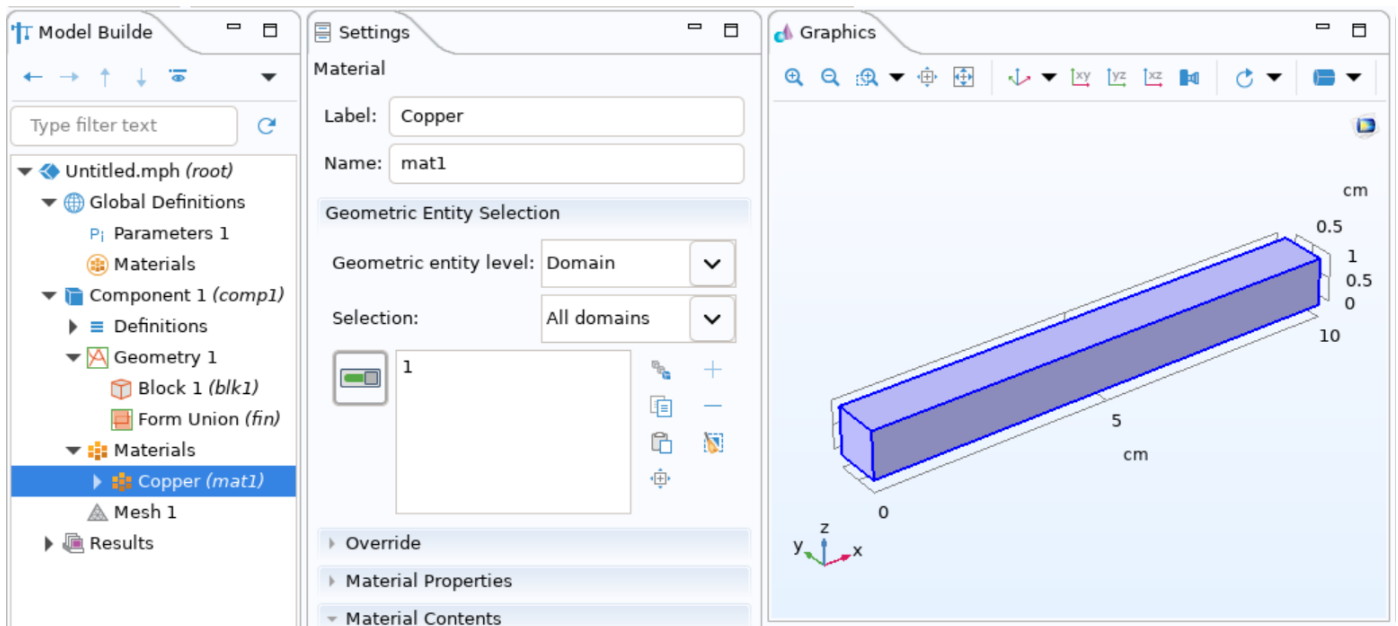
メニューもしくはコンテキストメニューからAdd Materialをクリックします。

メニューの場合は追加したいコンポーネントとなっているか、コンテキストメニューの場合はマテリアルを指定しているかを確認してください。



マテリアル選択画面

マテリアルの選択画面が表示されます。上図では検索窓から銅を検索しております。言語設定にかかわらず、英語表記となります。検索後はAdd to Componentをクリックしてください。

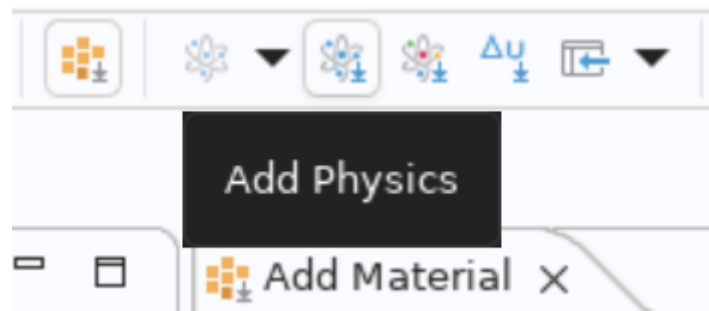


モデルビルダとグラフィックスウィンドウ

マテリアルに銅が追加されグラフィックスウィンドウにも反映されます。

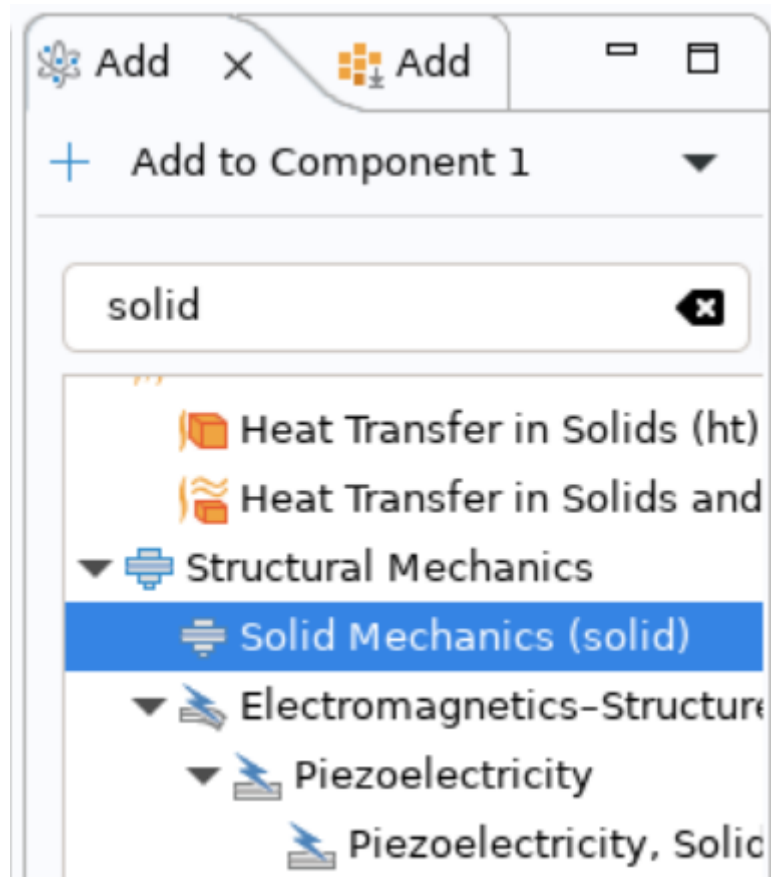
3.4.3. 固定拘束の設定

固定面の設定を行います。「はじめのCOMSOL Multiphysics」と同様に固定面は1cmx1cmの正方形の1面とします。



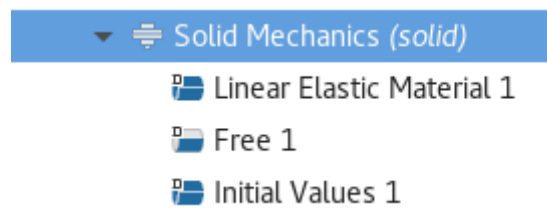
Physicsの選択(メニューから選択)

メニューもしくはコンテキストメニューからAdd Physicsをクリックします。



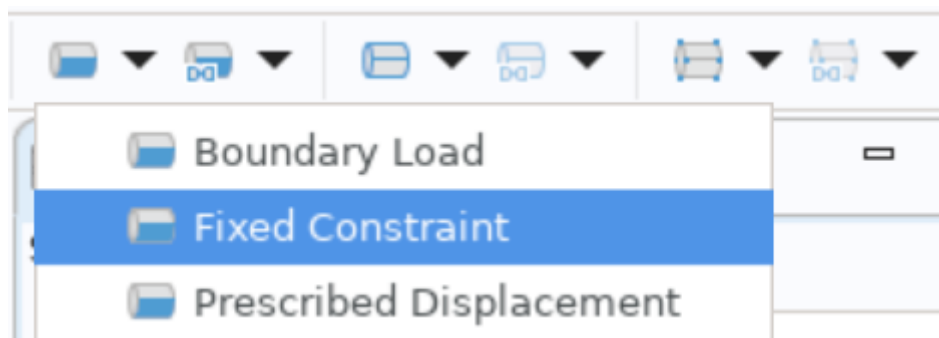
Physics選択画面

Physicsの選択画面が表示されます。上図では検索窓からsolidを検索しております。言語設定にかかわらず、英語表記となります。検索後はAdd to Componentをクリックしてください



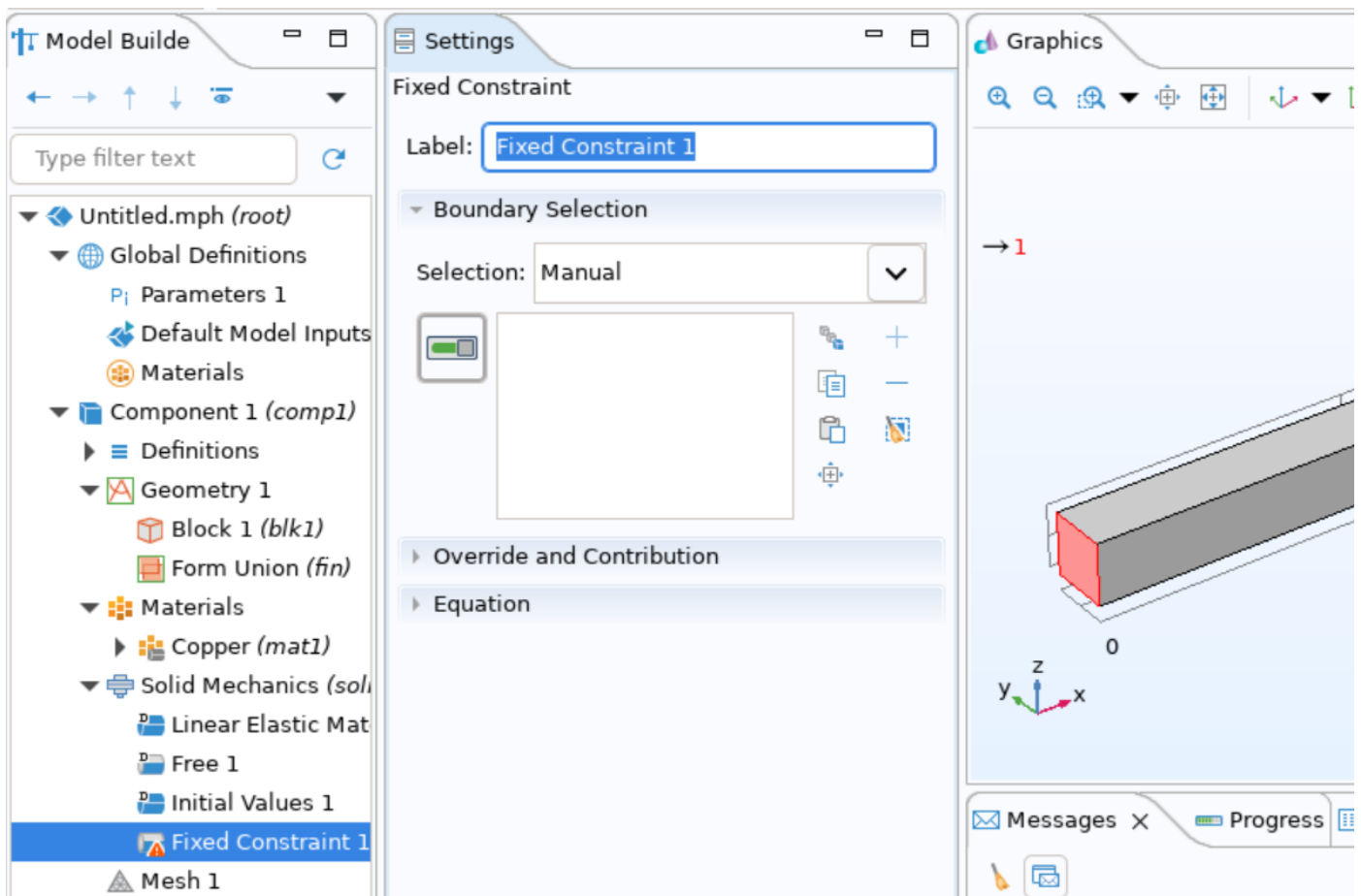
モデルビルダに追加されたPhysics

Physicsが追加されます。



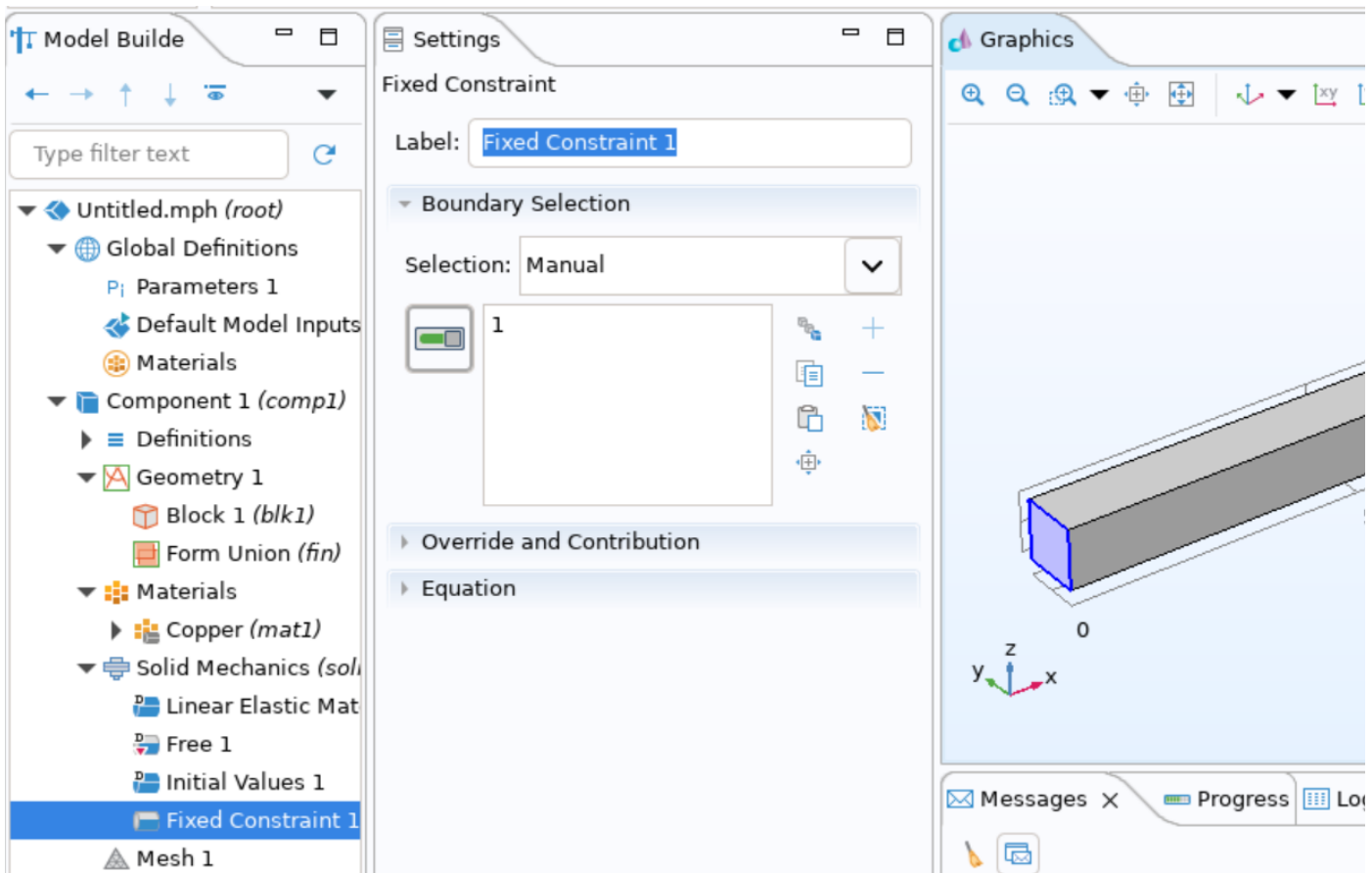
固定拘束の追加

固定拘束を行うため、メニューもしくはコンテキストメニューからFixed Constraintをクリックします。



固定拘束面の指定

モデルビルダに追加されたFixed Constraint 1を選択して、グラフィックスウィンドウ中の拘束したい面をクリックします。上図の赤い箇所が選択面です。

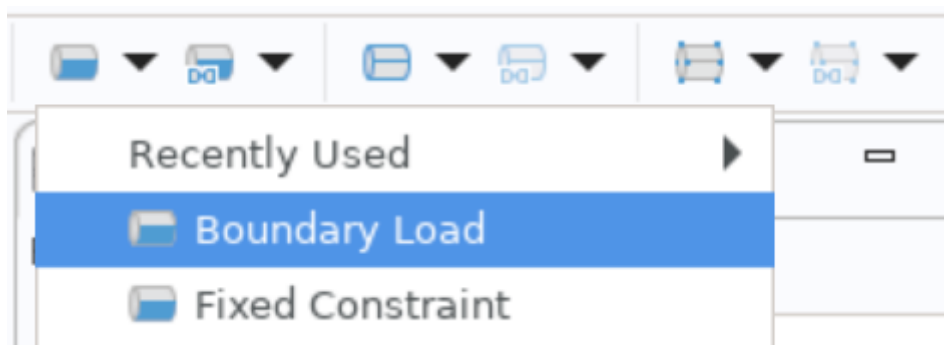


固定拘束面の指定

選択された面は設定ウィンドウに表示され、グラフィックスウィンドウにも青色の表示となります。

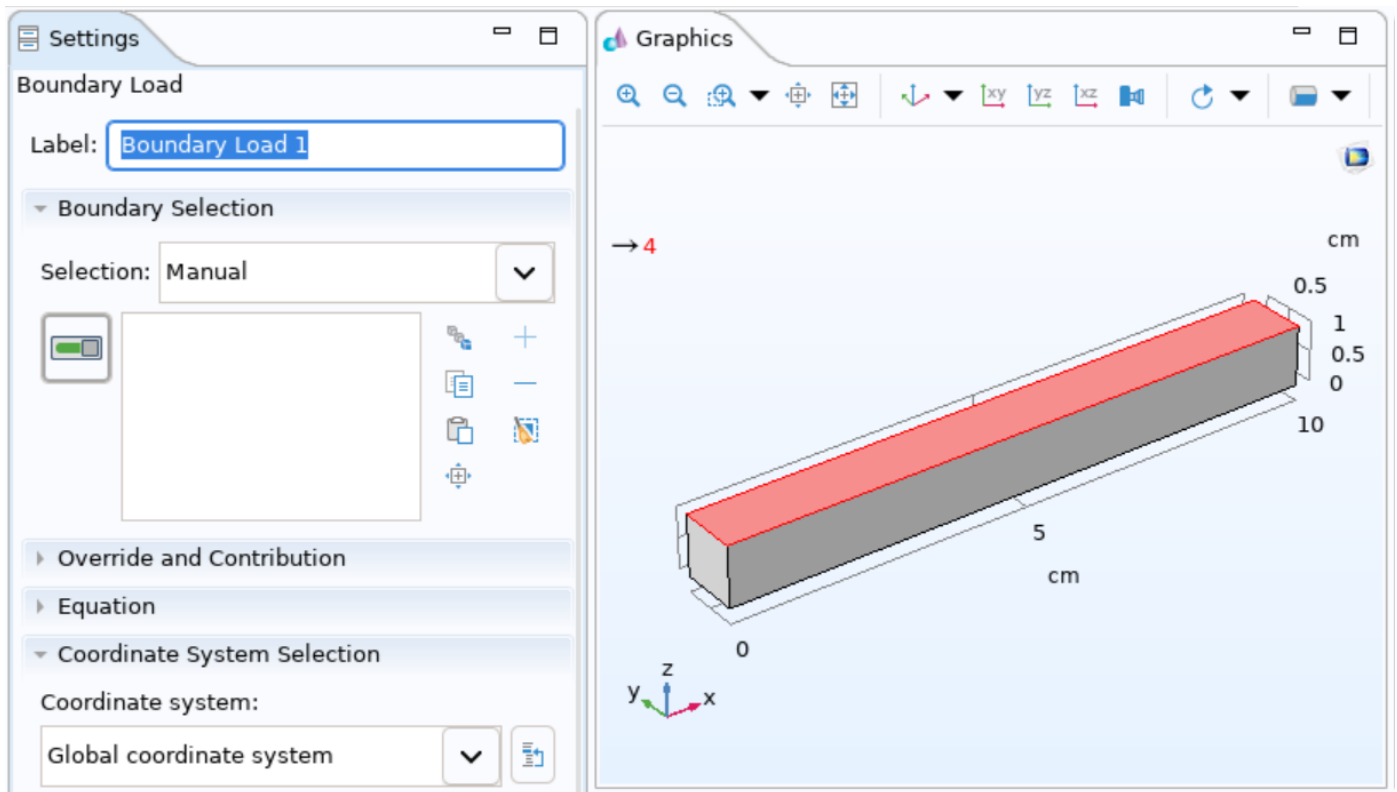
3.4.4. 境界荷重の設定

境界荷重の設定を行います。「はじめてのCOMSOL Multiphysics」と同様に境界荷重は10cmx1cmの長方形の1辺にz軸方向に 10000とします。



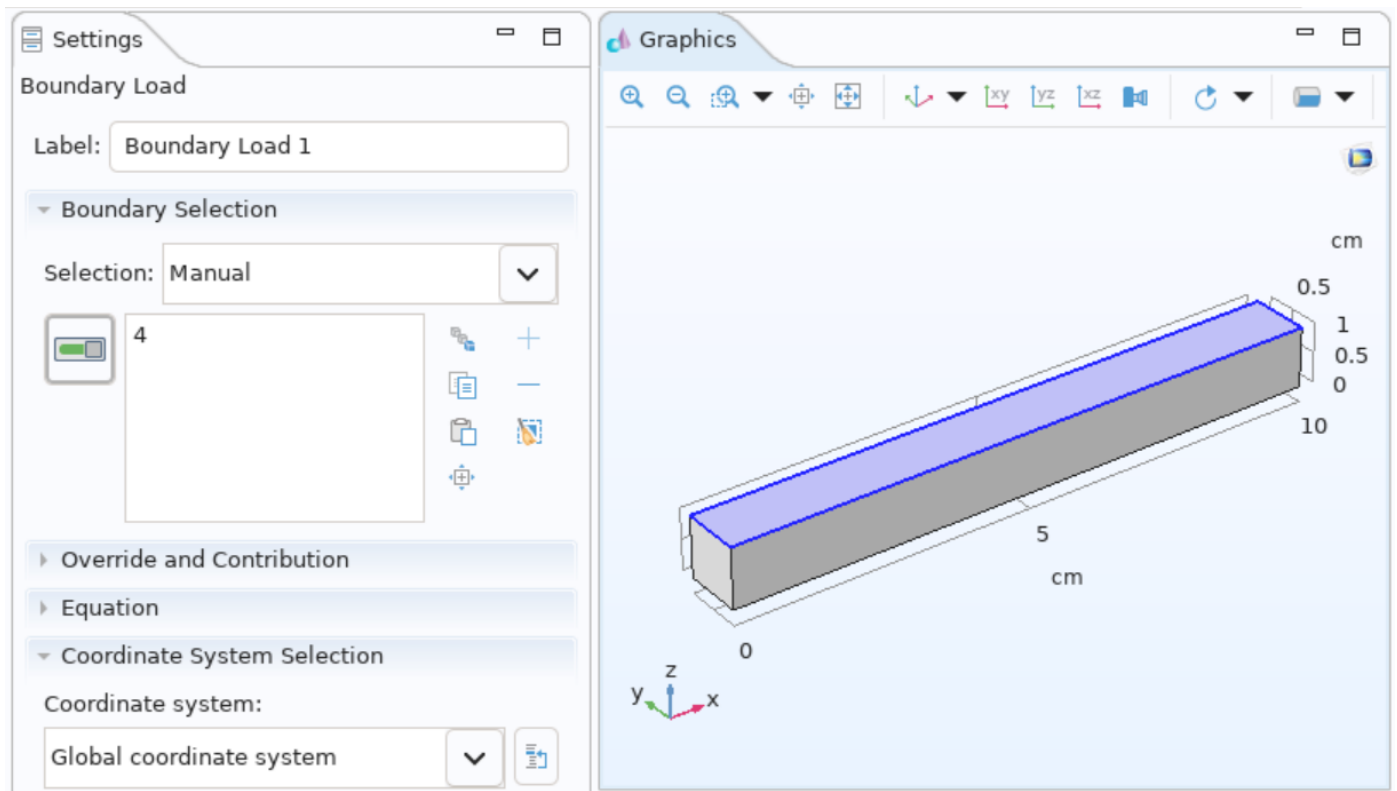
境界荷重の追加

固定拘束を行うため、メニューもしくはコンテキストメニューからBoundary Loadをクリックします。



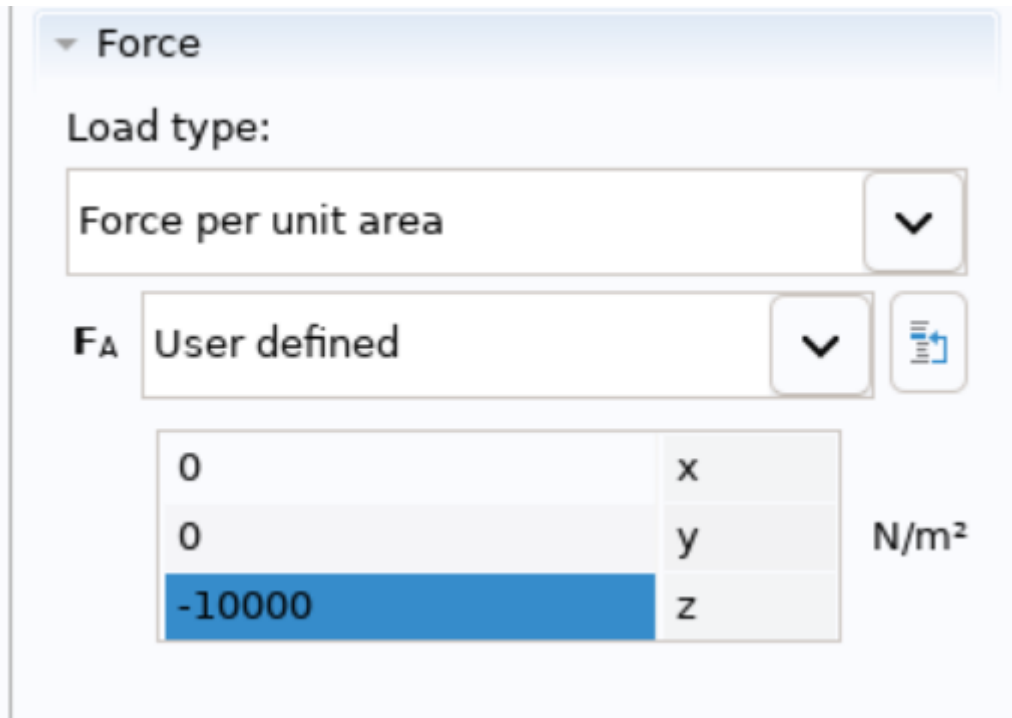
荷重をかける面の指定

モデルビルダに追加されたBoundary Loadを選択して、グラフィックスウィンドウ中の拘束したい面をクリックします。上図の赤い箇所が選択面です。



荷重をかける面

選択された面は設定ウィンドウに表示され、グラフィックスウィンドウにも青色の表示となります。

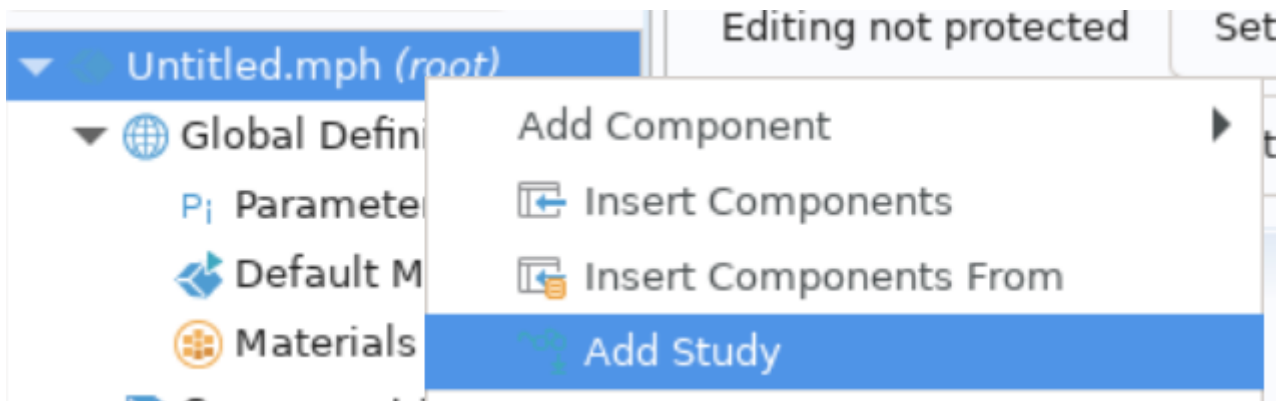


荷重設定

荷重設定を設定ウィンドウのForceから上図のように行います。

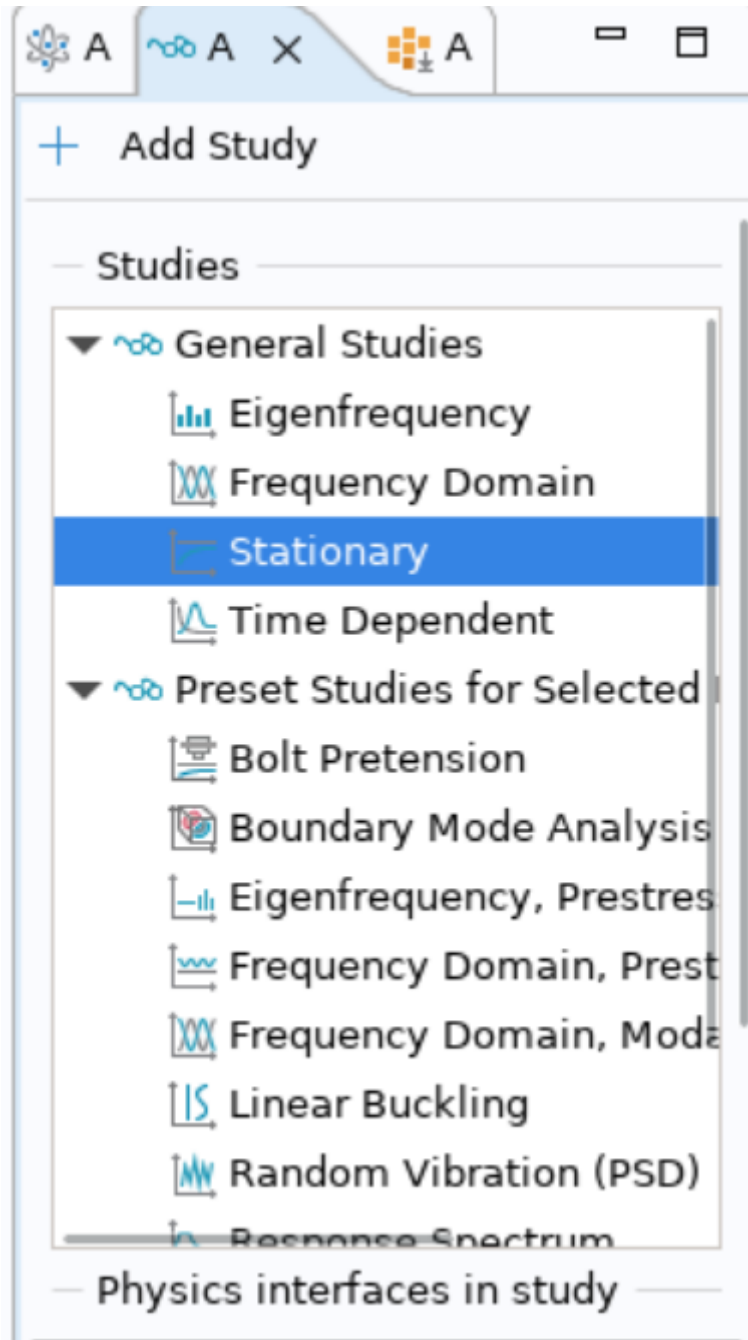
3.4.5. スタディの設定

設定した現象の解析を行います。"定常"設定がされているので、スタディを追加します。



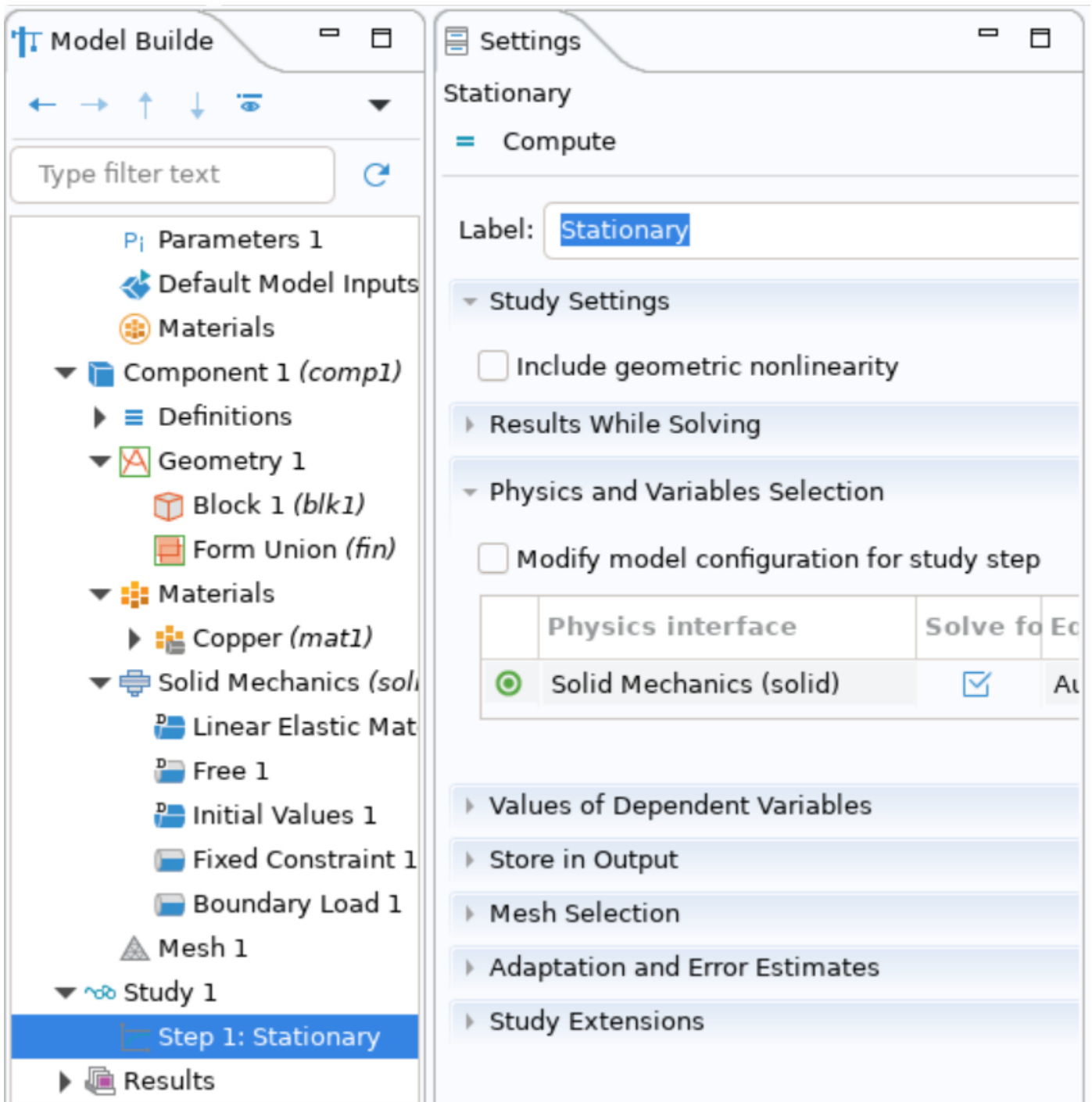
スタディの追加(コンテキストメニュー)

メニューもしくはコンテキストメニューからAdd Studyをクリックします。



スタディ選択画面

Stationaryを選択し、Add Studyをクリックします。

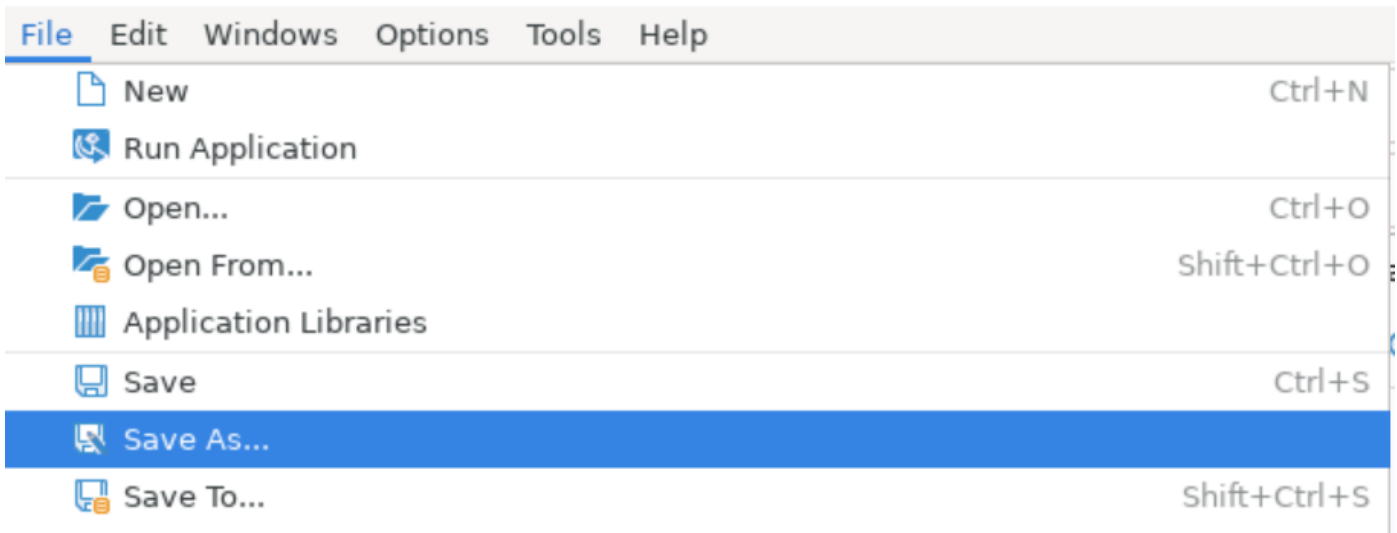


モデルビルダと設定ウィンドウ

定常状態を計算するStudyが追加されました。Computeはクリックしないでください。

3.4.6. インプットデータの保存

File>Save もしくはSave As ...をクリックして、名前をつけて保存してください。



メニューからの保存

3.4.7. ジョブの投入

本書ではTSUBAME4.0にCUIで投入します。先程保存したデータをTSUBAME4.0にアップロードしてください。

下記コマンドで計算ノードに入り、インプットファイルを配置したディレクトリに移動してください。<>は各自環境に合わせて読み替えてください。

```
$ qssh -l h_rt=0:10:0 -l node_f=1
$ cd <インプットファイルを配置したディレクトリ>
```

以下のコマンドでモジュールの読み込みと計算の実行を行います。<>は各自環境に合わせて読み替えてください。

```
$ module load comsol/62_u2
$ comsol batch -np 28 -inputfile <先程保存したファイル> -outputfile <出力ファイル>
```

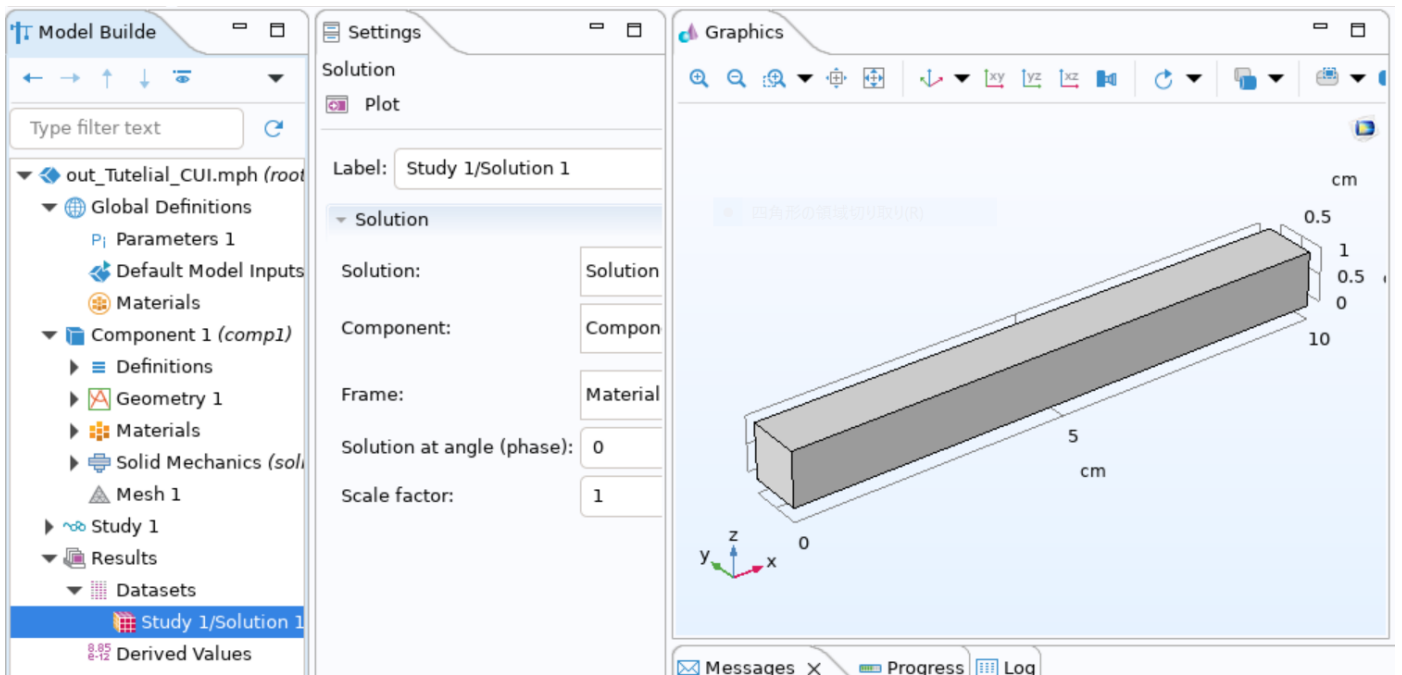
今回作成した系では8秒程度で終了します。

```
----- Current Progress: 100 % - Solving linear system
Memory: 1988/1988 39026/39026
Solution time: 0 s.
Physical memory: 2 GB
Virtual memory: 39.09 GB
Ended at Mar 27, 2024, 9:19:29 AM.
---- Stationary Solver 1 in Study 1/Solution 1 (sol1) ----->
Run time: 3 s.
Saving model: 出力ファイル
Save time: 0 s.
Total time: 8 s.
----- Current Progress: 100 % - Done
Memory: 2015/2015 39059/39090
```

計算後のデータは端末にダウンロードしてください。

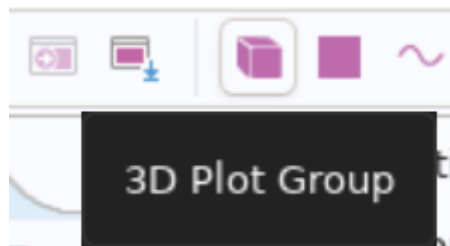
3.4.8. データ可視化設定の作成

GUIで計算を行う場合は必要ありませんが、batch実行の場合は自動的に結果の可視化は行われなため、可視化設定を行います。先の項目でダウンロードしたデータを利用します。計算後のデータをCOMSOL Desktopで開いてください。



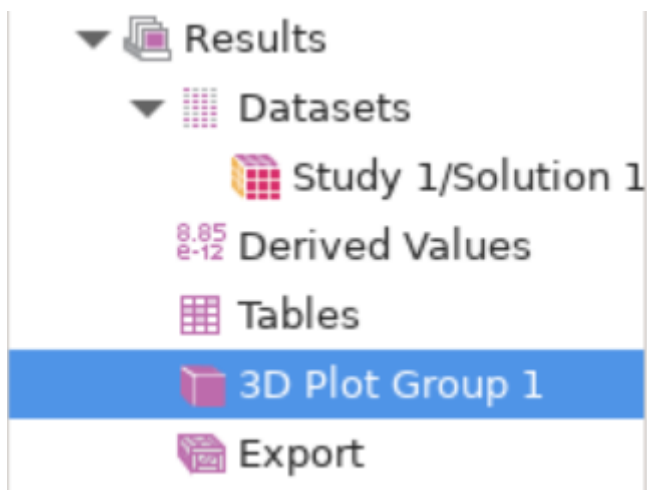
計算後データ

計算後のデータの結果>Data SetsにStudy 1 Solution1が追加されていることを確認してください。



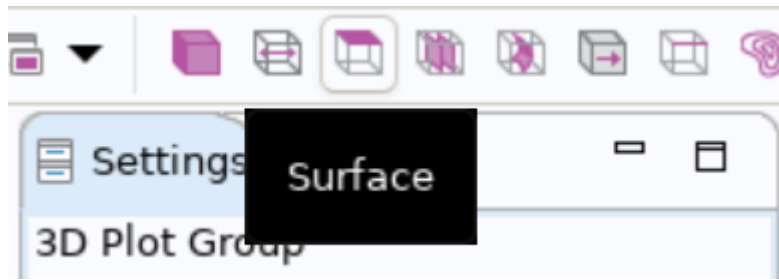
3D Plot Groupの追加

3D Plot Groupをクリックして3D Plot Groupを追加してください。



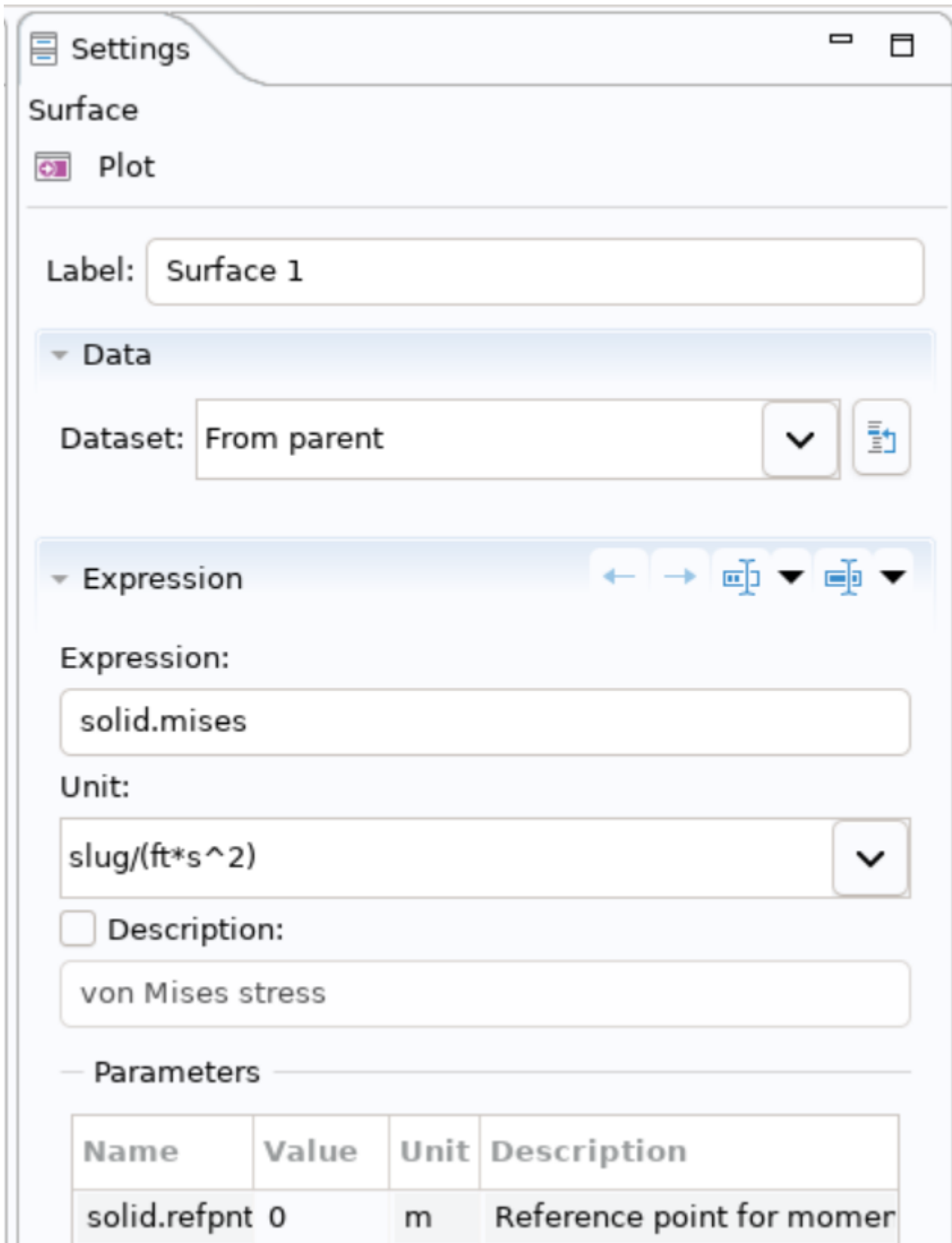
追加された3D Plot Group

モデルツリーに追加されますので、選択します。



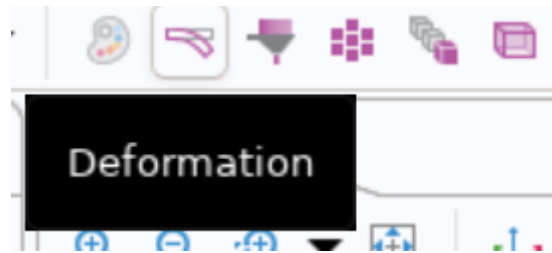
表面の追加

Surfaceをクリックして表面を追加してください。



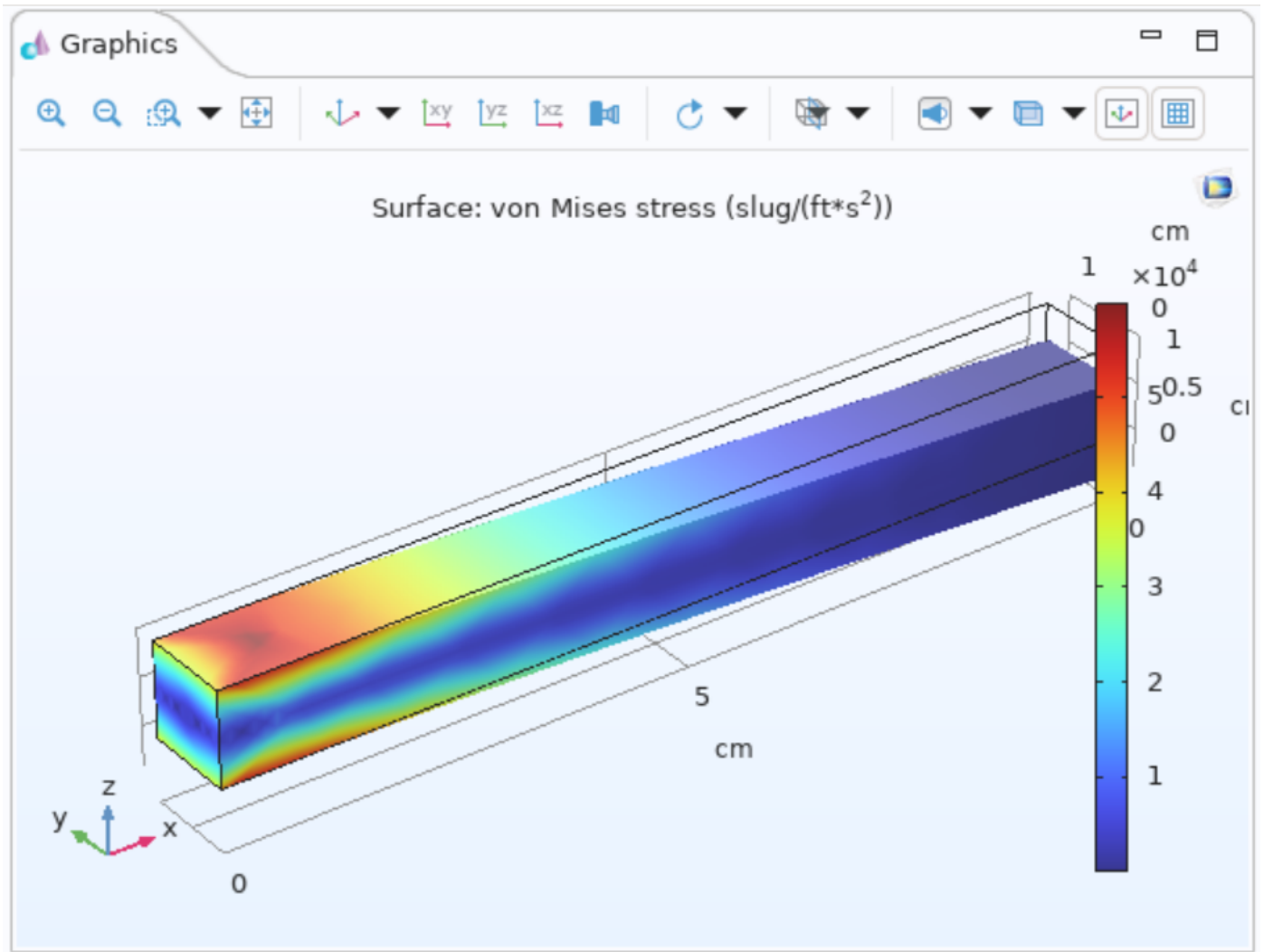
表面の設定

設定ウィンドウを開き、上図のように設定します。



変形の追加

最後にDeformationをクリックして変形を可視化します。



グラフィックスウィンドウ

グラフィックスウィンドウに可視化されたデータが表示されます。

改訂履歴

改定日付	内容
2024/04/11	初版
