

## 研究室紹介

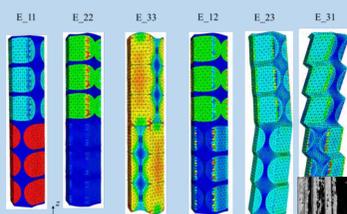
### ものづくり

- 乱流数理工学
- 信頼性工学
- 輸送動力変換機器工学
- 最適設計工学

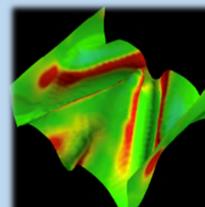
半場藤弘教授  
吉川暢宏教授  
加藤千幸教授  
長谷川洋介准教授



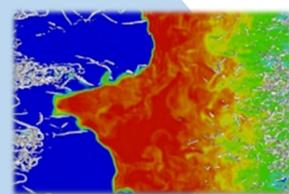
船舶・車等の設計(加藤)



炭素繊維強化プラスチックのメゾスケール強度解析(吉川)



形状最適化(長谷川)



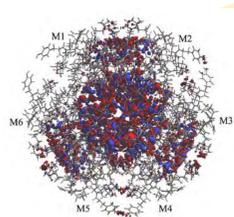
乱流モデル・制御(半場、加藤、長谷川)

### 大規模データ解析

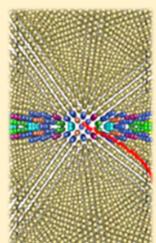
- 大規模データ解析工学 小野謙二客員教授



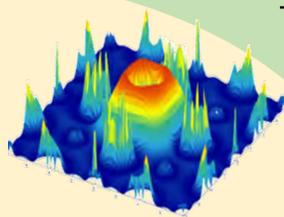
上流設計プラットフォームの整備(小野)



タンパク質設計(佐藤)



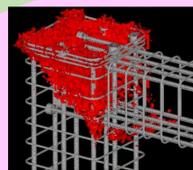
物性評価(梅野)



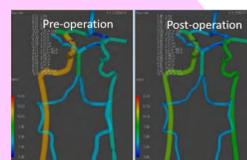
電子スペクトル解析(溝口)

### ナノスケール分子デバイス・材料設計

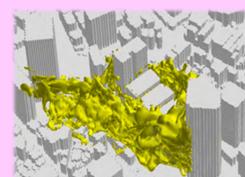
- 材料科学・材料創造 溝口照康教授
- 材料応用工学 梅野宜崇教授
- 生体材料工学 佐藤文俊教授



人工物モニタリング(長井)



医療診断(大島)



都市環境予測(大岡)

### 医療工学・都市安全

- 医療工学 大島まり教授
- 都市エネルギー工学 大岡龍三教授
- 社会インフラ工学 長井宏平准教授

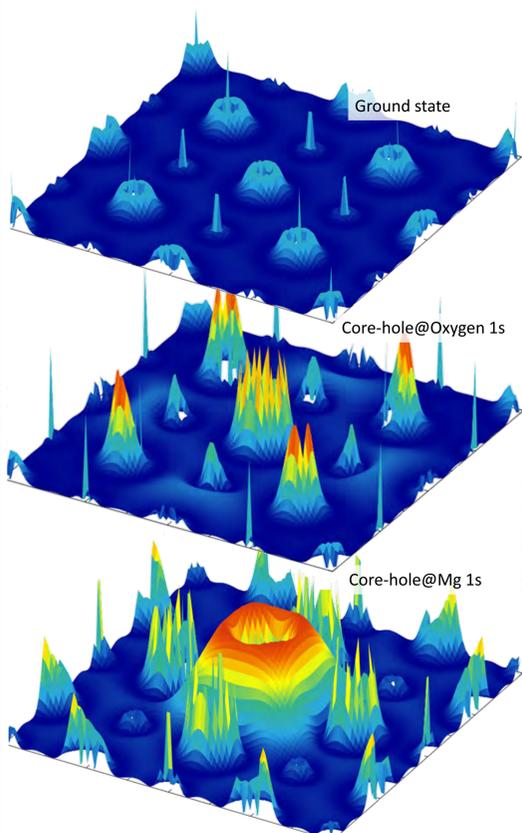
## 溝口照康研究室

### 原子と電子の役割を知る

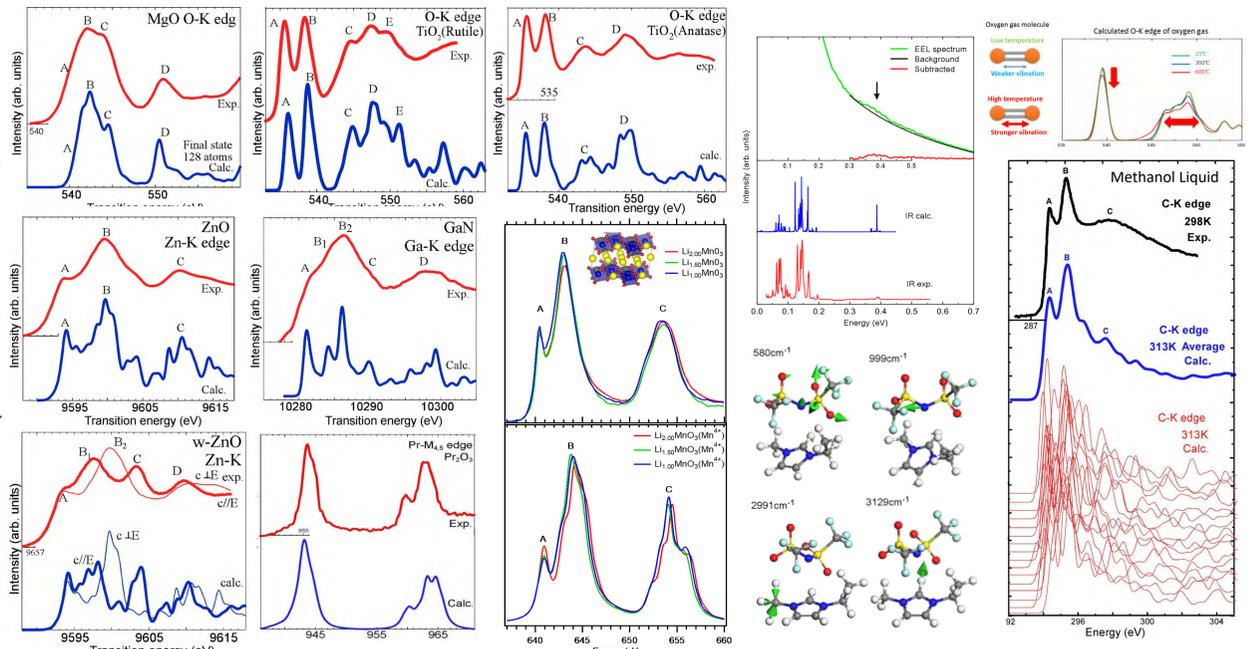
- 一粒子・二粒子・多粒子計算法による内殻電子励起スペクトル(ELNES/XANES)の精密シミュレーション
- 機械学習を用いたデータ駆動型界面構造探索

### 一粒子・二粒子・多粒子計算法による内殻電子励起スペクトル(ELNES/XANES)の精密シミュレーション

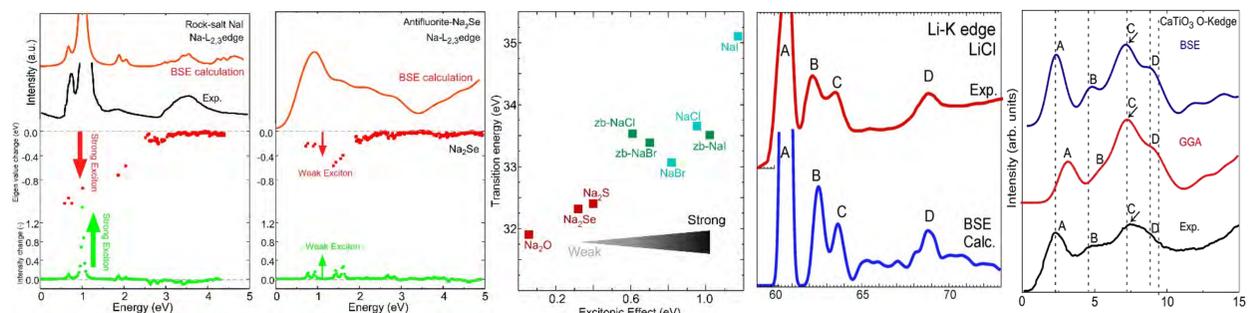
#### 内殻空孔状態の電子構造



#### 一粒子・二粒子・多粒子効果, 振動効果, van der Waals力効果のシミュレーション



#### エキシトン効果の定量理解 → リチウムイオン, ナトリウムイオン電池解析を高精度化



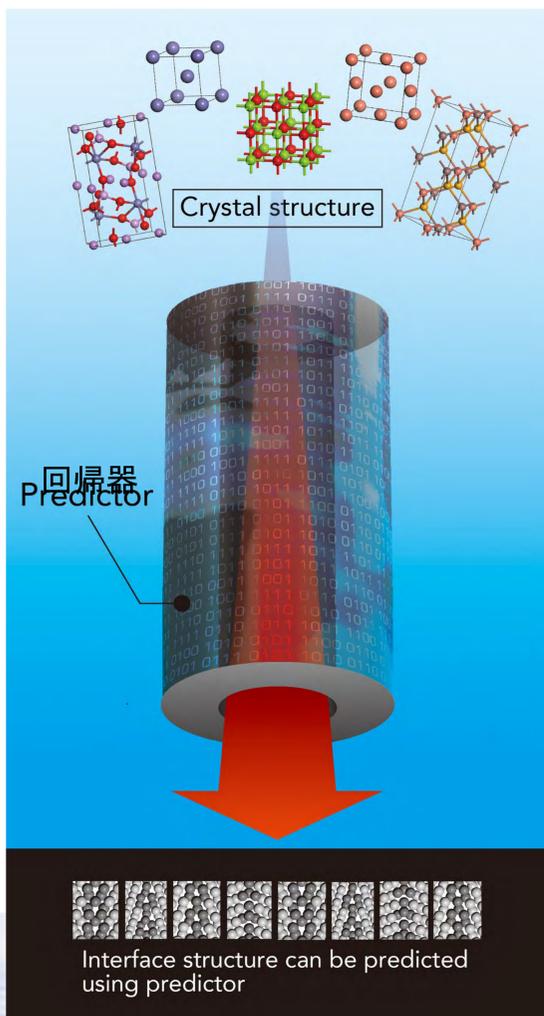
T. Miyata et al., Science Adv., 3 (2017) e1701546  
 H. Katsukura et al., Sci. Rep., 7 (2017), 16434  
 H. Ikeno and T. Mizoguchi, Microscopy, 66 (2017) 305.  
 T. Mizoguchi et al., Ultramicroscopy 180 (2017) 93.  
 K. Tomita et al., Ultramicroscopy 178 (2017) 105  
 H. Katsukura et al., Ultramicroscopy 178 (2017) 88  
 K. Tomita et al., J. Phys. Chem. C 120 (2016) 9036  
 K. Kubobuchi et al., J. Appl. Phys., 120 (2016) 142125  
 Y. Matsui et al, Chem. Phys. Lett. 649 (2016) 92  
 T. Miyata et al., Microscopy 63 (2014) 377  
 K. Kubobuchi et al., Appl. Phys. Lett., 104 (2014) 053906  
 Y. Matsui et al., Sci. Rep., 3 (2013) 3503  
 T. Mizoguchi et al., Micron, 43 (2012) 37  
 S. Ootsuki et al., Appl. Phys. Lett., 99 (2011) 233109  
 H. Ikeno et al., J. Phys. Chem. C, 115 (2011) 11871  
 T. Mizoguchi, et al., Micron, 41 (2010) 695.

ELNESおよびXANESは内殻電子励起スペクトルであり、物質科学の分野で広く利用されている分析手法です。一方でスペクトルを理論計算することはこれまで困難でした。本研究室では一粒子・二粒子・多粒子理論に基づき、スペクトルを定量的に解釈するための手法を開発しております。我々のシミュレーション法を活用することで、電池や触媒、磁性材料や光学材料の解析精度が格段に向上します。

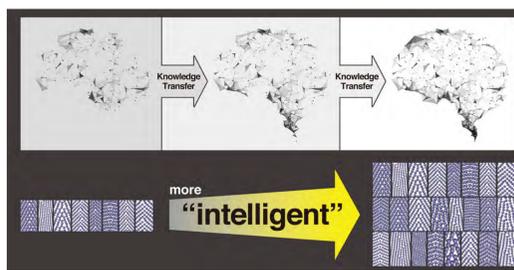
### 機械学習を用いたデータ駆動型界面構造探索とスペクトル解析

情報科学手法を活用することで、構造決定、構造探索のためのスピードを高速化

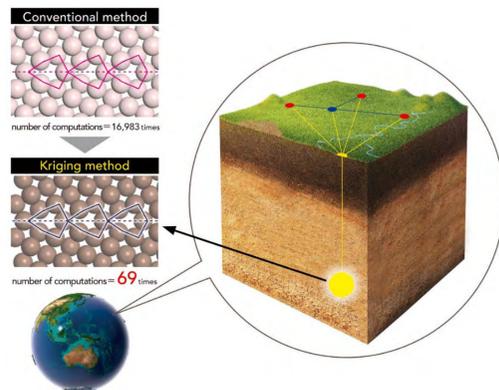
人工知能技術を活用することで  
界面構造を決定するスピードを高速化



転移学習により人工知能が過去の経験を学習

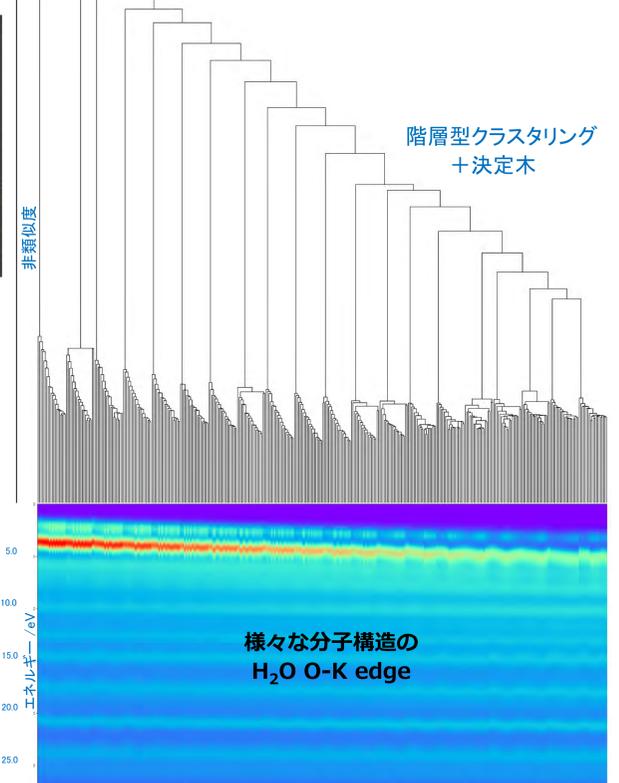


資源探索分野における人工知能技術を利用することで  
界面構造を高速かつ高精度に決定



第一原理計算により空孔、界面、転位などの格子欠陥の形成挙動とダイナミクスを調べ、網羅的計算により得られた結果を情報科学手法(インフォマティクス)により処理することでHigh through-put screeningと物質設計を実現することができます。さらに、人工知能技術とスペクトル計測との融合研究も実施しています。人工知能技術を利用することで専門的な知識を必要とすることなくスペクトルを解釈することが可能になります。

人工知能技術を利用したスペクトル解析

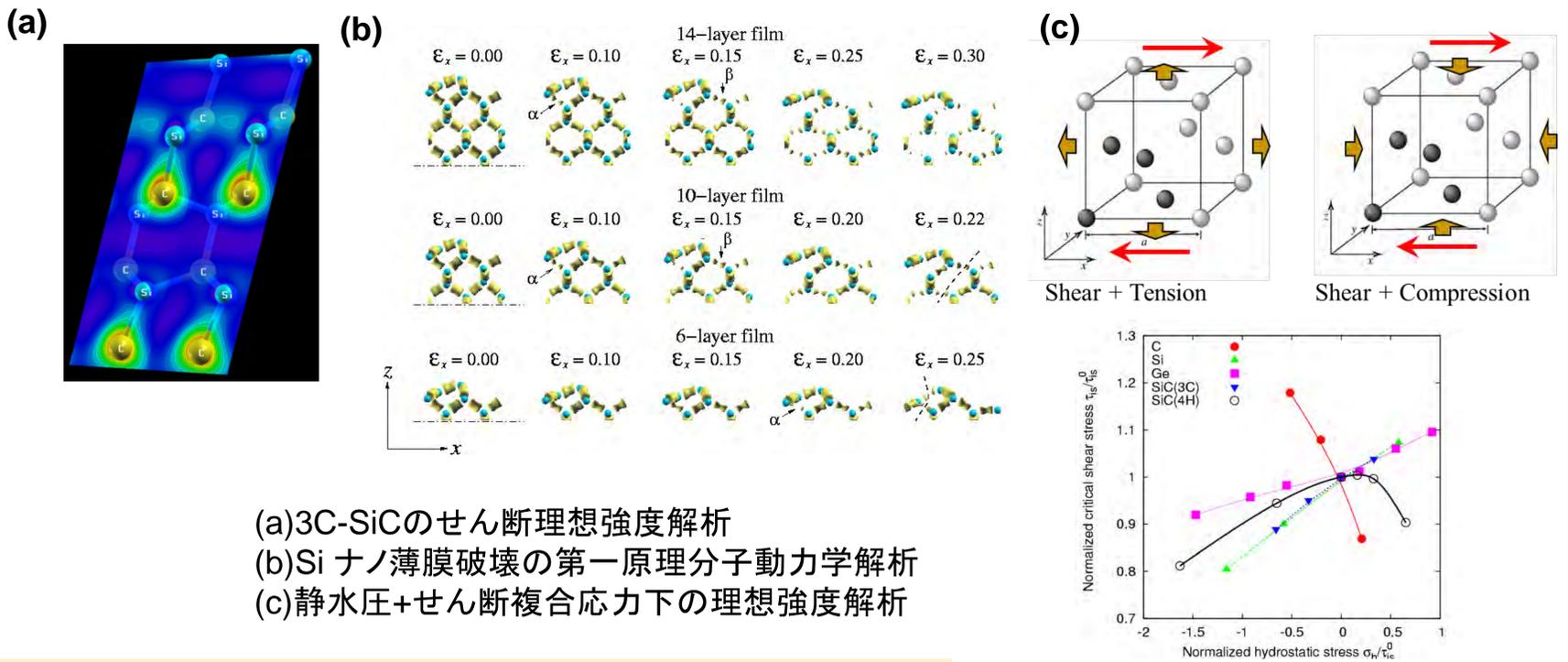


S. Kiyohara et al., J. Phys.: Materials, 2 (2019) 024003  
 H. Oda et al., J. Phys.: Materials, 2 (2019) 034005  
 S. Kiyohara et al., Scientific Reports, 8 (2018) 13548  
 S. Kiyohara and T. Mizoguchi, J. Chem. Phys. 148 (2018) 241741  
 S. Kiyohara et al., Physica B, 532 (2018) 9.  
 S. Kikuchi et al., Physica B, 532 (2018) 24-28  
 H. Oda et al., J. Phys. Soc. Jpn (Letter), 86 (2017) 123601  
 S. Kiyohara et al., Science Adv. 2 (2016) e1600746.  
 S. Kiyohara et al., Jpn. J. Appl. Phys. 55 (2016) 045502-1-4.  
 T. Yamamoto and T. Mizoguchi, Appl. Phys. Lett., 105 (2014) 201604.  
 H. Yamaguchi et al., Appl. Phys. Lett., 104 (2014) 153904.

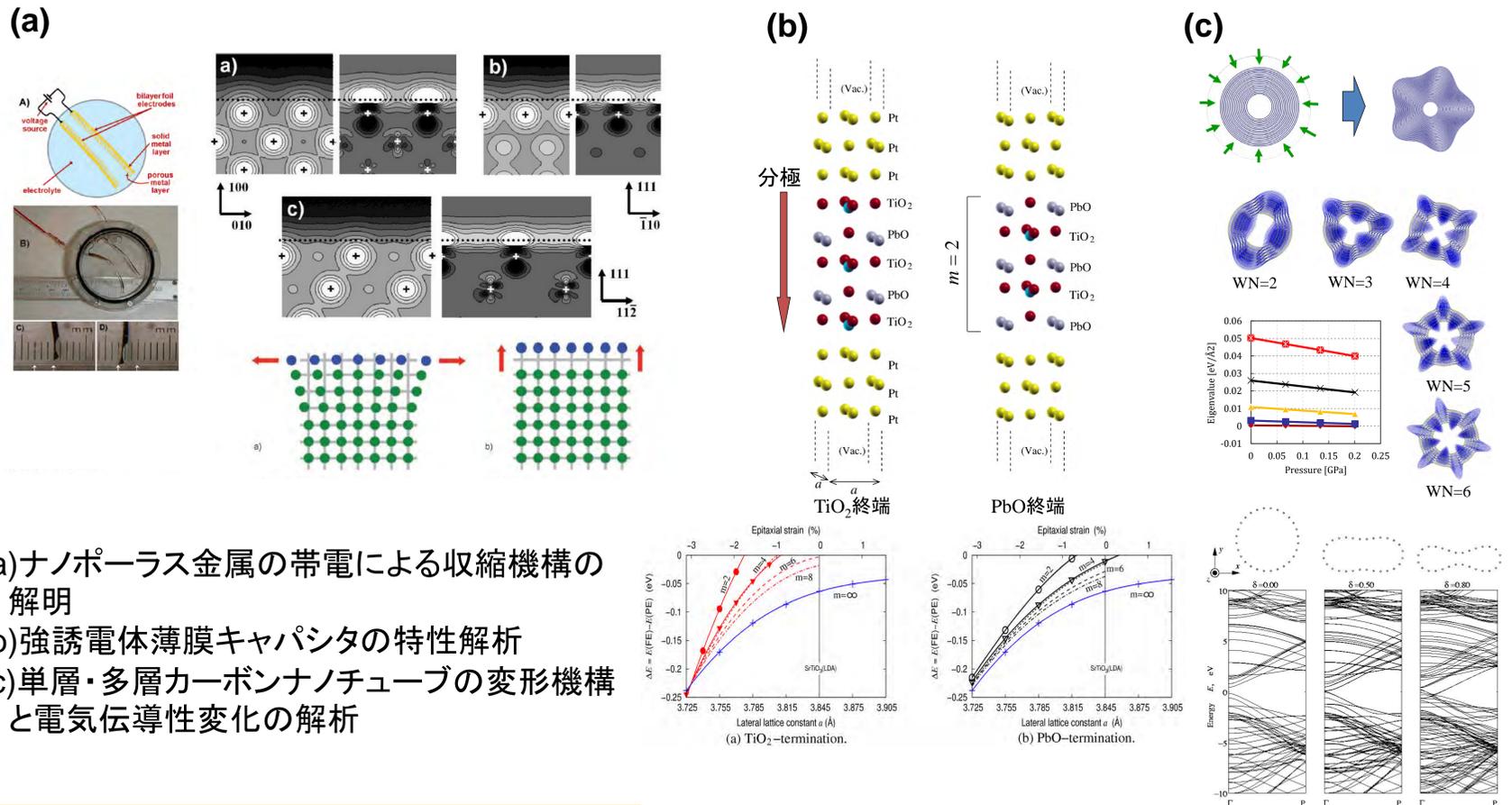
### ナノ材料強度物性に関する原子・電子モデル解析

- 第一原理によるナノレベルの強度特性解析
- 分子動力学・量子力学計算によるマルチフィジクス解析
- デバイス材料信頼性評価のための原子モデリング

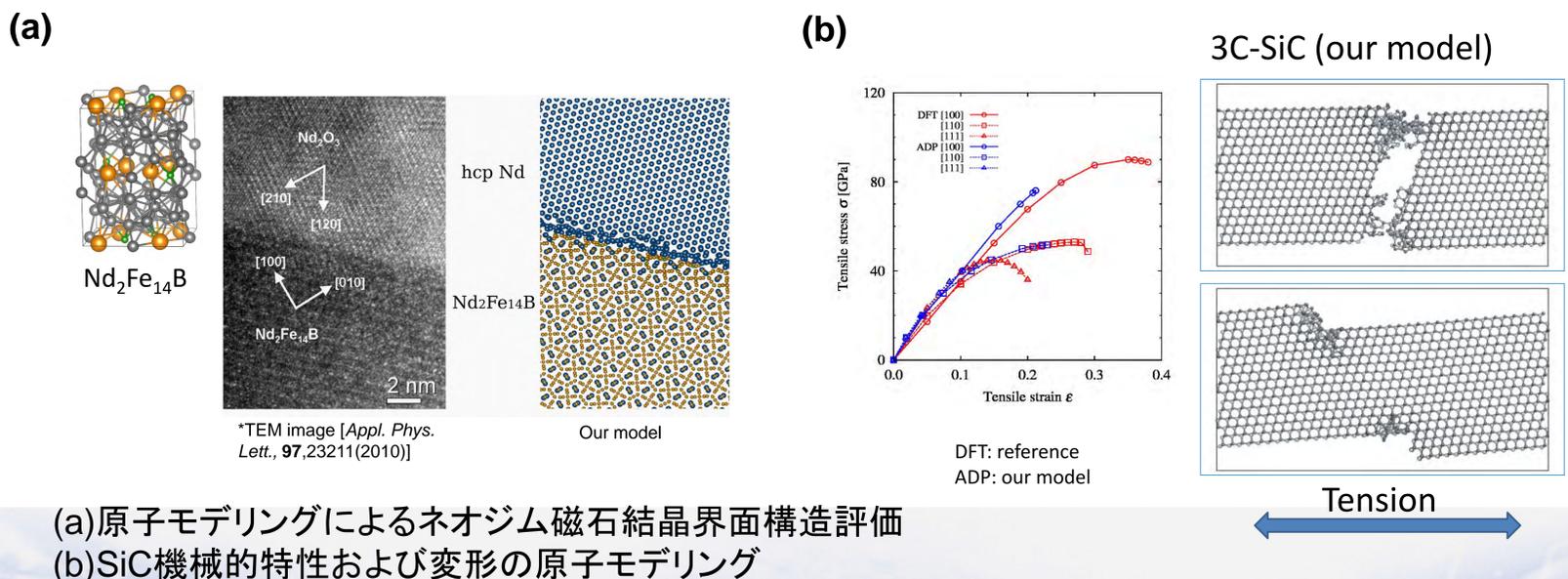
#### 密度汎関数法第一原理計算による強度特性評価



#### 第一原理・Tight-Binding・MD計算によるマルチフィジクス解析



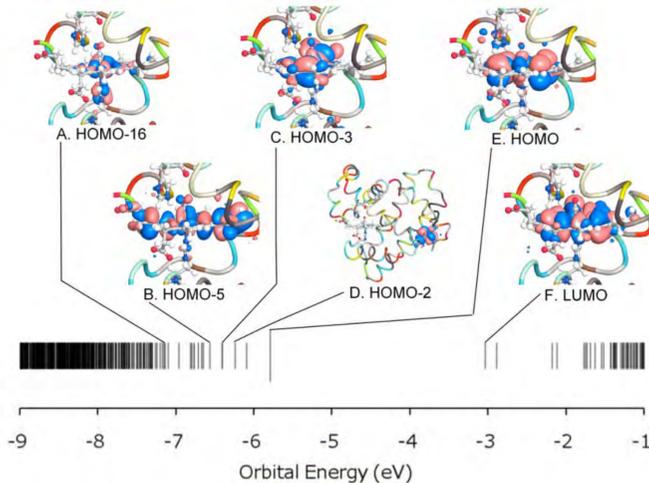
#### デバイス材料信頼性の原子モデリング



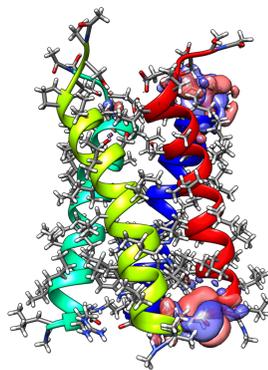
### 生体分子やナノ分子の革新的なシミュレーション

- タンパク質などのナノサイズの分子が持つ**全ての電子の正準分子軌道**が計算できる、世界でも類を見ない量子化学計算ソフトウェア“ProteinDF/QCLO”を開発 (<https://proteindf.github.io/>)。
- 次世代スパコンのための、DFTに基づく第3世代正準分子軌道法や自動計算システムの研究開発。
- 基礎研究のみならず、新規酵素や薬剤、材料設計などの応用研究も行っています。
- プロジェクト・科研費等
  - ✓ 戦略的基盤ソフトウェアの開発 (2002~2005)
  - ✓ 革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発プロジェクト (2005~2007)
  - ✓ グランドチャレンジアプリケーションの開発「次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクト (2006~2010)
  - ✓ イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発 (2008~2012)
  - ✓ HPCI戦略プログラム 分野4 次世代ものづくり (2009~2015)
  - ✓ 若手研究(B) 平野 (2013~2014)
  - ✓ 基盤研究(A) (2015~2017)
  - ✓ 若手研究(B) 平野 (2015~2016)
  - ✓ 基盤研究(C) 平野 (2017~2019)
  - ✓ 基盤研究(B) (2021-2023)
  - ✓ 量子イノベーションイニシアティブ (2020-2025)

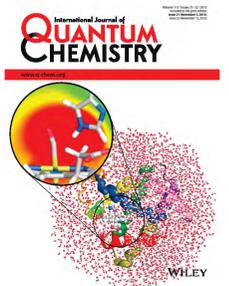
#### ProteinDFによるタンパク質全電子計算



金属タンパク質の全電子計算

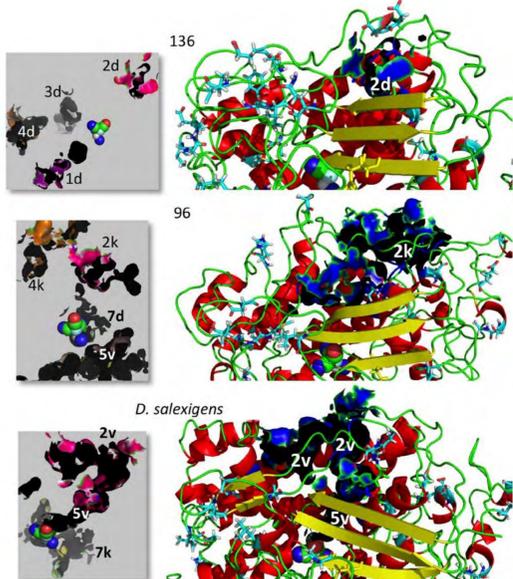


プロトンチャンネルの第一原理MD

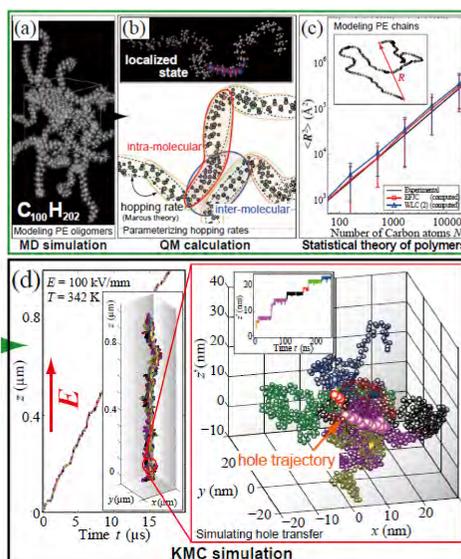


- T. Hirano, F. Sato, *PCCP*, 2014, **16**, 14496.
- K. Chiba, T. Hirano, F. Sato, M. Okamoto, *IJQC*, 2013, **113**, 2345.

#### 各種応用研究



ヒドロゲナーゼのガスキャビティ構造予測



絶縁体材料の電子移動度解析



各種教科書あり

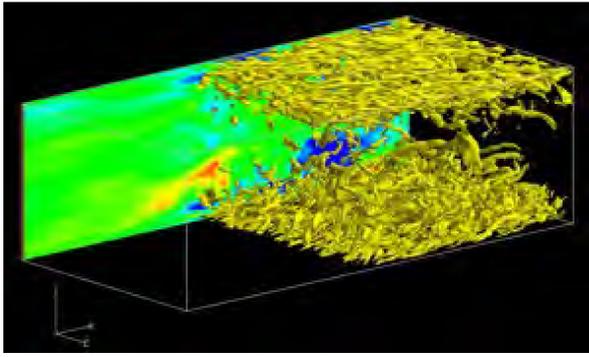
- T. Tamura, N. Tsunekawa, M. Nemoto, K. Inagaki, T. Hirano, F. Sato, *Sci. Rep.*, 2016, **6**, 19742.
- M. Sato, A. Kumada, K. Hidaka, T. Hirano, F. Sato, *App. Phys. Lett.*, 2017, **110**, 092903.

### 乱流の物理とモデリング

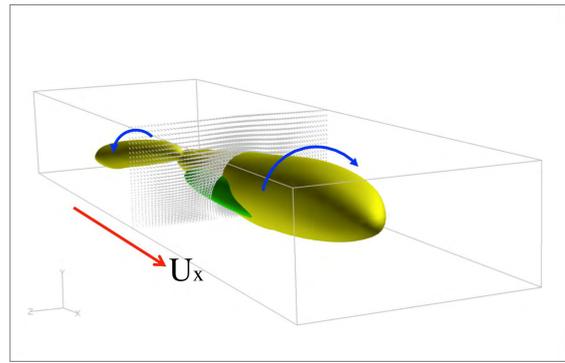
- 物理機構にもとづくLESモデルとRANSモデルの研究
- 回転・旋回流の数値シミュレーション
- 電磁流体乱流の物理とモデリング

#### 物理機構にもとづくLESモデルとRANSモデルの研究

チャンネル乱流の数値シミュレーションと解析

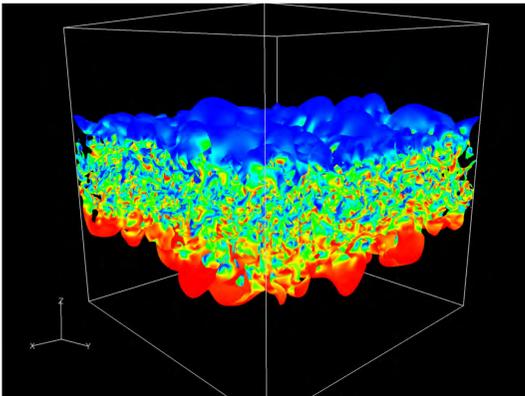


RANS/LESハイブリッドフィルターを課したときの速度と渦の分布

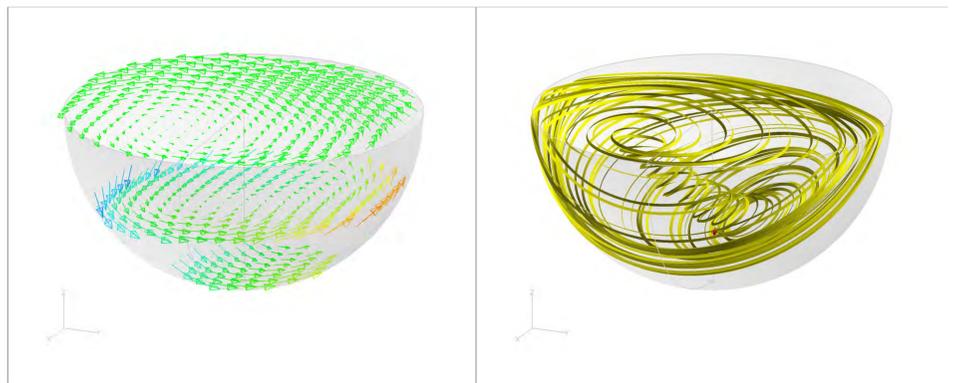


条件付き平均で抽出された壁近くの渦構造

#### 回転・旋回流の数値シミュレーション

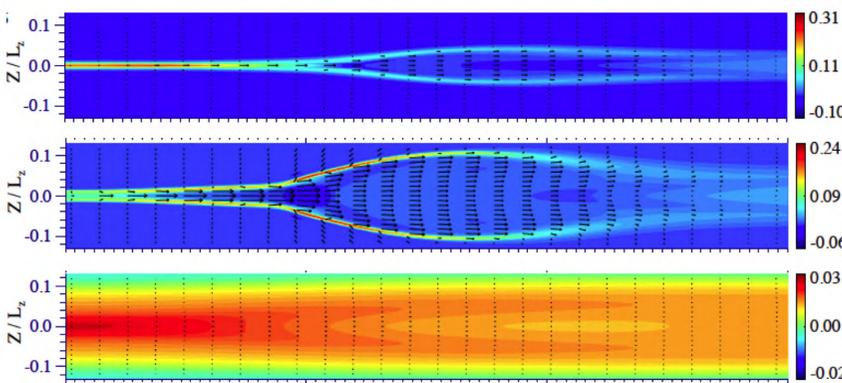


回転系の乱流拡散の運動エネルギー

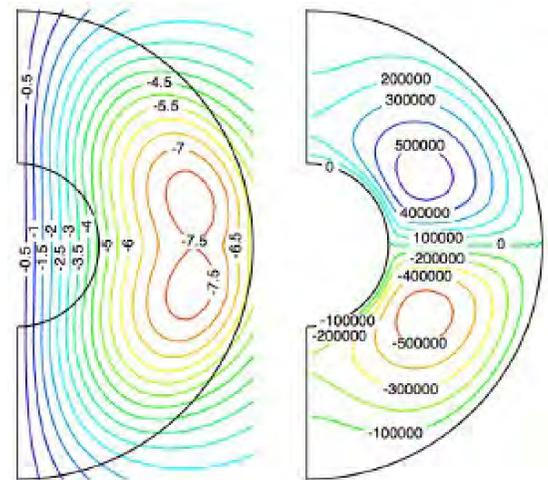


回転式の蒸留装置内の流れの数値解析  
左図: 速度ベクトル 右図: 流線

#### 電磁流体乱流の物理とモデリング



磁気リコネクションのジェットの電流密度と速度ベクトル



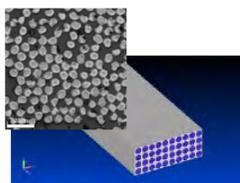
回転球殻の磁場と乱流ヘリシティの分布

### HPCIによるCFRP製品設計・製造の高度化

- 炭素繊維強化プラスチック(CFRP)のマルチスケールシミュレーション
- 樹脂の正確な非線形強度モデル導入による終極強度の的確な予測
- 熱硬化・熱可塑プロセスの正確なシミュレーションに基づく製造プロセスの最適化

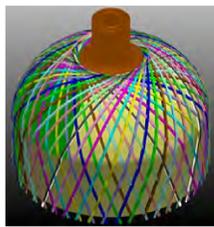
#### CFRPのマルチスケールモデリング

##### ミクロスケール



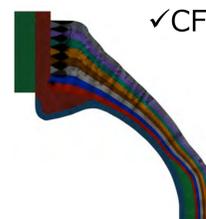
- ✓炭素繊維：直交異方性線形弾性体
- ✓樹脂：等方性非線形粘弾性体  
ひずみ速度依存破壊則

##### メソスケール



- ✓炭素繊維束：直交異方性線形弾性体
- ✓樹脂：等方性非線形粘弾性体  
ひずみ速度依存破壊則

##### マクロスケール



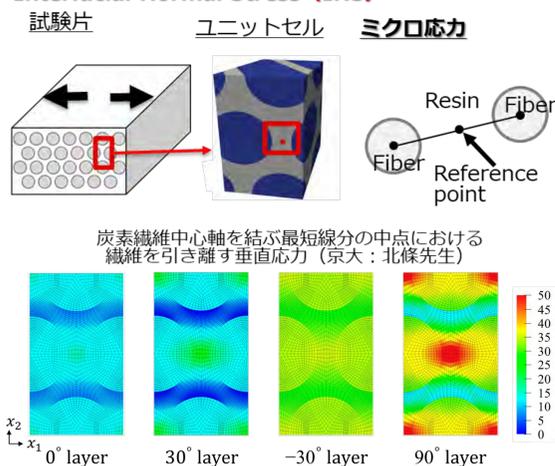
- ✓CFRP：直交異方性連続体  
平均応力破壊則

#### ミクロスケール応力解析によるCFRPの疲労寿命予測

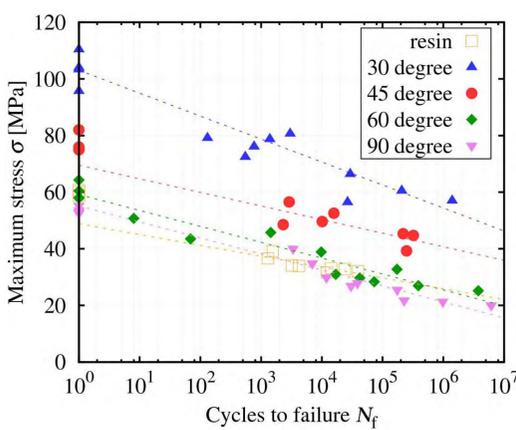
目的: 樹脂の疲労試験データからCFRP部材の疲労寿命を予測

##### 樹脂応力が支配する疲労損傷の発展

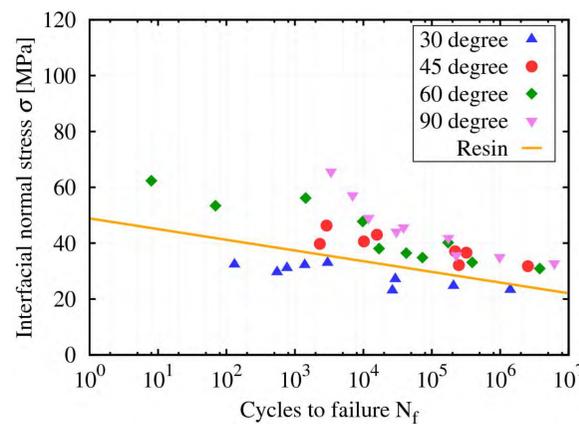
##### Interfacial Normal Stress (INS)



##### 一方向強化CFRP試験片の疲労寿命予測



公称応力整理によるばらつき

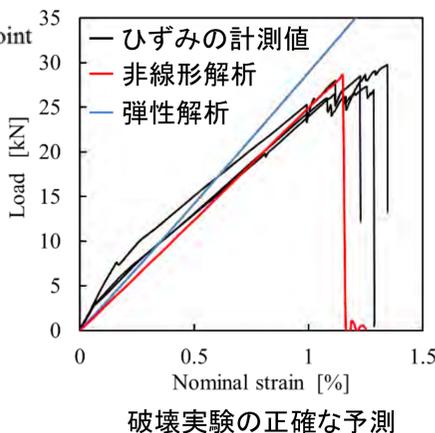
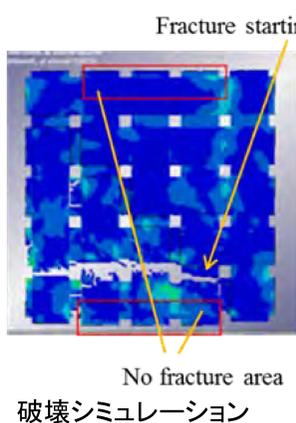
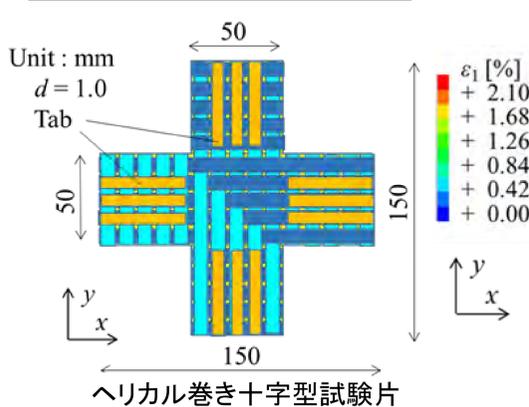


INSによる統一評価

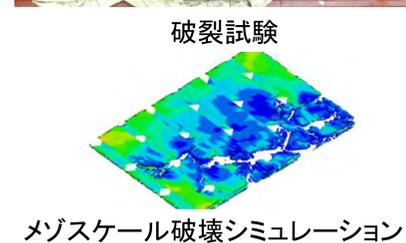
#### CFRP製高圧水素容器のメソスケール強度評価

目的: 正確な強度評価による最適強度設計

##### 試験片によるバリデーション

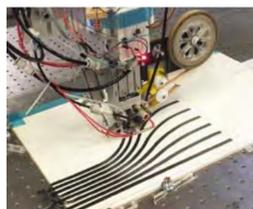


##### 容器破裂強度予測への展開



#### 熱可塑CFRP成形マルチスケールシミュレーション

目的: 樹脂特性の直接的導入による成形プロセス最適化



##### 樹脂の自己発熱を考慮した熱伝導解析

##### 結晶化度解析

##### 温度変化と相変化により発生するひずみ解析

##### 樹脂流動によるひずみ緩和解析

##### 粘弾性解析

##### 熱可塑樹脂の定式

##### 結晶化度の発展

##### 温度・圧力依存比体積

##### 緩和弾性率のマスターカーブ

##### 一般化Voigtモデル $C(t)$

##### 温度依存性

##### 時間-温度移動因子: $a_T(T)$

##### 直接温度依存性付与: $E_e(T), E_i(T)$

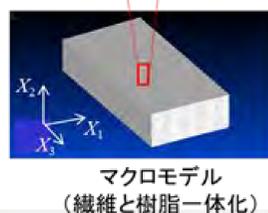
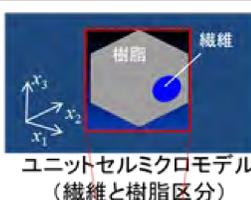
##### 緩和弾性率のマスターカーブ

##### 緩和弾性率のマスターカーブ

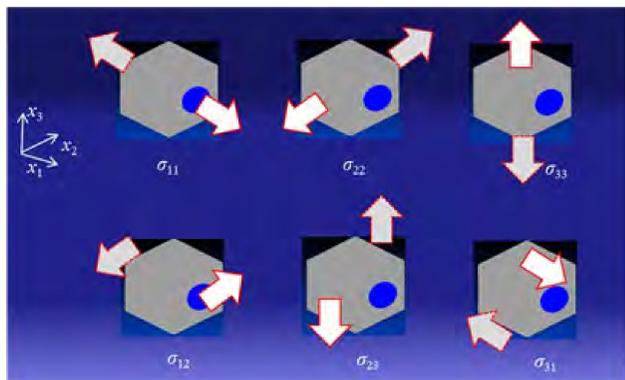
##### 緩和弾性率のマスターカーブ

##### 緩和弾性率のマスターカーブ

##### 緩和弾性率のマスターカーブ



$$\begin{aligned} \textcircled{1} \text{ ミクロモデルによるクリープ解析 } \{ \bar{\epsilon} (t) \} &= [ \bar{C} (t) ] \{ \sigma (t) \} \\ \text{一軸引張数値試験: } \sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33} &\rightarrow [ \bar{C}_{11}, \bar{C}_{22}, \bar{C}_{33}, \bar{C}_{12}, \bar{C}_{23}, \bar{C}_{31} ] \\ \text{純せん断数値試験: } \sigma_{12}, \sigma_{23}, \sigma_{31} &\rightarrow [ \bar{C}_{44}, \bar{C}_{55}, \bar{C}_{66} ] \end{aligned}$$



- ・単位ステップ応力  $\sigma_{ij}$  を与えた場合のマクロひずみ応答
- ・マクロクリープコンプライアンスマトリックス  $[\bar{c}]$  が算出される

マイクロモデルクリープ解析結果を用いたマクロモデル  
異方性粘弾性パラメータの同定



# 革新的シミュレーション研究センター

Center for Research on Innovative Simulation Software



## 加藤千幸研究室

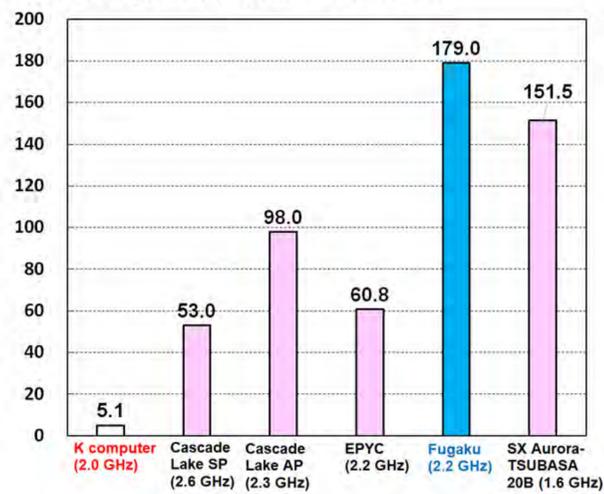
### 熱流体システム制御工学

#### 大規模熱流体解析システムの研究開発と実用化

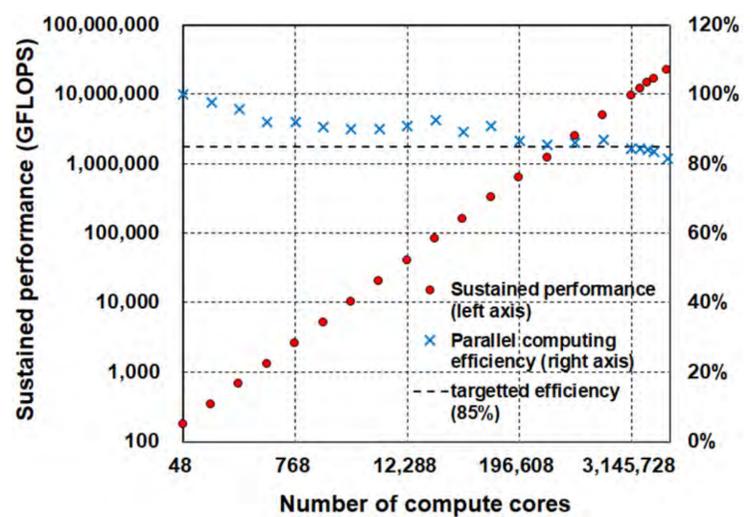
本研究室は理化学研究所、富士通株式会社や日本電気株式会社と連携して、有限要素法に基づく汎用流体解析ソフトウェアFrontFlow/blue (FFB)、および、格子ボルツマン法に基づく流体音響直接計算アプリケーションFrontFlow/x (FFX)の研究開発を実施するとともに、ターボ機械、自動車、船舶などを対象として、これらのアプリケーションソフトウェアの実用化も進めています。FFBは7,000億要素の大規模解析の実績があり、FFXは2兆格子の大規模解析の実績があります。さらに、風洞実験や流体数値解析も駆使して複雑な熱流体現象の解明にも取り組んでいます。

#### 流体解析アプリケーションFFBの研究開発

Sustained single-node performance in GFLOPS

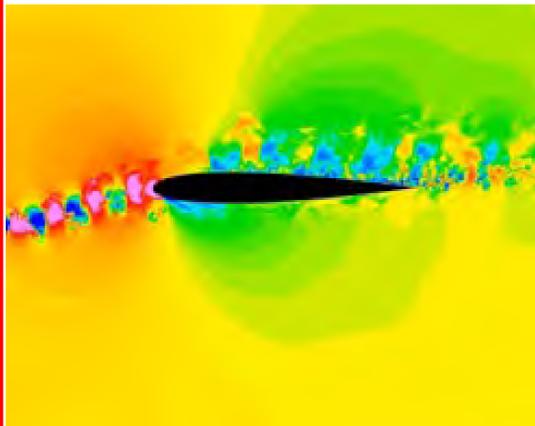


「京」の30倍以上のノード性能を実現

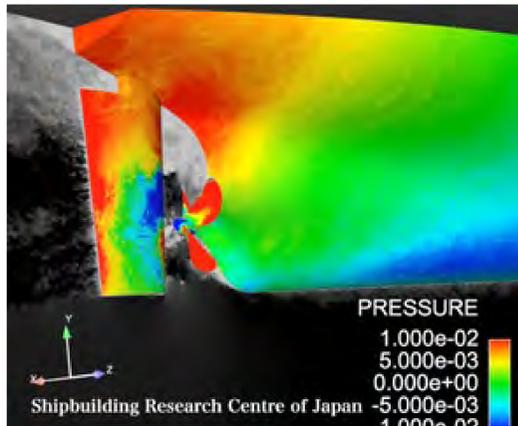


「富岳」13万ノードで20 PFの性能を実現

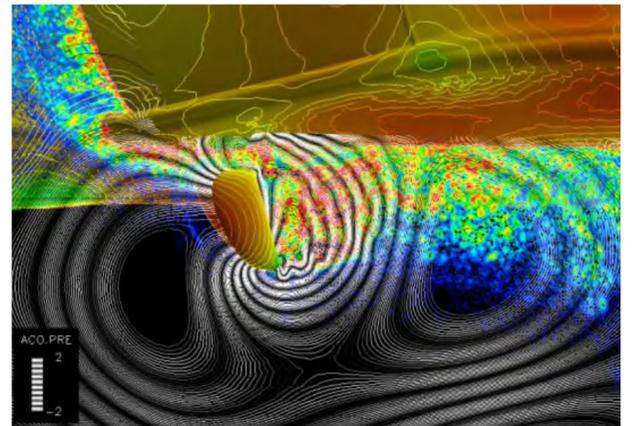
#### 基礎研究・応用研究の推進



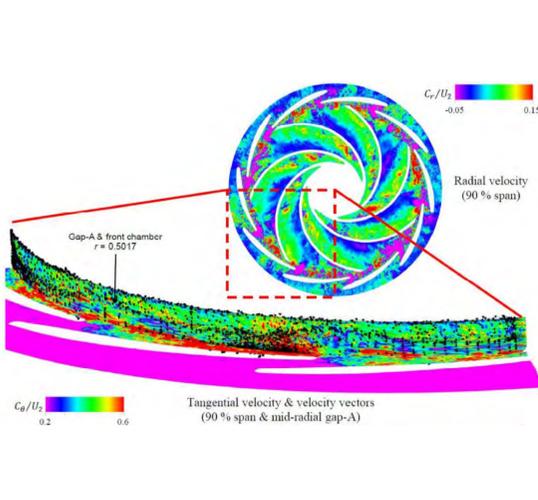
乱れから発生する音の解析



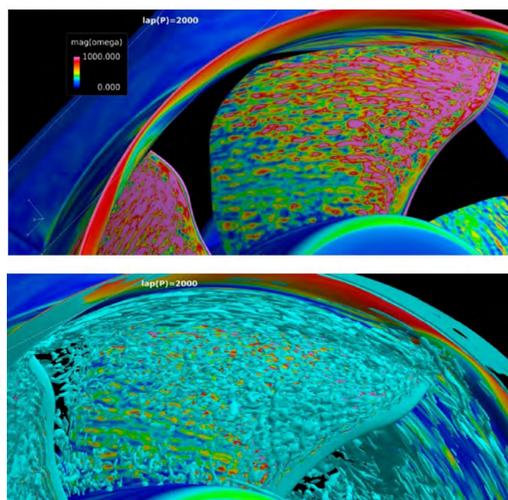
船体まわりの流れ



ドアミラーまわりの流れと音



遠心ポンプの性能予測



ファンの騒音予測

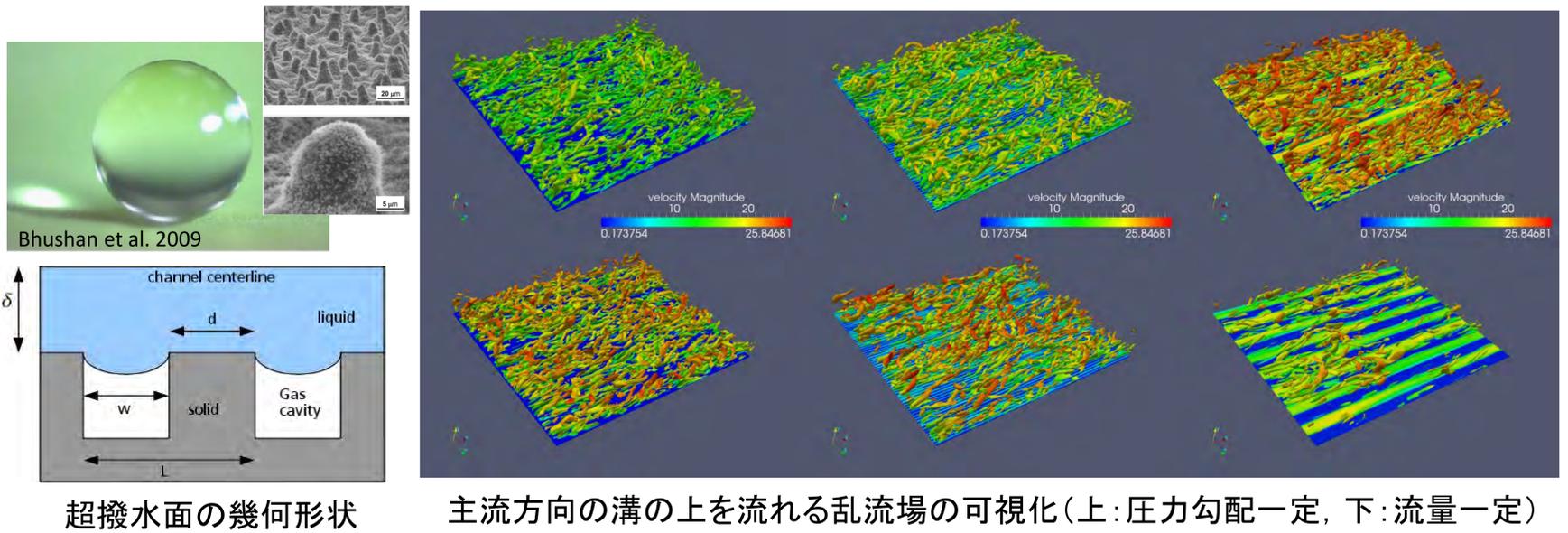


数値解析の検証のための風洞実験

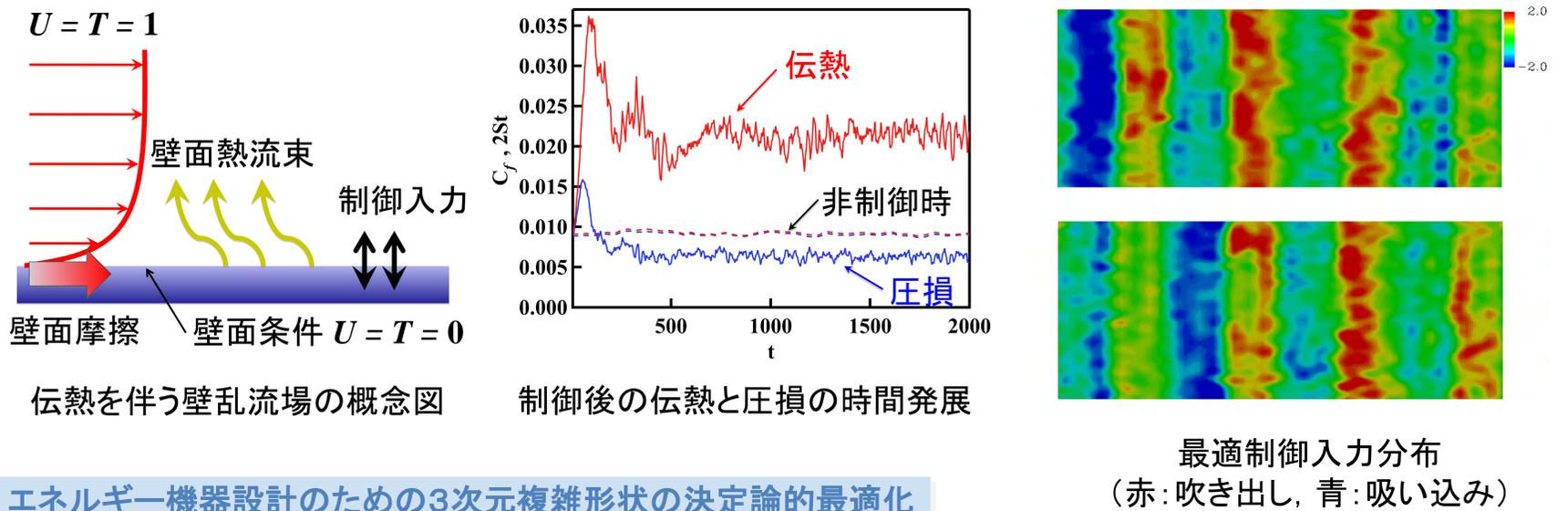
### 流れの予測と制御

- 摩擦抵抗低減のための壁乱流の最適制御
- 革新的対流伝熱促進のための制御アルゴリズムの開発
- エネルギー機器高効率化のための3次元複雑形状の決定論的最適化
- 有限のセンサー情報に基づく、乱流及びスカラー場の最尤推定

#### 超撥水面における乱流摩擦抵抗低減

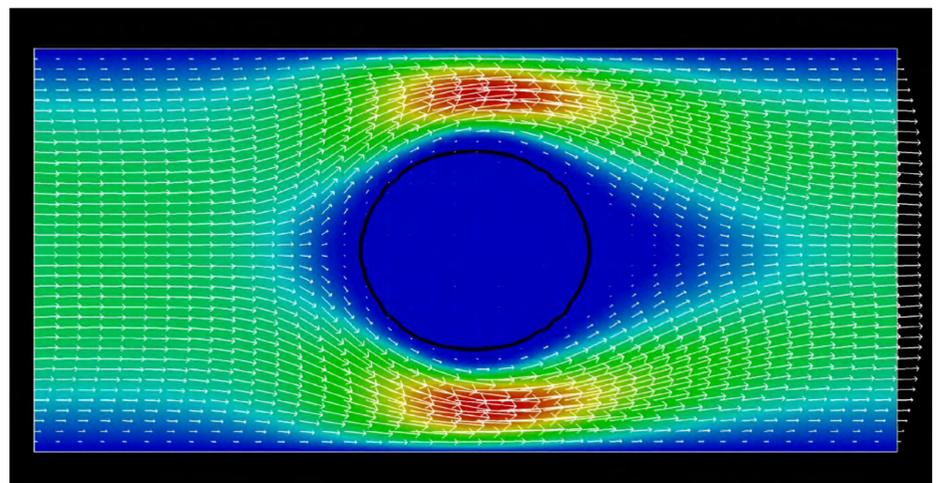
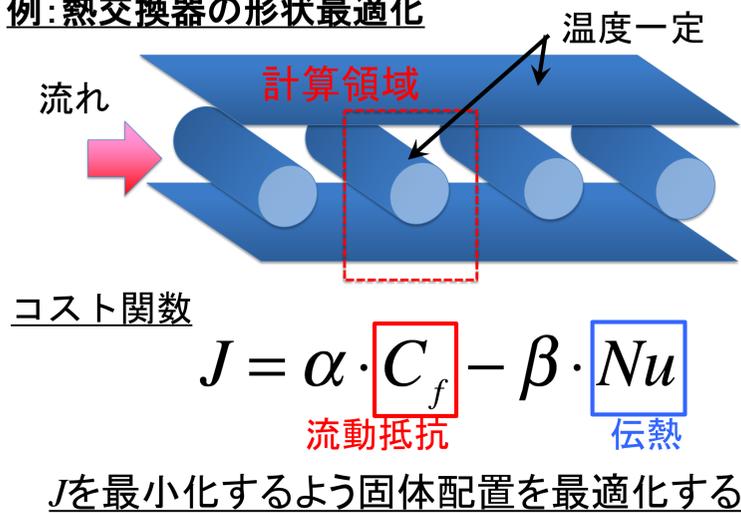


#### 壁乱流における伝熱促進と抵抗低減の同時達成



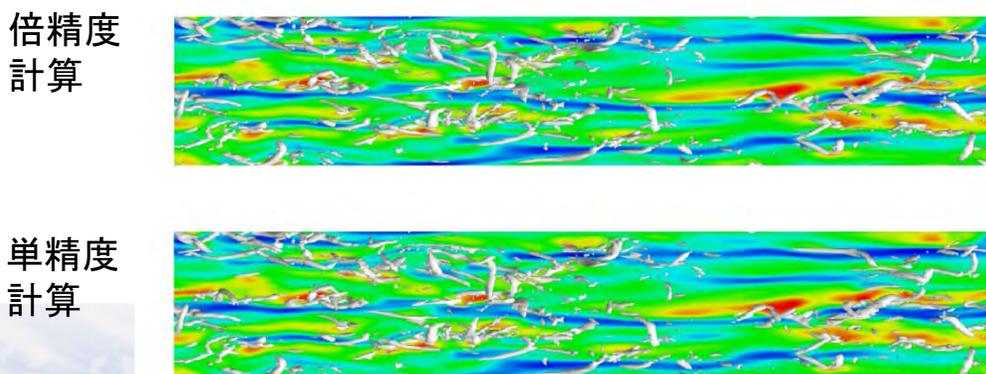
#### エネルギー機器設計のための3次元複雑形状の決定論的最適化

##### 例: 熱交換器の形状最適化

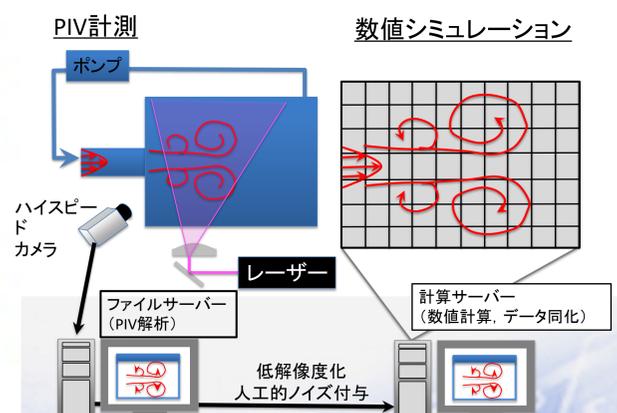


#### 有限のセンサー情報に基づく流れとそれに付随するスカラー場の最尤推定

なぜ天気予報は難しいか ~カオス, 非線形~



#### 実験と数値計算の融合による流れの推定



### 器官・組織・細胞 マルチスケール・マルチフィジックス シミュレーション

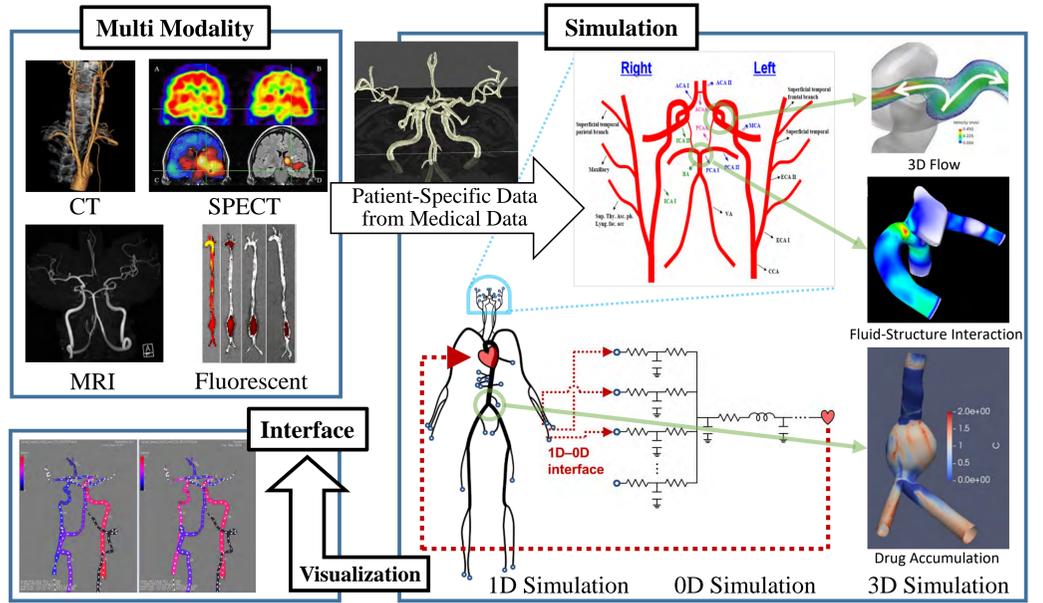
#### 概要

医用画像とシミュレーションを組み合わせることにより、臨床現場で必要とされている血行動態を示す情報を提供

Multi Modality: CT, MRI, SPECT, 超音波流速計などの医用データ

Simulation: OD, 1D, 3Dを組み合わせたマルチスケール解析、流体構造連成や化学種の輸送を解くマルチフィジックスシミュレーション

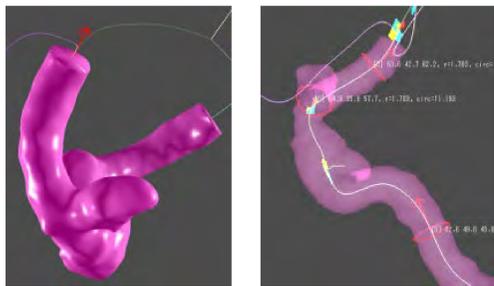
Interface: 血行動態の効果的な可視化システム



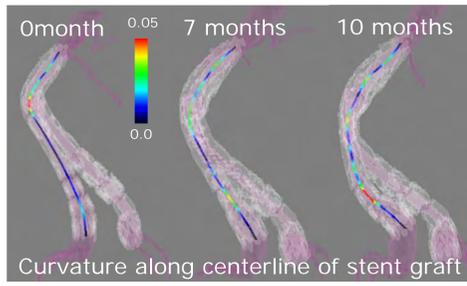
マルチスケール・フィジックスシミュレーションの概要

#### V-Modeler

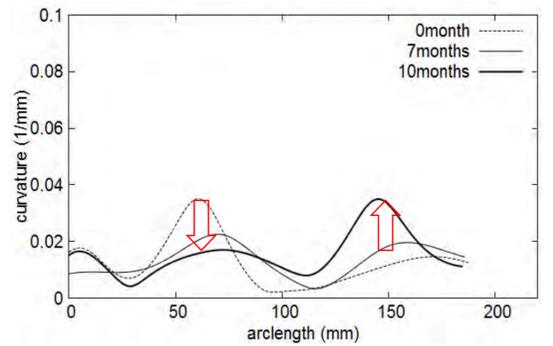
医用画像からの血管およびステントグラフトの3次元形状の経時変化を調査するためのモデリングシステム



血管内腔・動脈瘤のセグメンテーション  
表面の再構築、中心線抽出



形状パラメータ抽出  
(長さ、径、曲率、捩れ率)

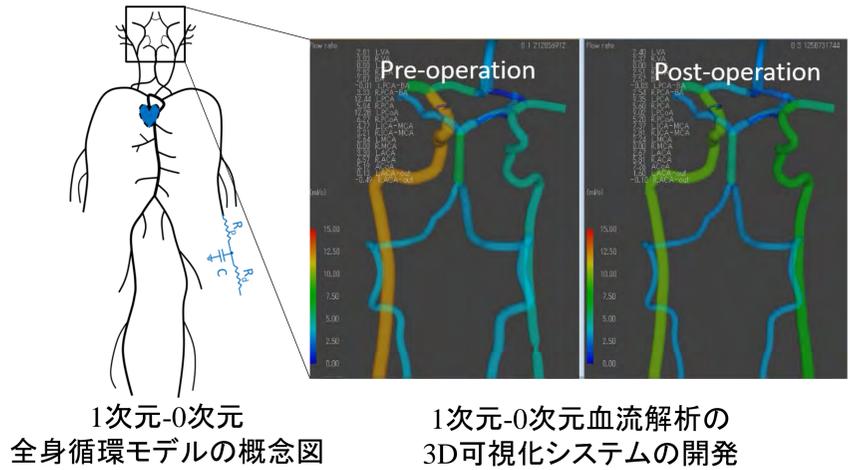


腹部大動脈瘤内ステントグラフト形状の経時変化の定量化

#### マルチスケール血流解析

患者固有の脳循環に対する1次元-0次元血流解析プログラム  
全身循環の影響を考慮した解析が可能

- 1次元解析(長さ, 太さ)
  - 全身の83本の主要血管をモデル化
  - Lax-Wendroff法を使用
- 0次元解析(抵抗, コンプライアンス)
  - 末梢の細動脈、静脈、心臓をモデル化
  - 4次のRunge-Kutta法を使用



1次元-0次元  
全身循環モデルの概念図

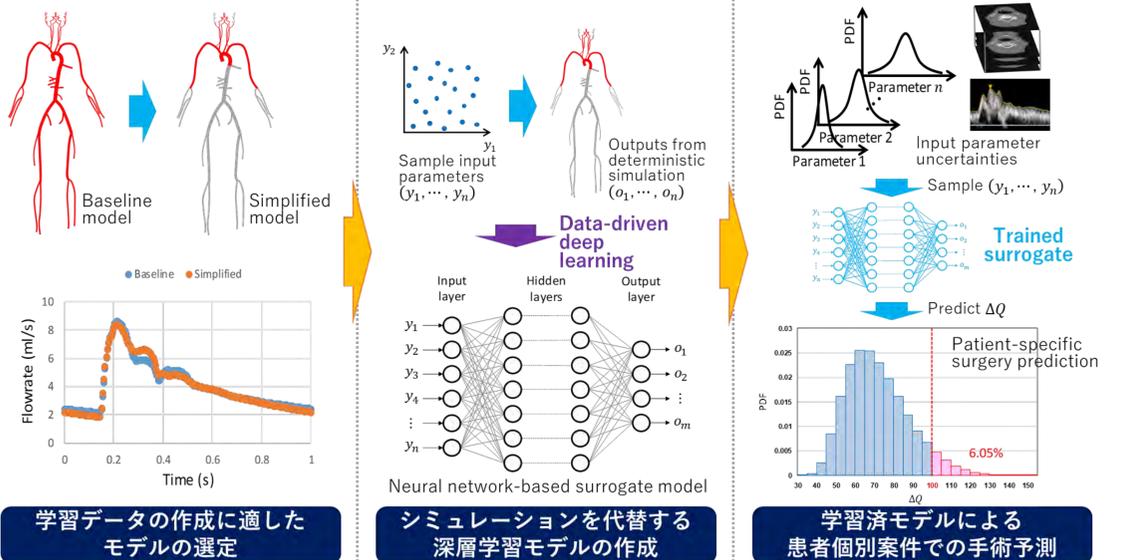
1次元-0次元血流解析の  
3D可視化システムの開発

#### シミュレーションと深層学習の統合による予測医療

血流シミュレーションの臨床応用に向けた課題解決

医用データやモデルパラメータの不確かさを考慮したデータセットを用いて機械学習を行うことにより、任意の解析条件に対して血流循環を迅速に予測する「代理モデル」を構築

- 予測結果のばらつきを確率分布として評価
- 一般的なPCでも即時に行えるような、実用性に富む手法開発



学習データの作成に適したモデルの選定

シミュレーションを代替する深層学習モデルの作成

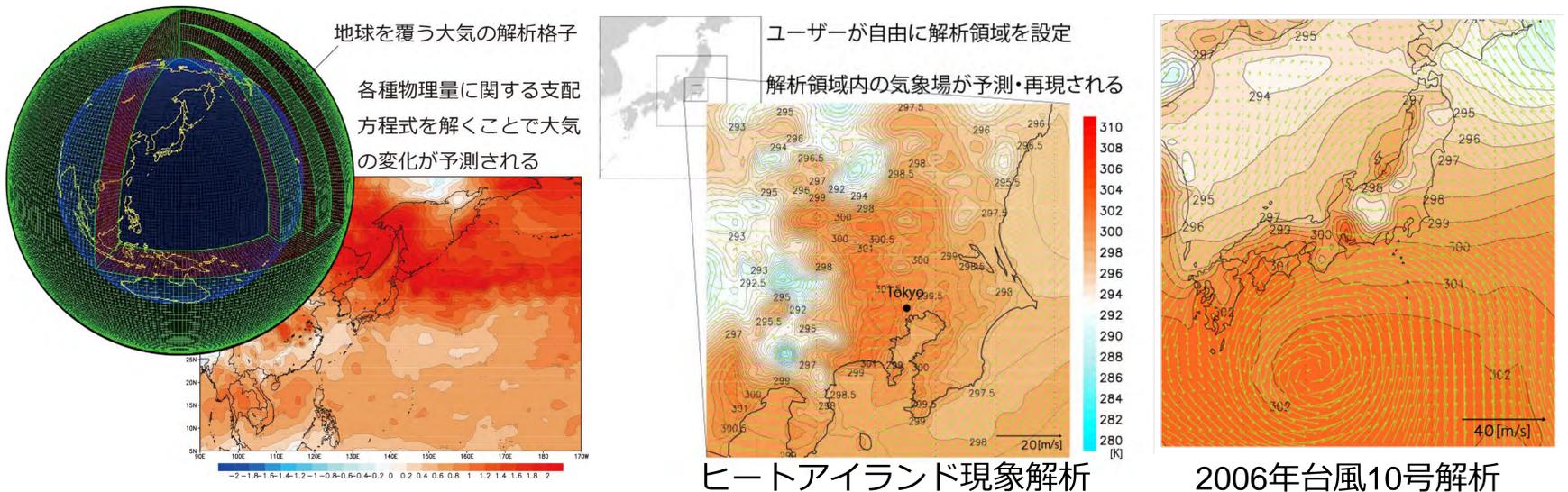
学習済みモデルによる患者個別案件での手術予測

### 未来の都市空間設計のための建築・都市の熱・空気環境予測

- ▶ 人体周辺から都市広域までの様々なスケールにおける気候モデルを開発
- ▶ サステナブルな都市の実現に向けた熱・空気環境予測ツールを構築

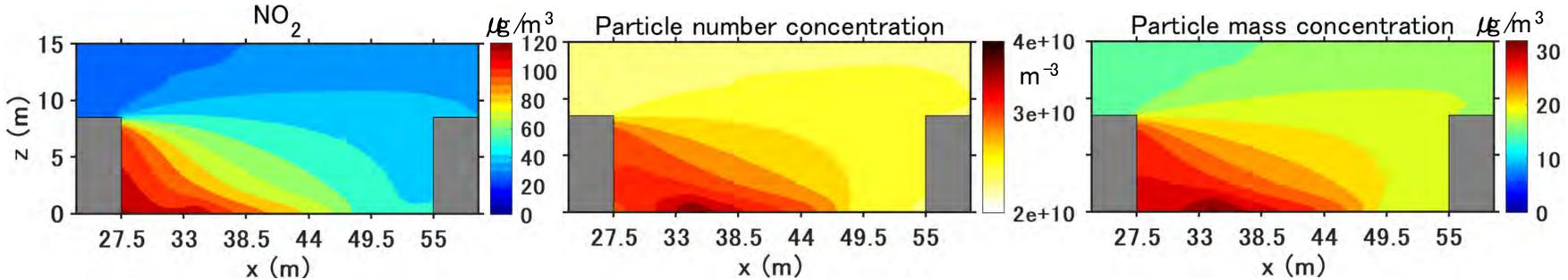
#### WRFを用いた極端気象の再現

- ▶ 全球気候モデルにより予測された将来気候を領域気象モデルにより力学的ダウンスケーリングを行うことで建築熱負荷計算のための近未来気象データを作成



#### 化学反応・粒子の動力学・CFD 連成解析によるストリートキャニオンにおける汚染物質の拡散予測

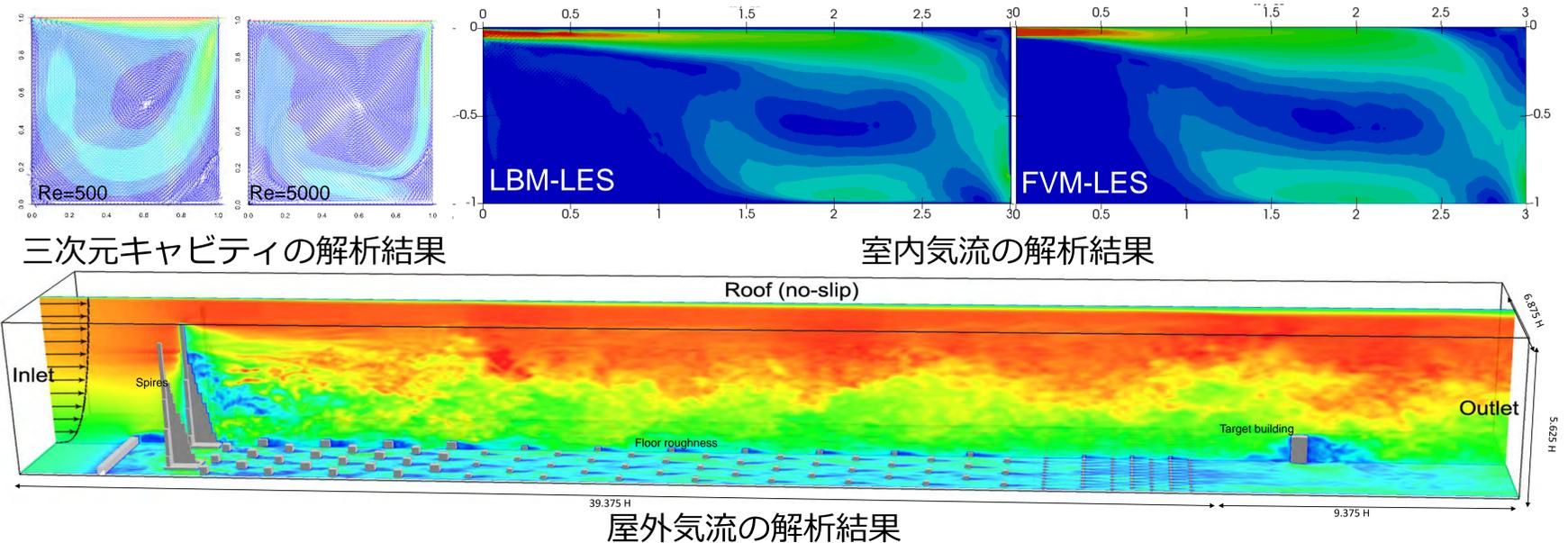
- ▶ ガスとエアロゾルの化学反応を解析するボックスモデルを数値流体力学と連成し、交通排出による汚染物質の拡散を解析



ストリートキャニオンにおけるNO<sub>2</sub>の時間質量濃度およびPM<sub>10</sub>の時間平均数量濃度と質量濃度の分布

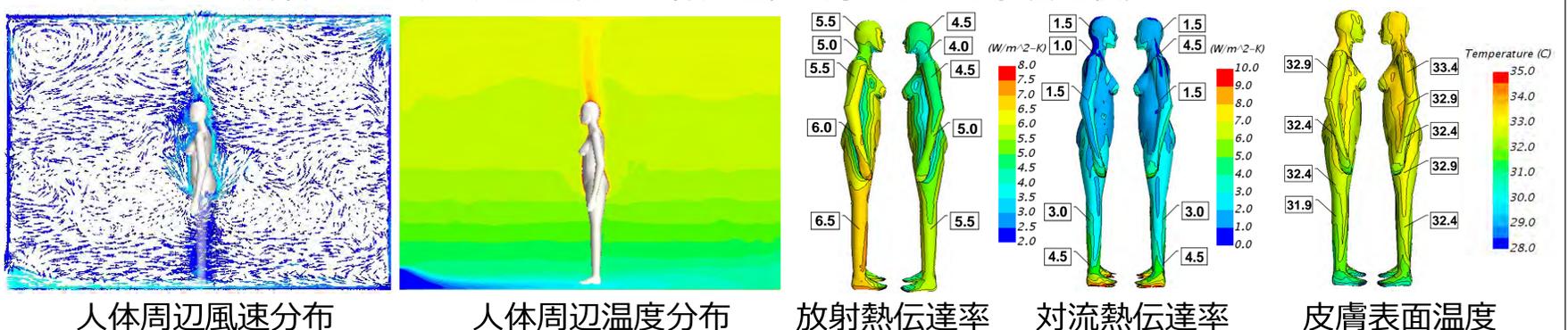
#### 格子ボルツマン法による建築風環境の解析

- ▶ 格子ボルツマン法により、複雑かつ大規模な建築と市街地流れ場に関しても高速なLESを解析



#### 対流放射連成法による室内環境解析

- ▶ 対流放射連成解析法により、周壁温度が人体周辺微気象に及ぼす影響を検討



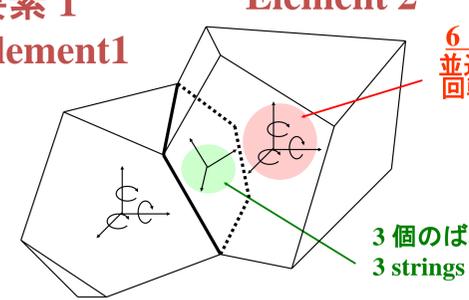
## 鉄筋コンクリート構造の微細構造解析

- 鉄筋コンクリートの微細構造解析による配筋の合理化
- 劣化した鉄筋コンクリートの残存構造性能評価

### 鉄筋コンクリートの微細構造解析による配筋の合理化

**要素 1**  
Element 1

**要素 2**  
Element 2

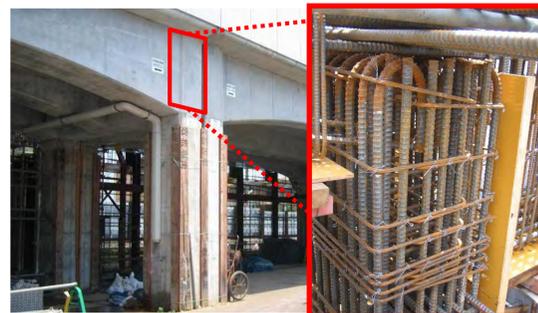


6自由度  
並進... 3方向  
回転... 3方向

3個のばね  
3 strings

川井(1977)により開発された離散解析手法。要素間にひび割れを直接表現できるため、複雑なひび割れが生じる定着部の評価に有用である。

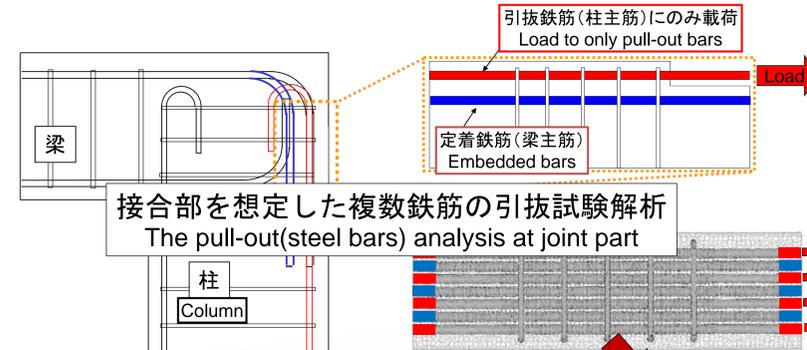
耐震基準の厳格化に伴い鉄筋コンクリート(RC)構造物中の鉄筋量が増加し過密鉄筋となる箇所が増加



- 問題点**
- 鉄筋の組み上げ時間の増加
  - コンクリート未充填による施工不良の危険性

複雑に鉄筋が配置された領域での応力状態は不明  
 ➔ **数値シミュレーションにより解明**  
 合理的な設計システムの提案を目指しています。

### 多方向配筋状況における鉄筋の引抜挙動

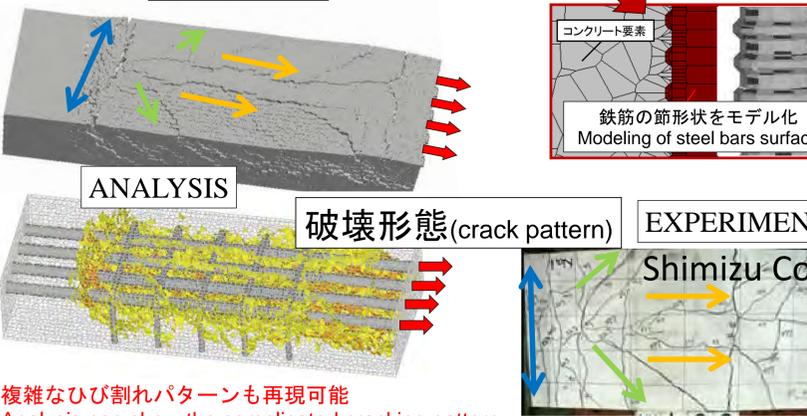


引抜鉄筋(柱主筋)にのみ载荷  
Load to only pull-out bars

定着鉄筋(梁主筋)  
Embedded bars

梁  
柱  
Column

接合部を想定した複数鉄筋の引抜試験解析  
The pull-out(steel bars) analysis at joint part



鉄筋の節形状をモデル化  
Modeling of steel bars surface

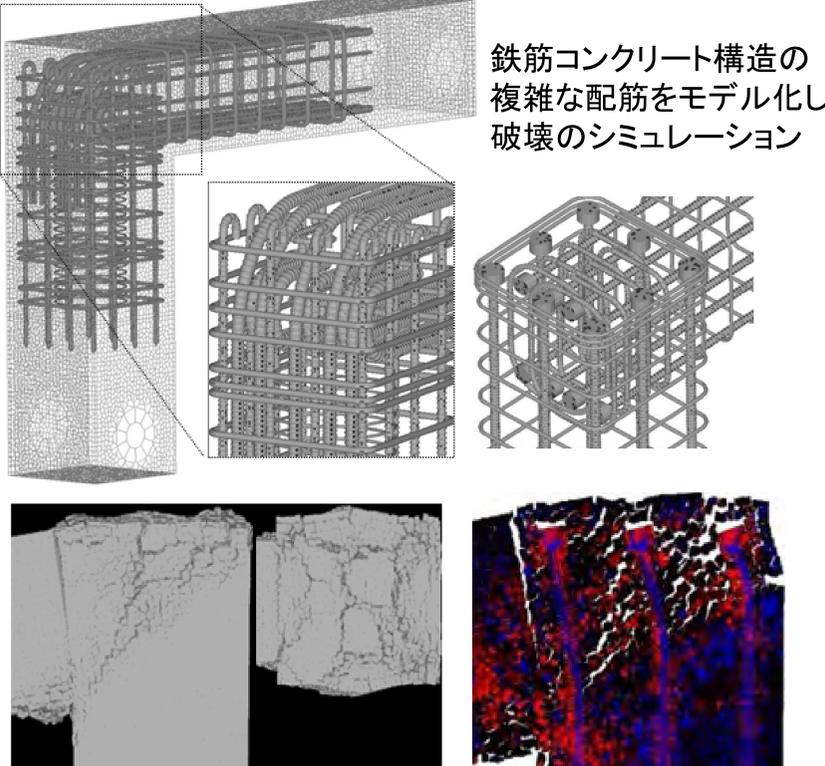
コンクリート要素

破壊形態(crack pattern)

EXPERIMENT Shimizu Co.

複雑なひび割れパターンも再現可能  
Analysis can show the complicated cracking pattern

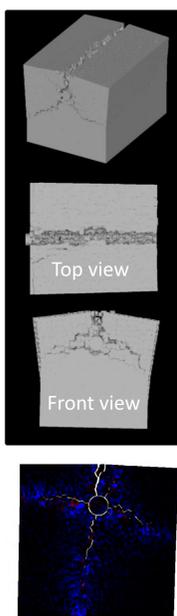
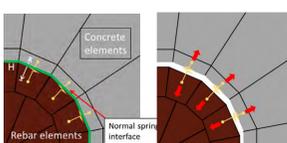
### 柱梁接合部の破壊シミュレーション



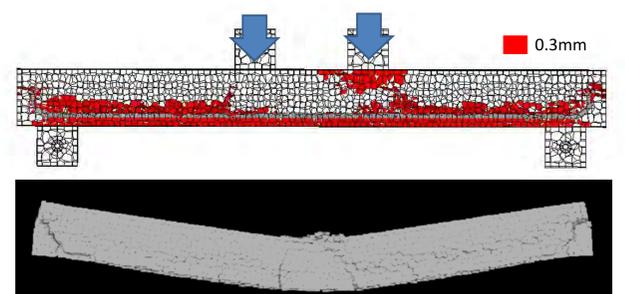
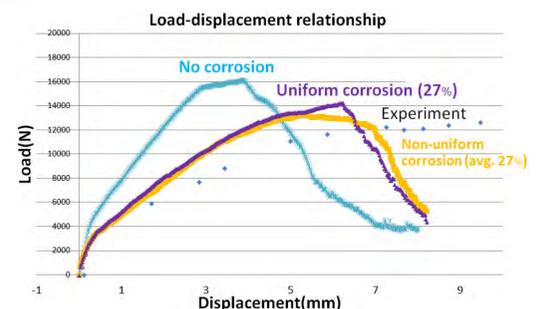
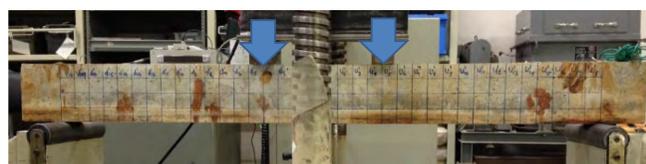
鉄筋コンクリート構造の複雑な配筋をモデル化し破壊のシミュレーション

### 劣化した鉄筋コンクリートの残存構造性能評価

鉄筋の腐食による膨張圧とコンクリートひび割れの発生



### 腐食した鉄筋コンクリート梁の载荷試験 (Y. Akiyama)



腐食による損傷導入後の载荷