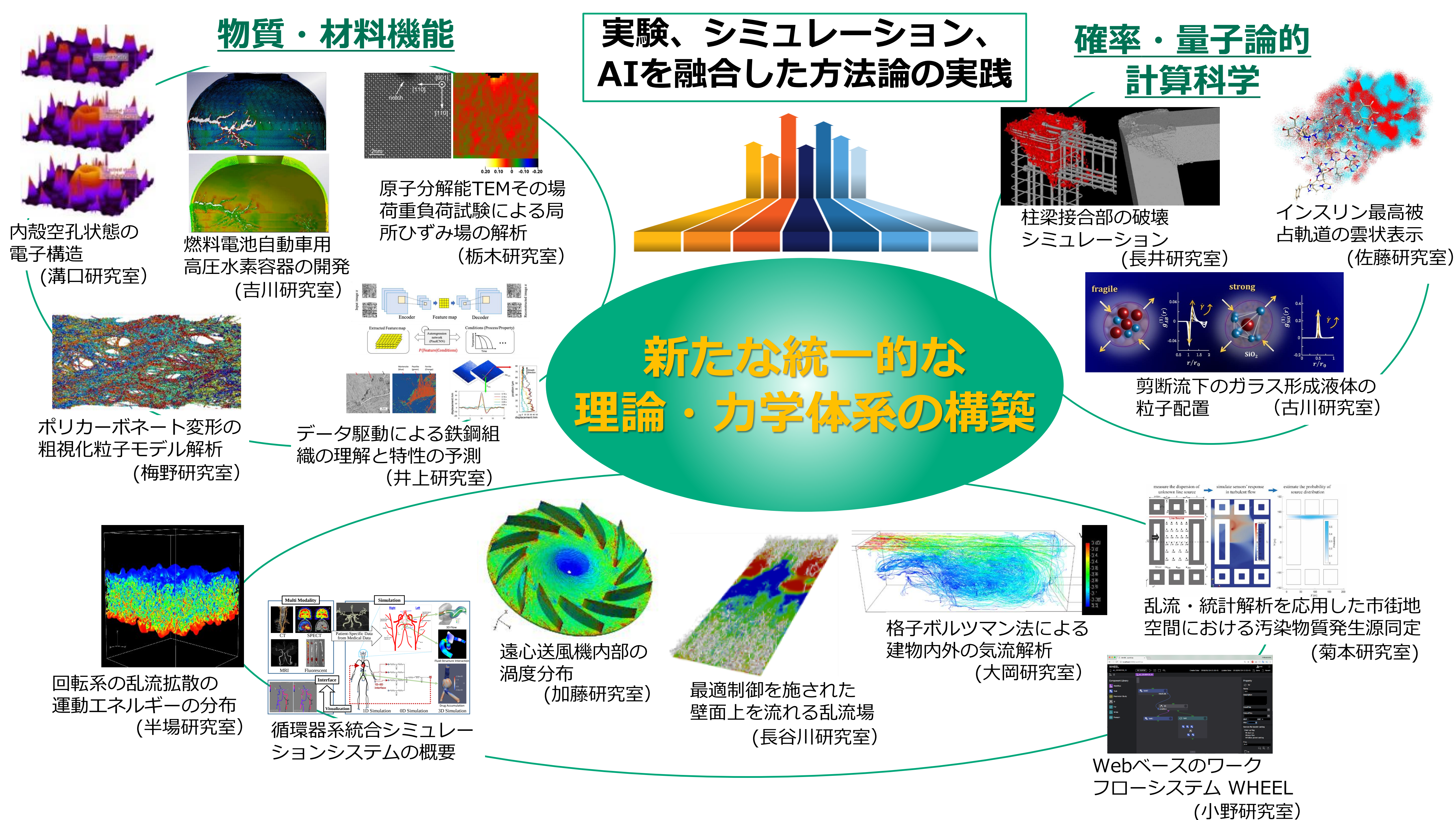


研究室紹介

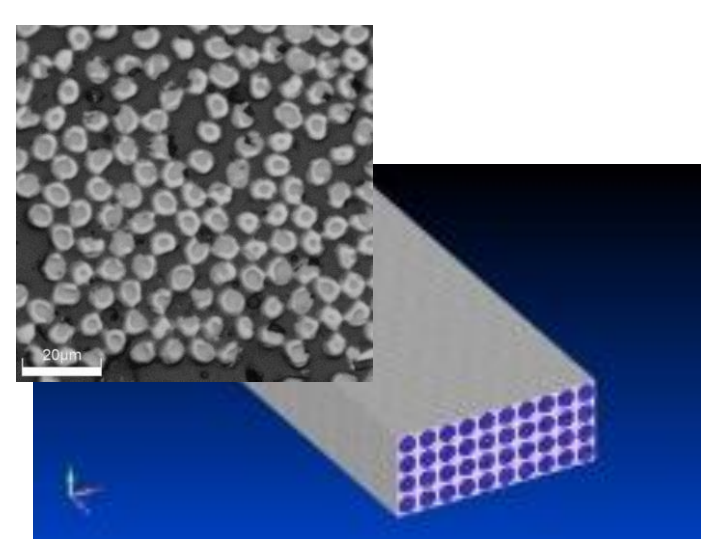


HPCIによるCFRP製品設計・製造の高度化

- 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

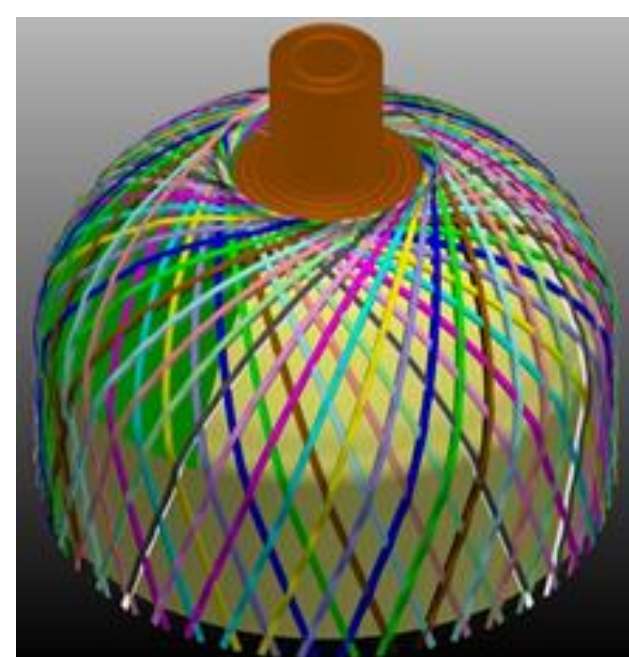
CFRPのマルチスケールモデリング

ミクロスケール



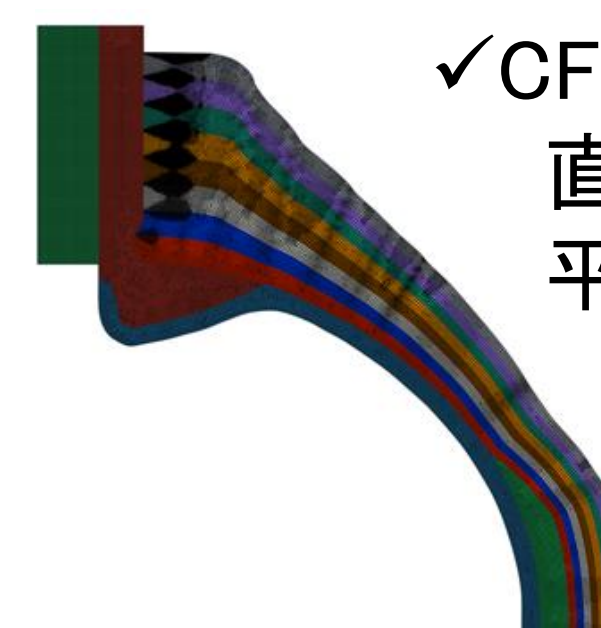
- ✓炭素纖維：
直交異方性線形彈性體
- ✓樹脂：
等方性非線形粘彈性體
ひずみ速度依存破壊則

メゾスケール



- ✓炭素纖維束：
直交異方性線形彈性體
- ✓樹脂：
等方性非線形粘彈性體
ひずみ速度依存破壊則

マクロスケール

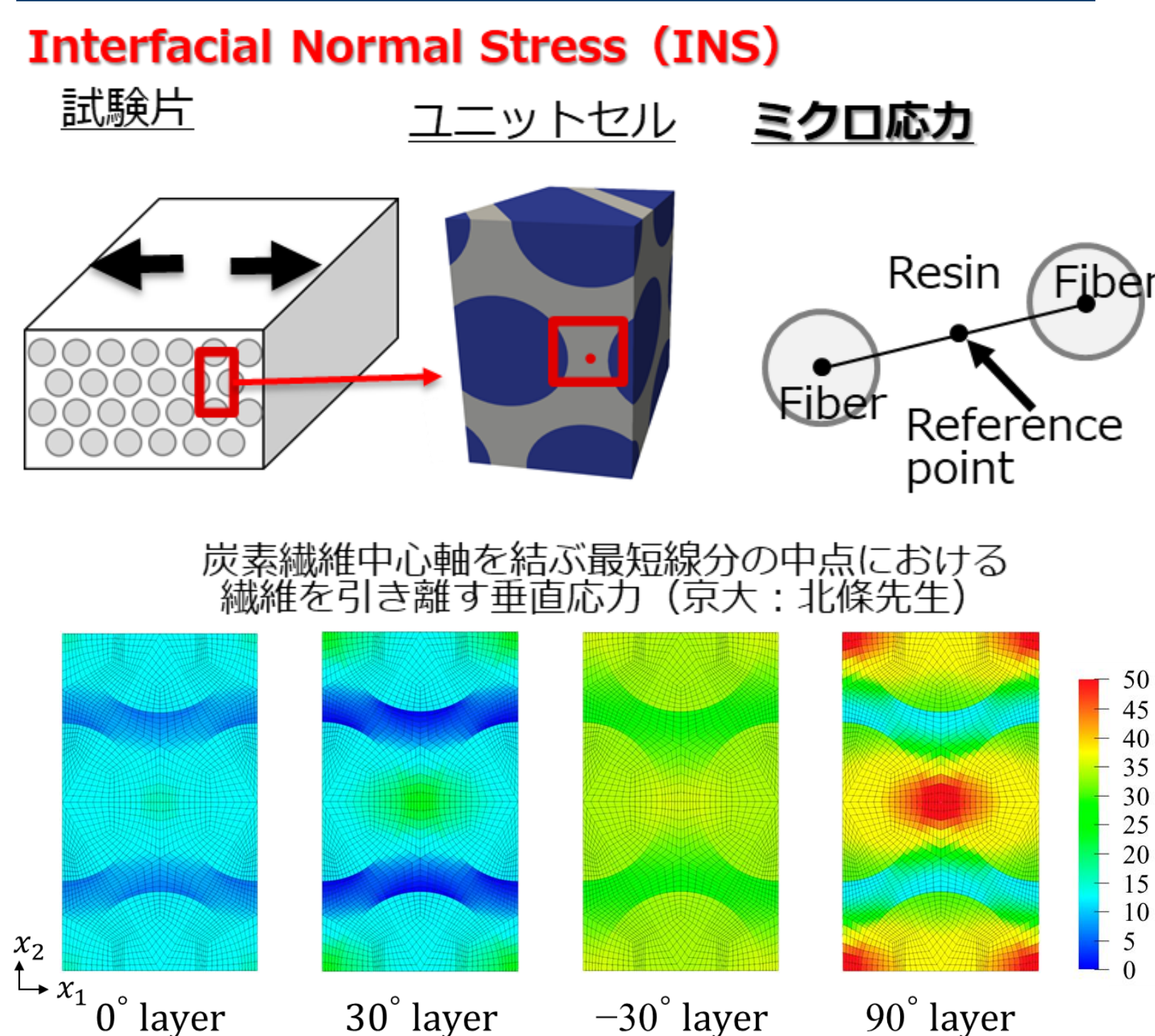


- ✓CFRP:
直交異方性連続体
平均応力破壊則

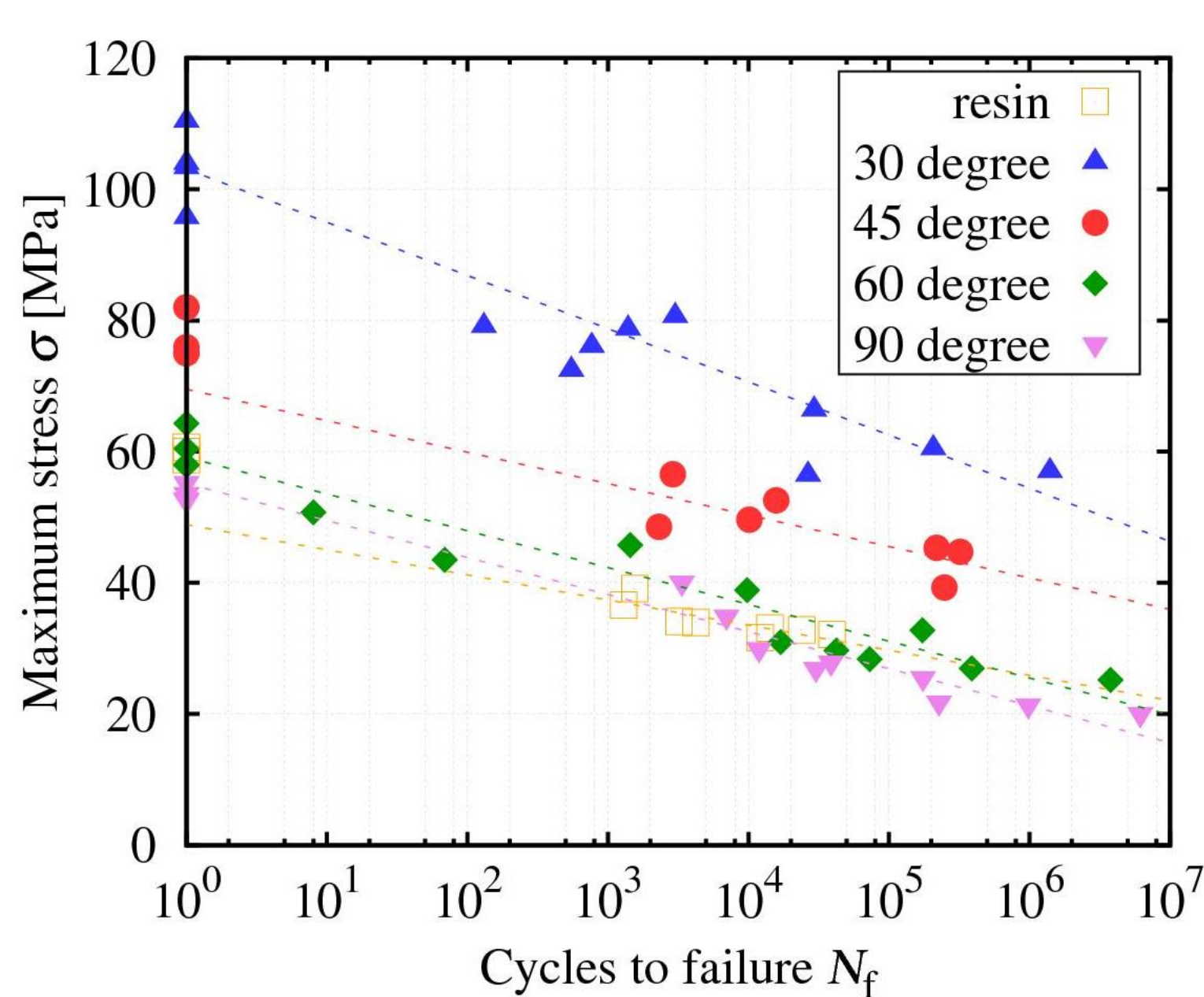
ミクروسケール応力解析によるCFRPの疲労寿命予測

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

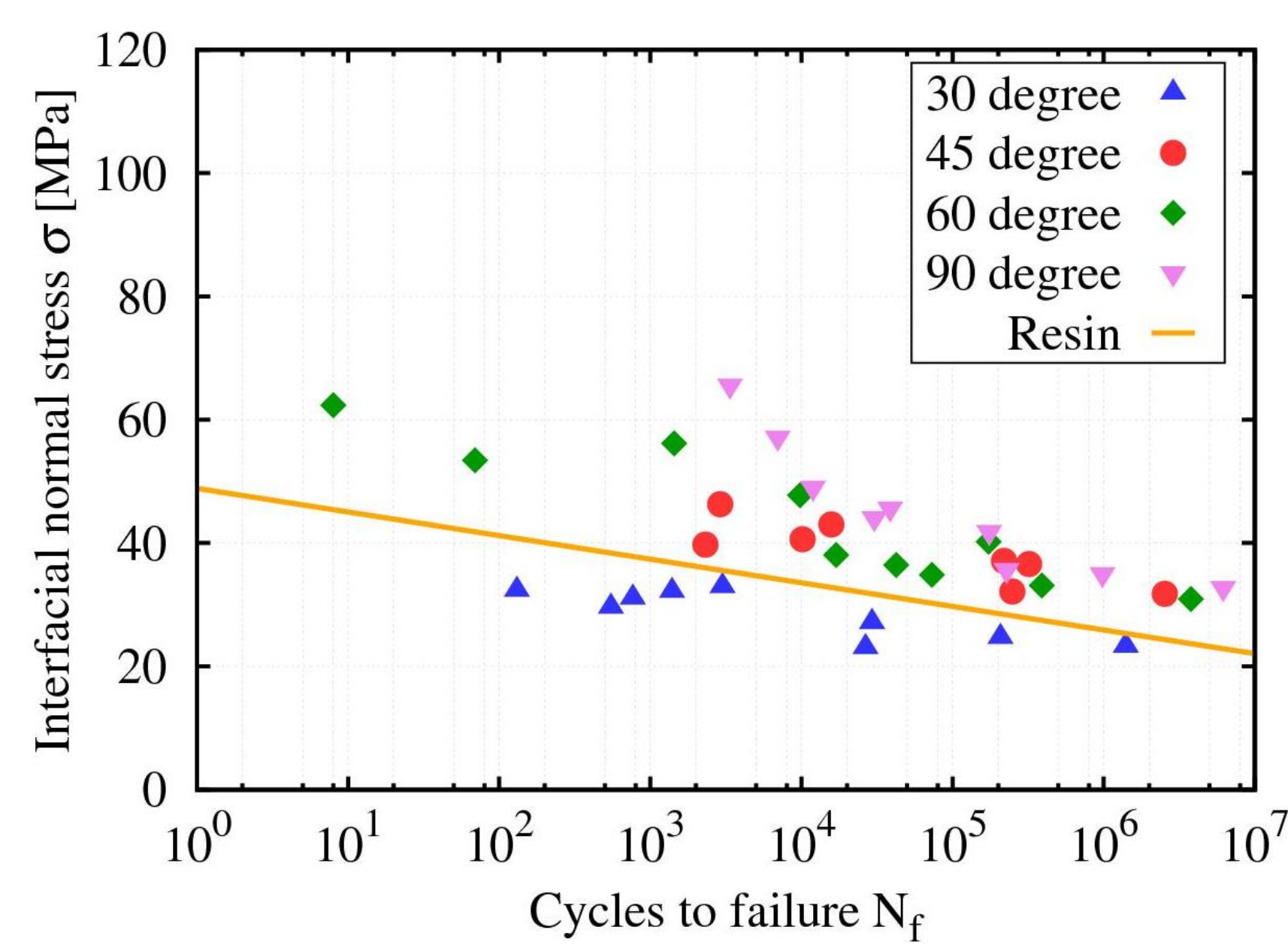
樹脂応力が支配する疲労損傷の発展



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

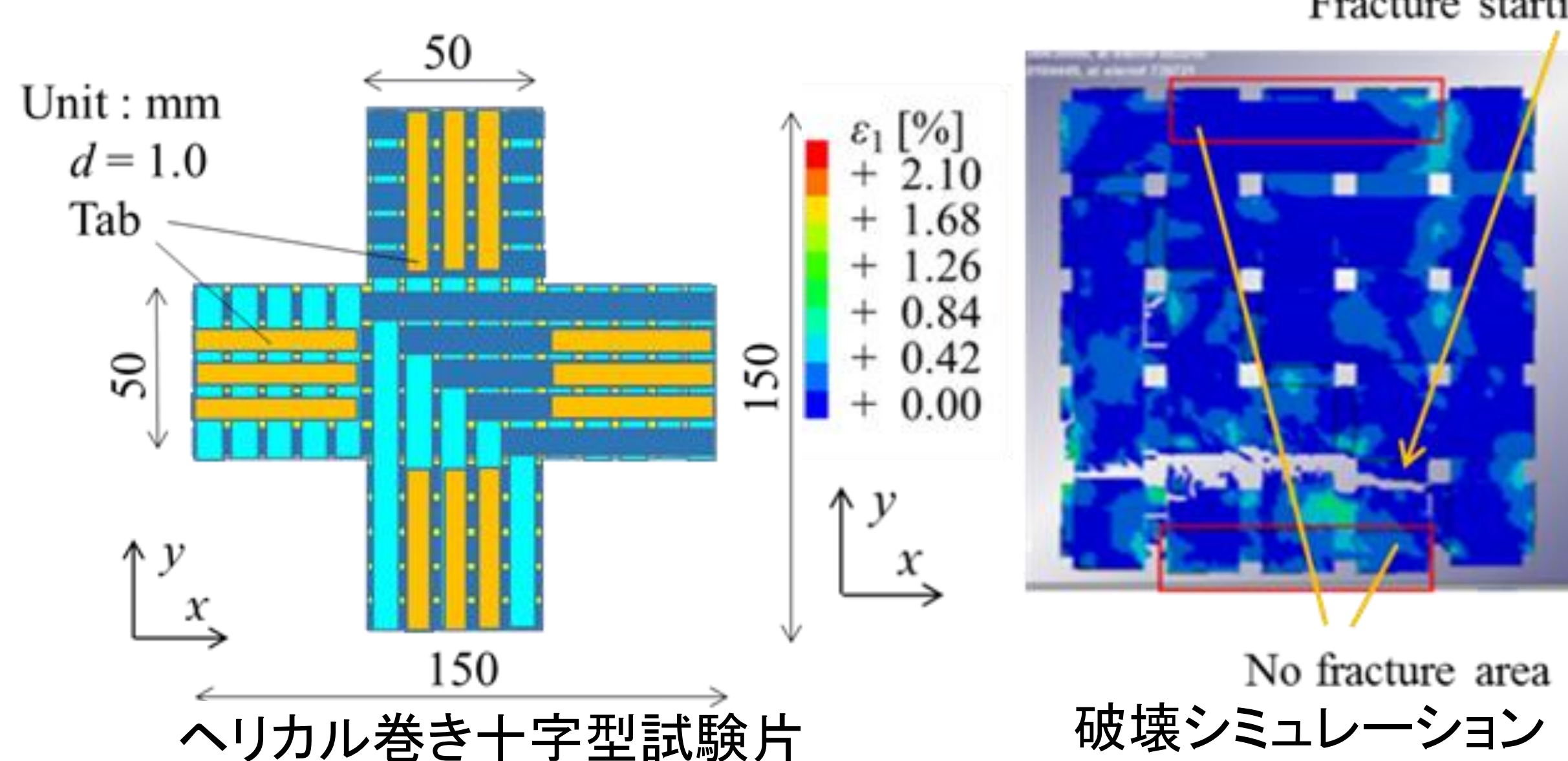


INSによる統一評価

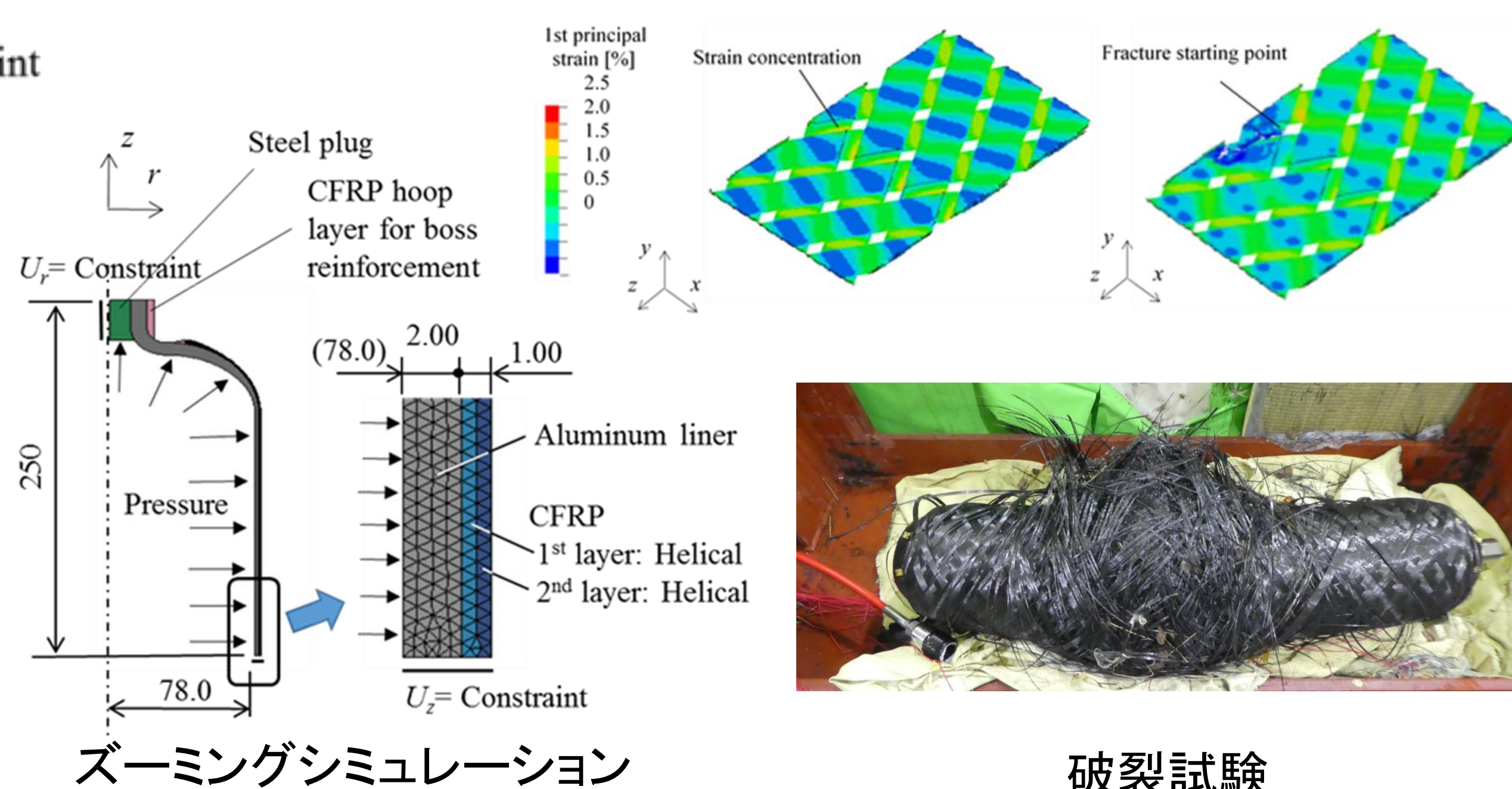
CFRP製高圧水素容器のメゾスケール強度評価

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



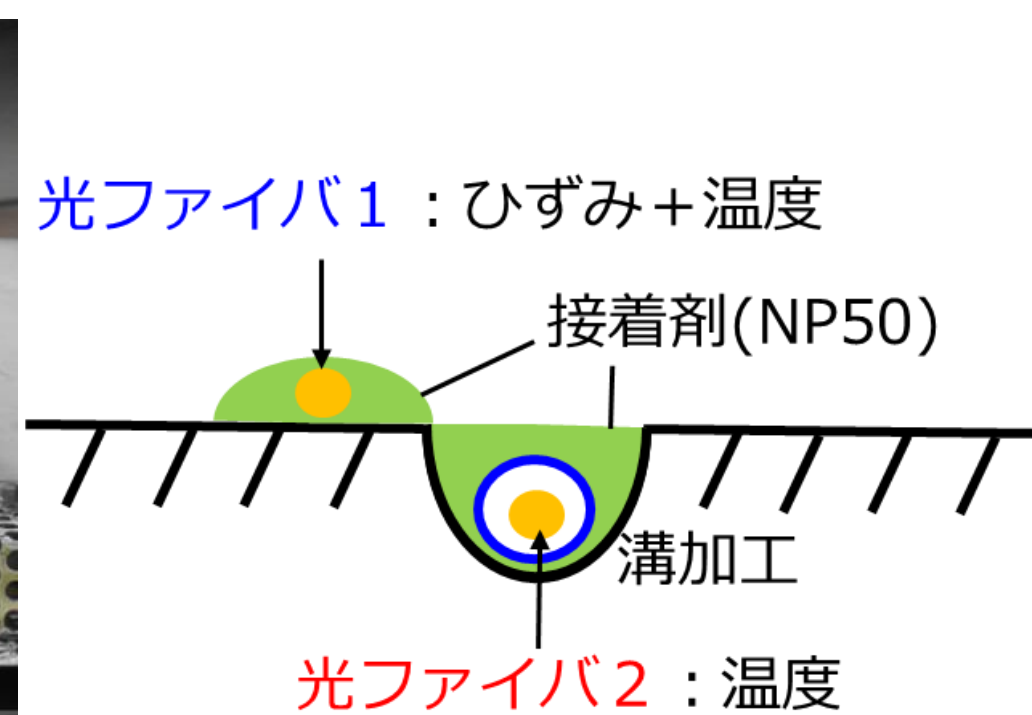
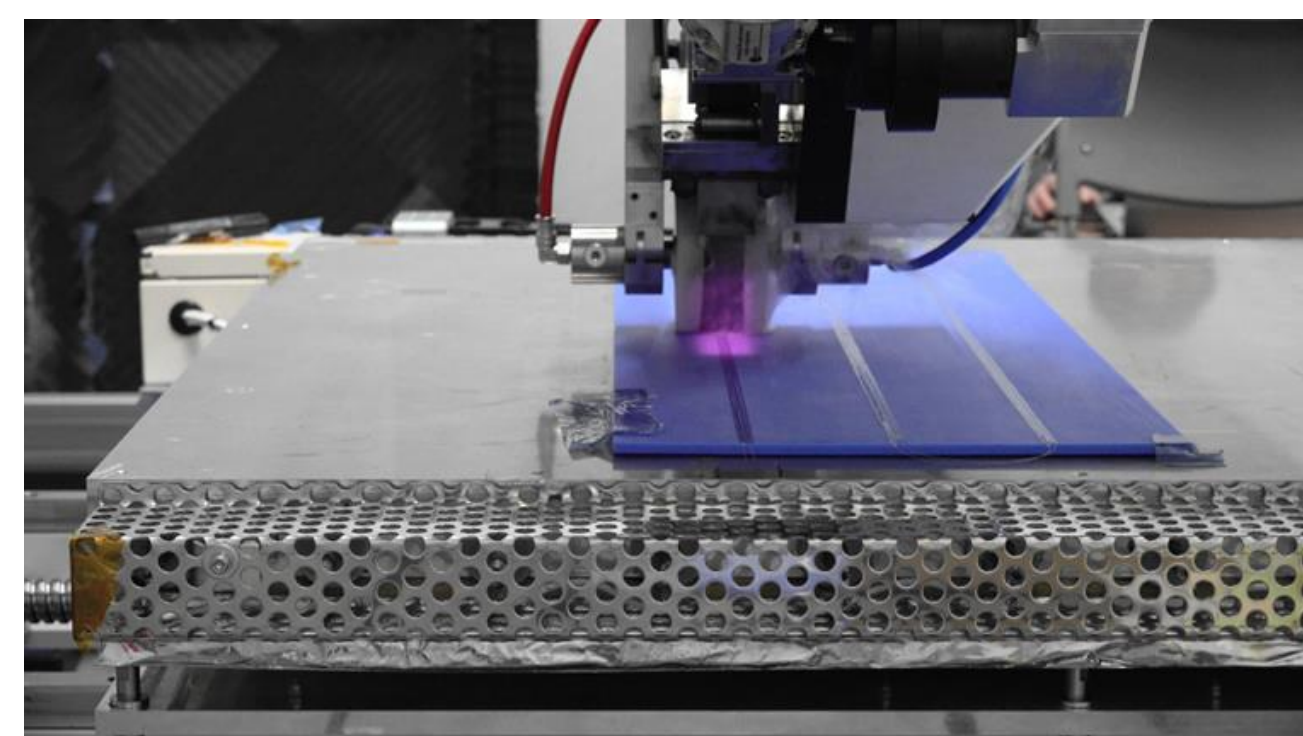
容器破裂圧力予測への展開



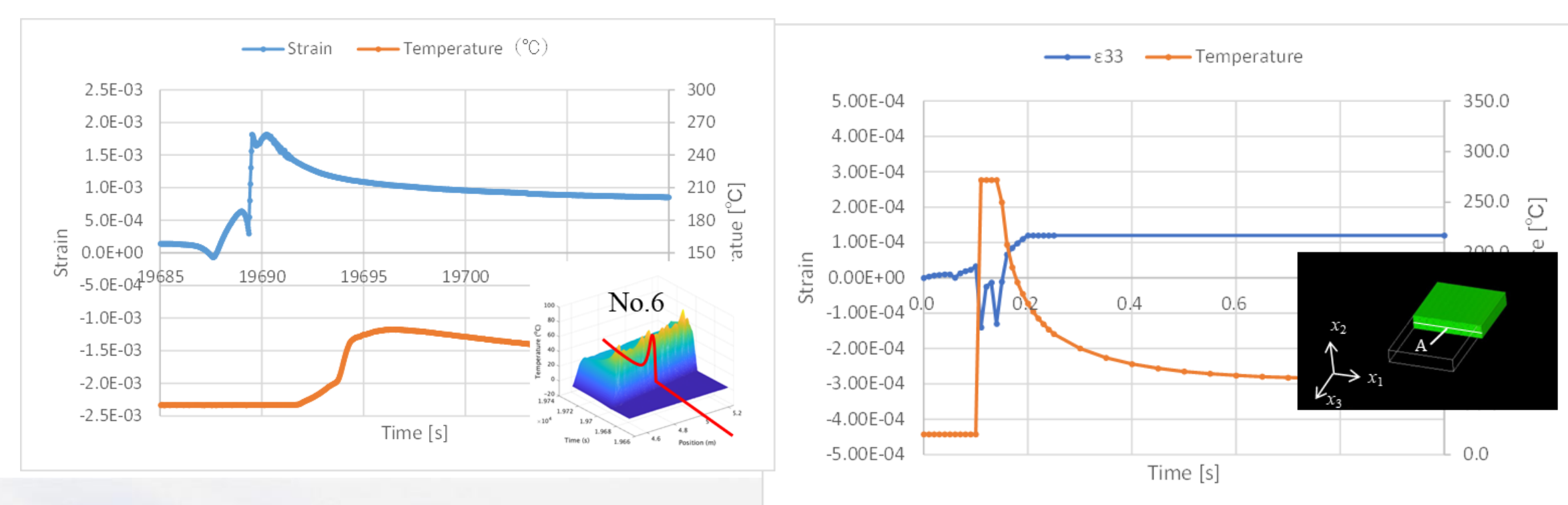
熱可塑CFRP成形マルチスケールシミュレーション

目的:樹脂特性の直接的導入による成形プロセス最適化

Automated Tape Placement成形

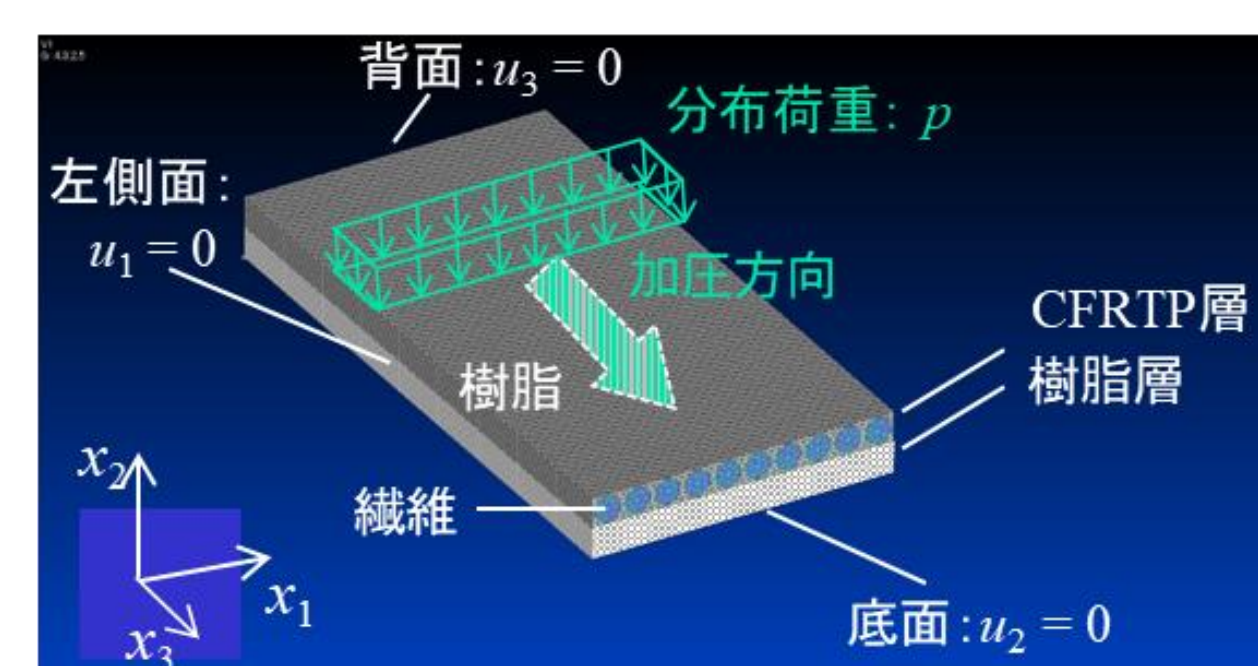
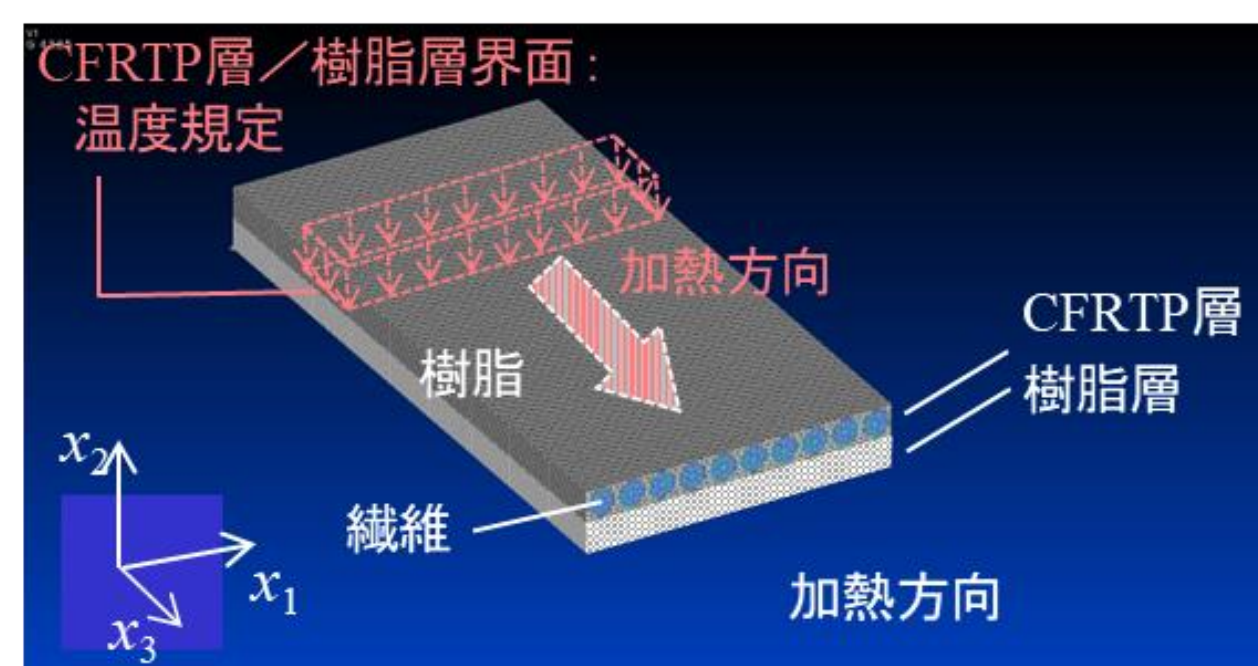


光ファイバによる温度・ひずみ同時測定

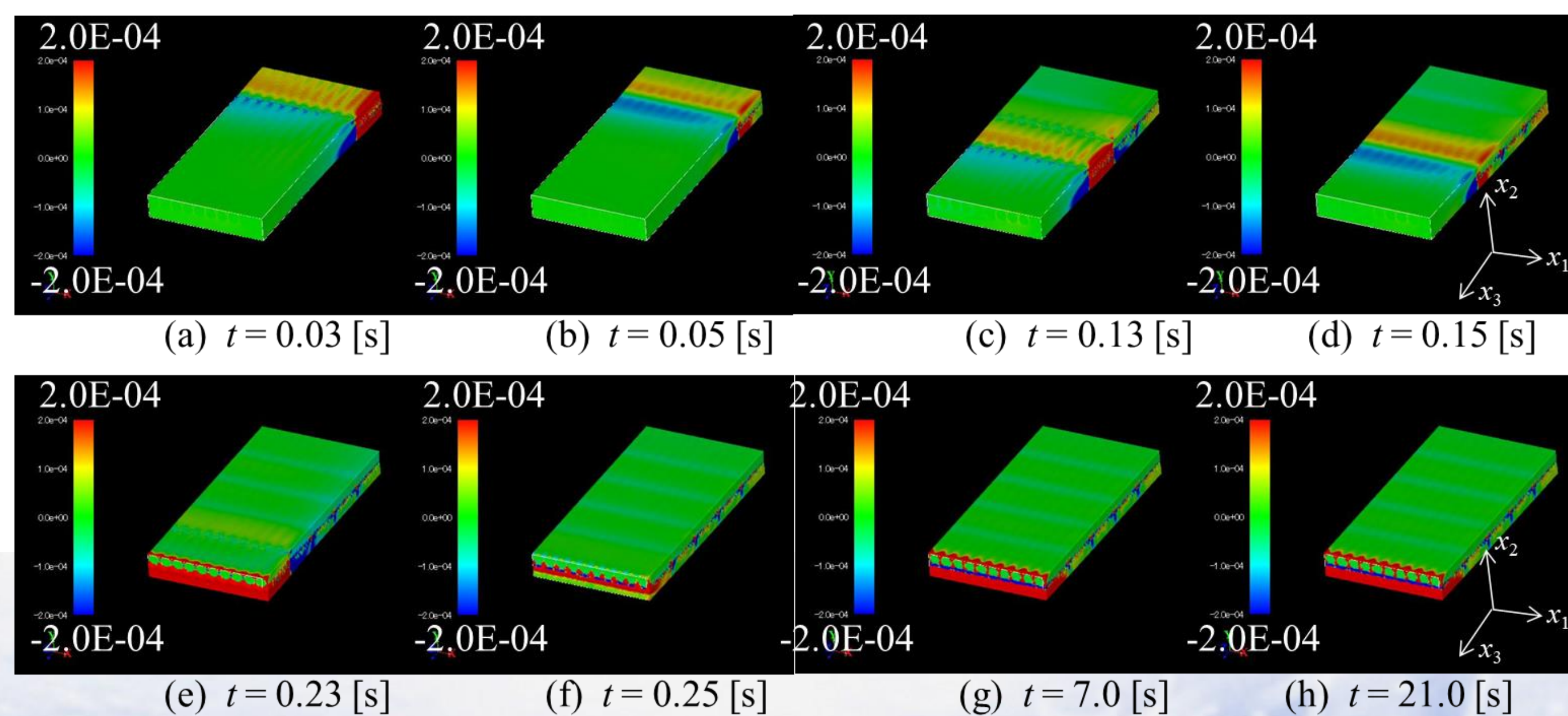


成形シミュレーションのValidation

成形シミュレーション



成形シミュレーションモデル

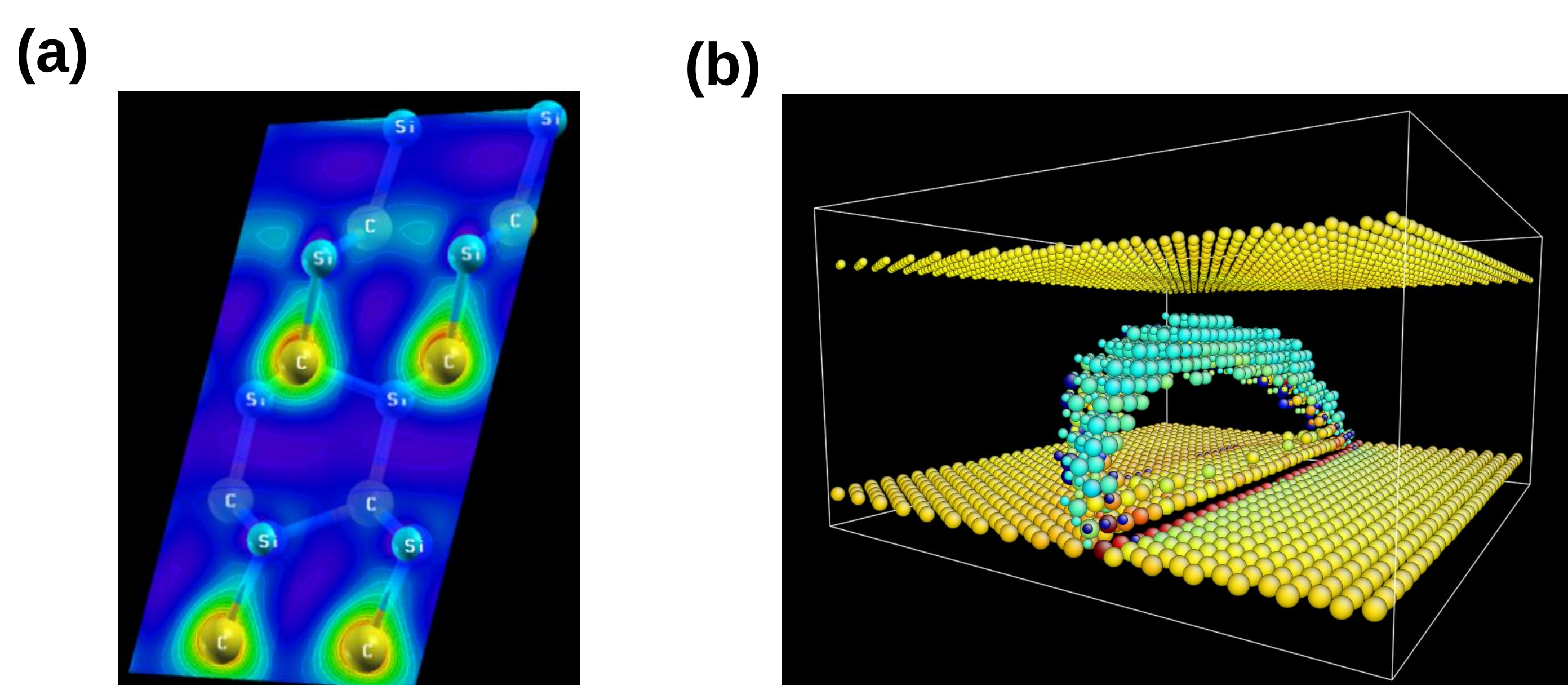


ひずみ分布

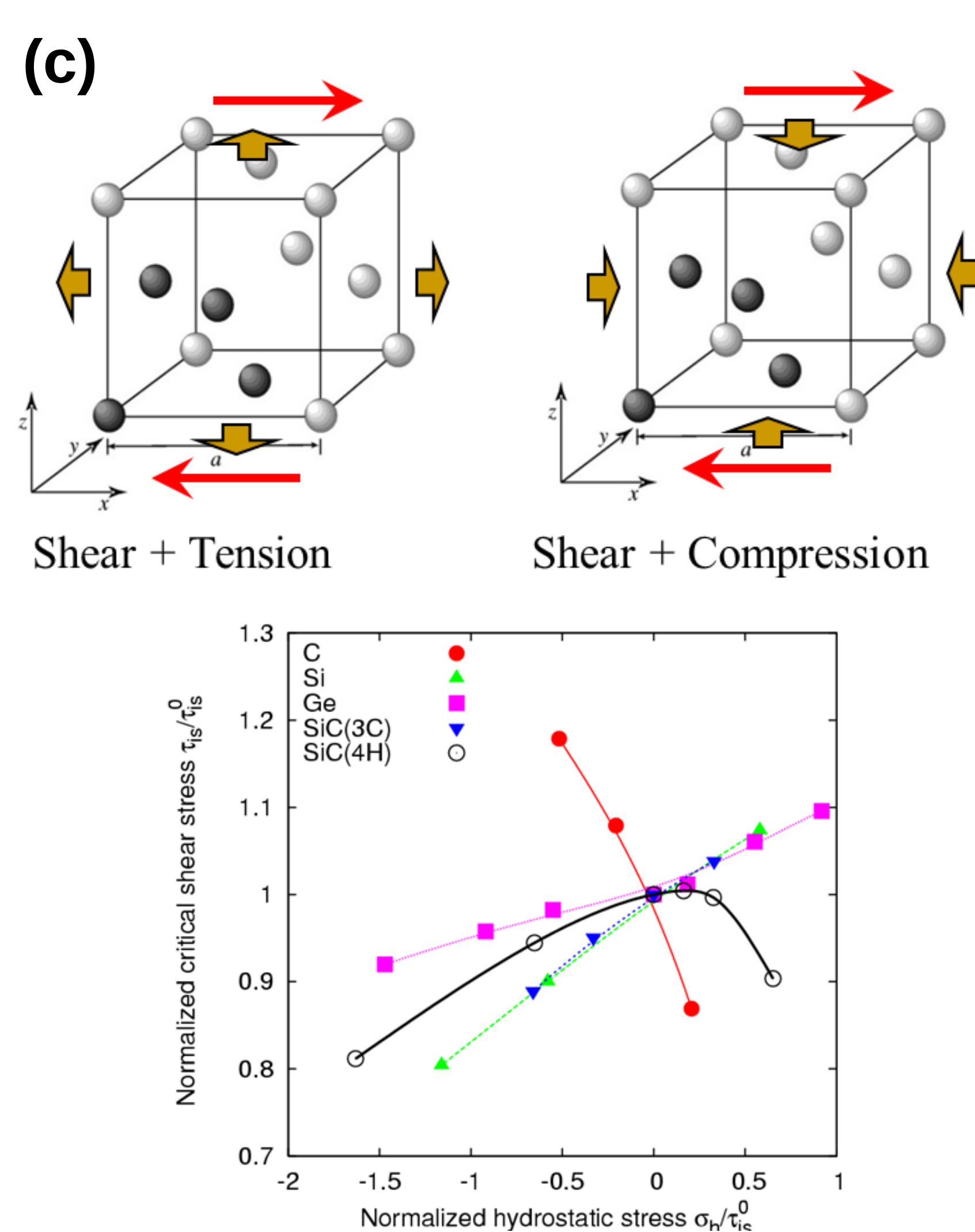
ナノ・マイクロ域の機械物理とマルチスケール解析

- 電子・原子・分子モデルシミュレーションによるナノ・マイクロスケールの強度および物性解析
- 粗視化粒子モデルおよび有限要素法シミュレーションによるポリマー材料の破壊メカニズム解明
- 深層学習を用いたマルチスケールモデリングと疲労メカニズムの解明

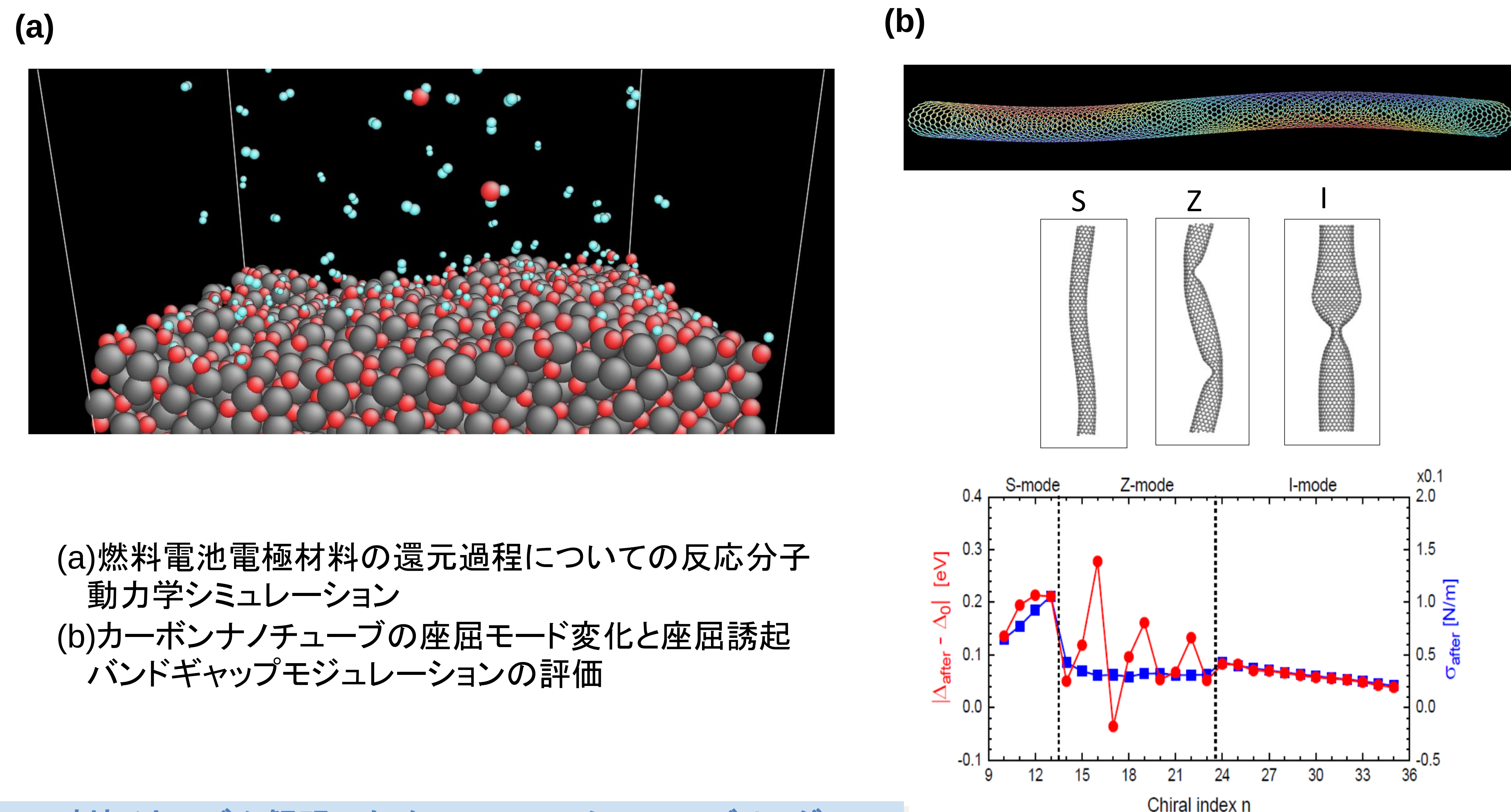
固体結晶の変形・破壊の原子レベル解析



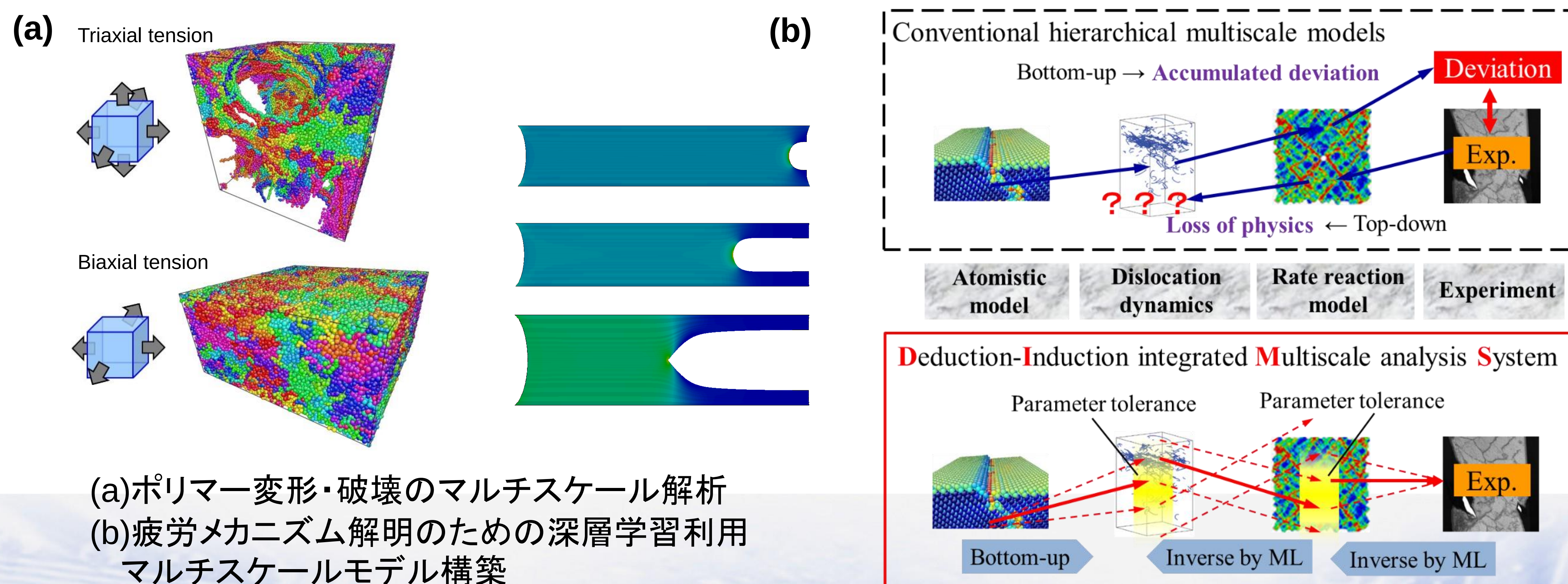
- (a) 3C-SiCのせん断理想強度解析
(b) ナノ薄膜変形と破壊の分子動力学解析
(c) 静水圧+せん断複合応力下の理想強度解析



機械と物理のインタープレイ: ナノ・マルチフィジックスの解明



破壊メカニズム解明のためのマルチスケールモデリング

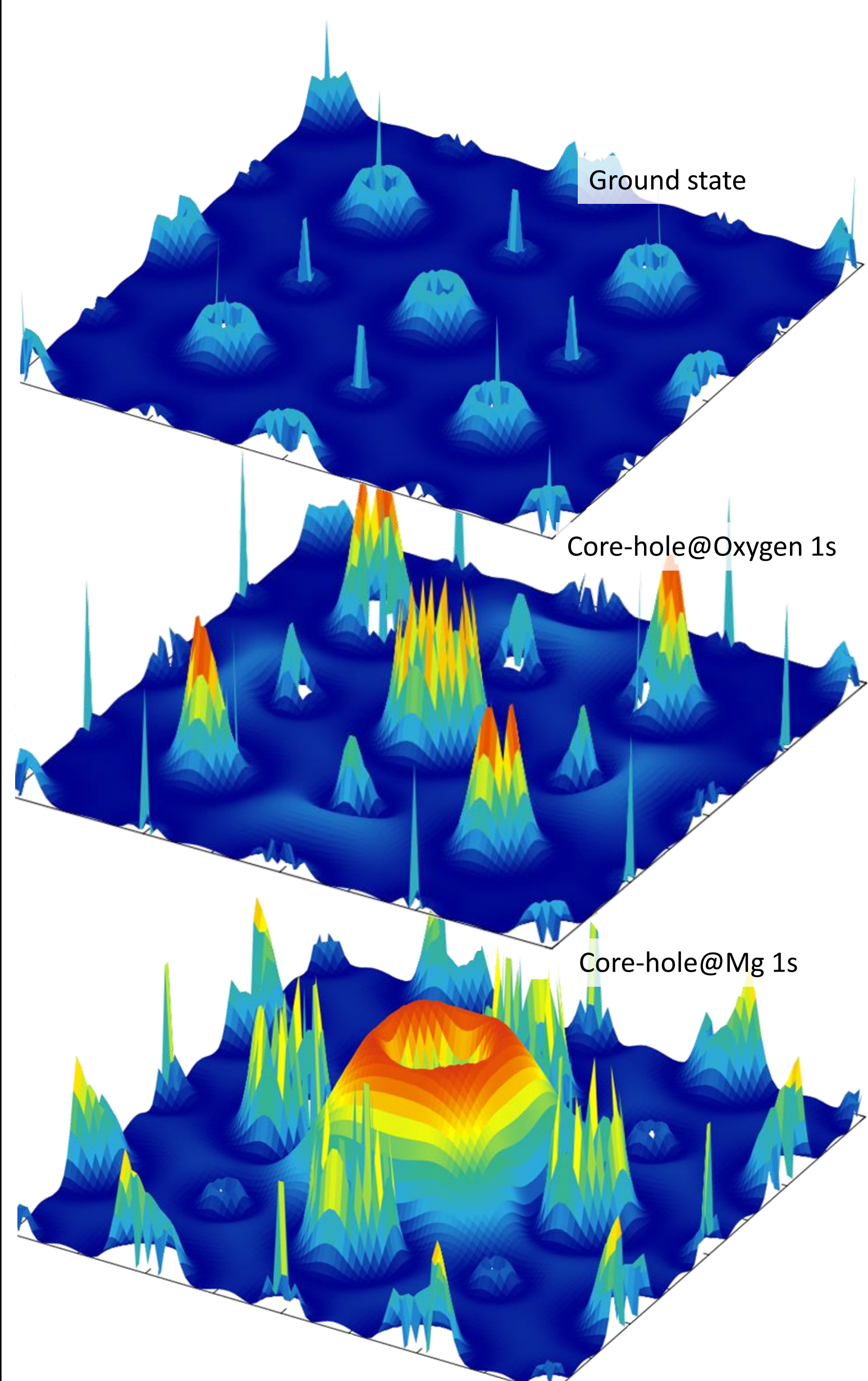


原子と電子の役割を知る

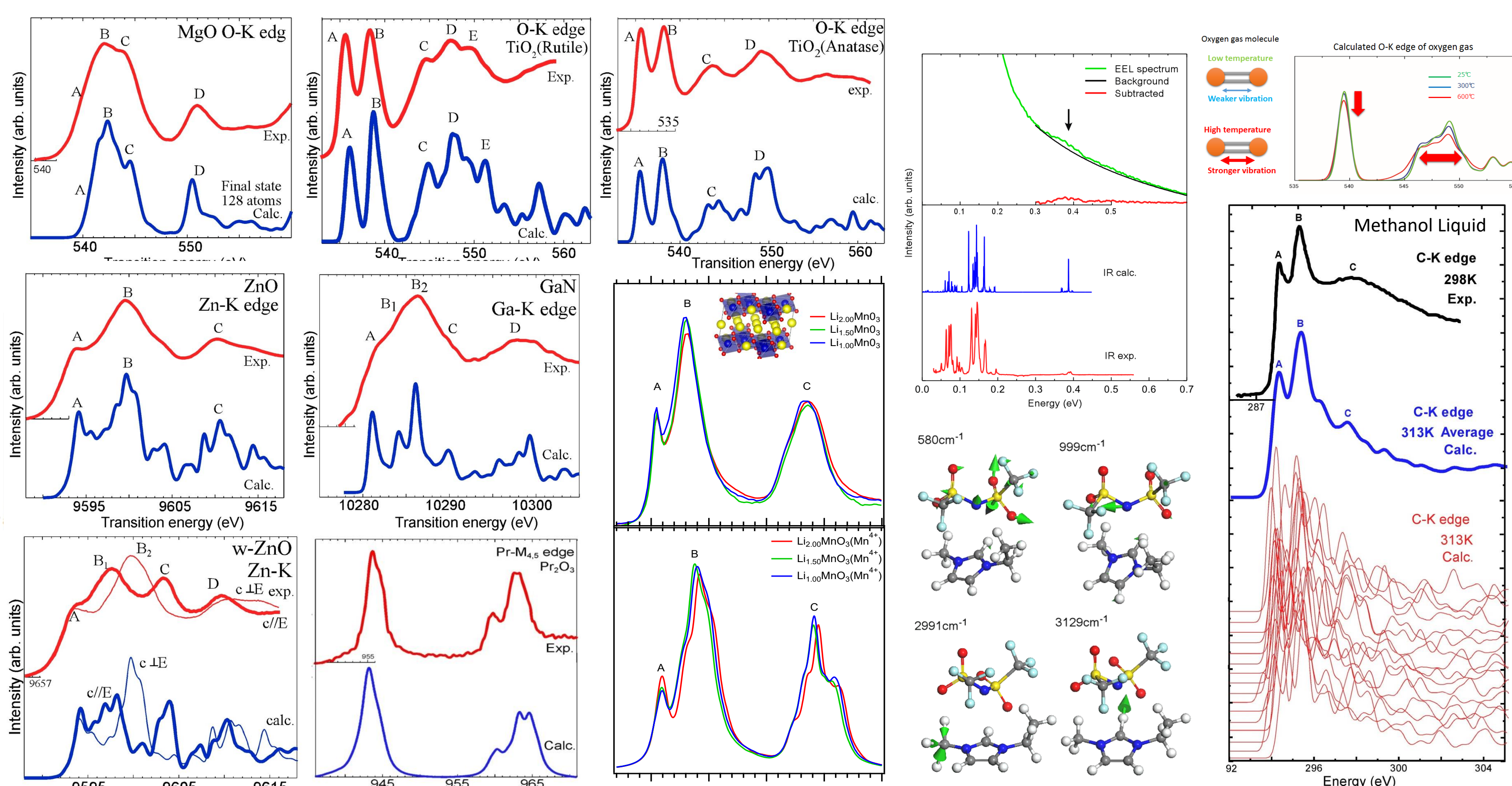
- 一粒子・二粒子・多粒子計算法による内殻電子励起スペクトル(ELNES/XANES)の精密シミュレーション
- 機械学習を用いたデータ駆動型界面構造探索

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

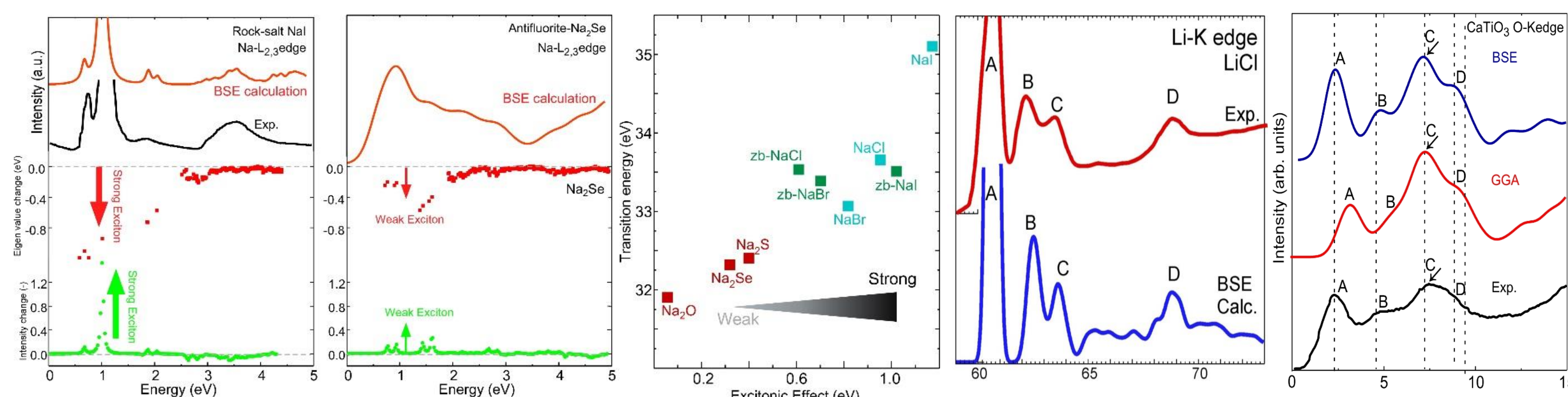
内殻空孔状態の電子構造



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

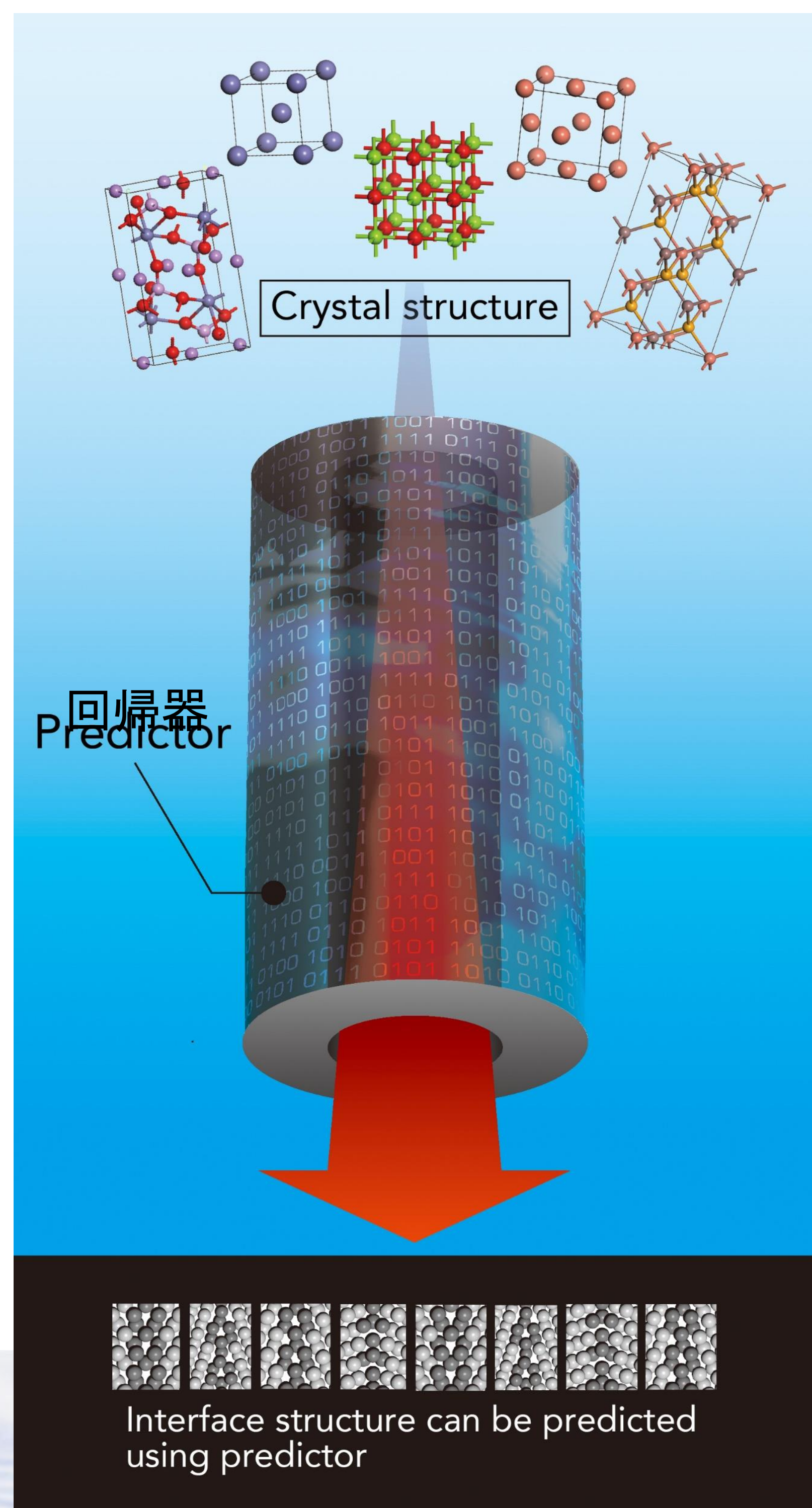


ELNESおよびXANESは内殻電子励起スペクトルであり, 物質科学の分野で広く利用されている分析手法です。一方でスペクトルを理論計算することはこれまで困難でした。本研究室では一粒子・二粒子・多粒子理論に基づき, スペクトルを定量的に解釈するための手法を開発しております。我々のシミュレーション法を活用することで, 電池や触媒, 磁性材料や光学材料の解析精度が格段に向上します。

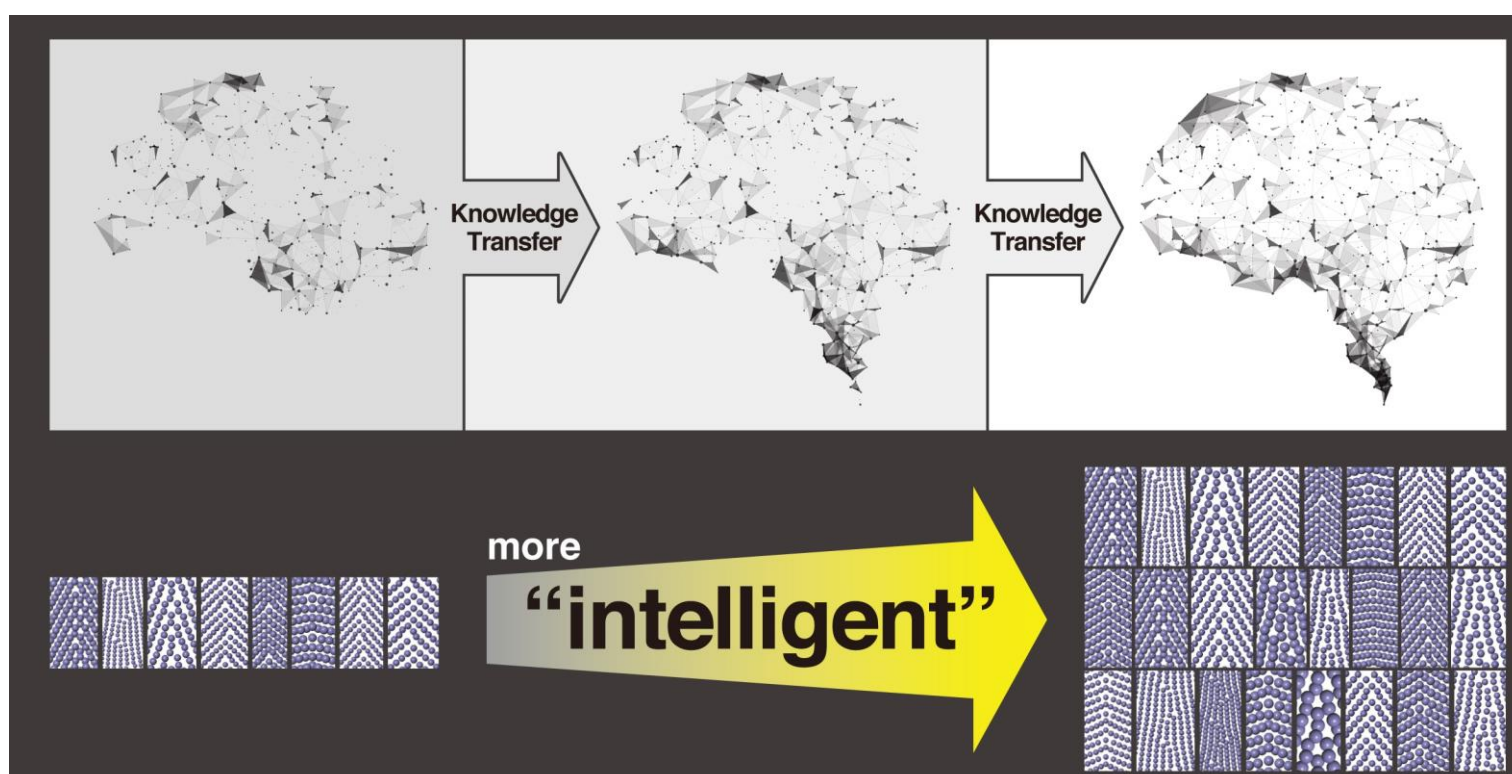
機械学習を用いたデータ駆動型界面構造探索とスペクトル解析

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

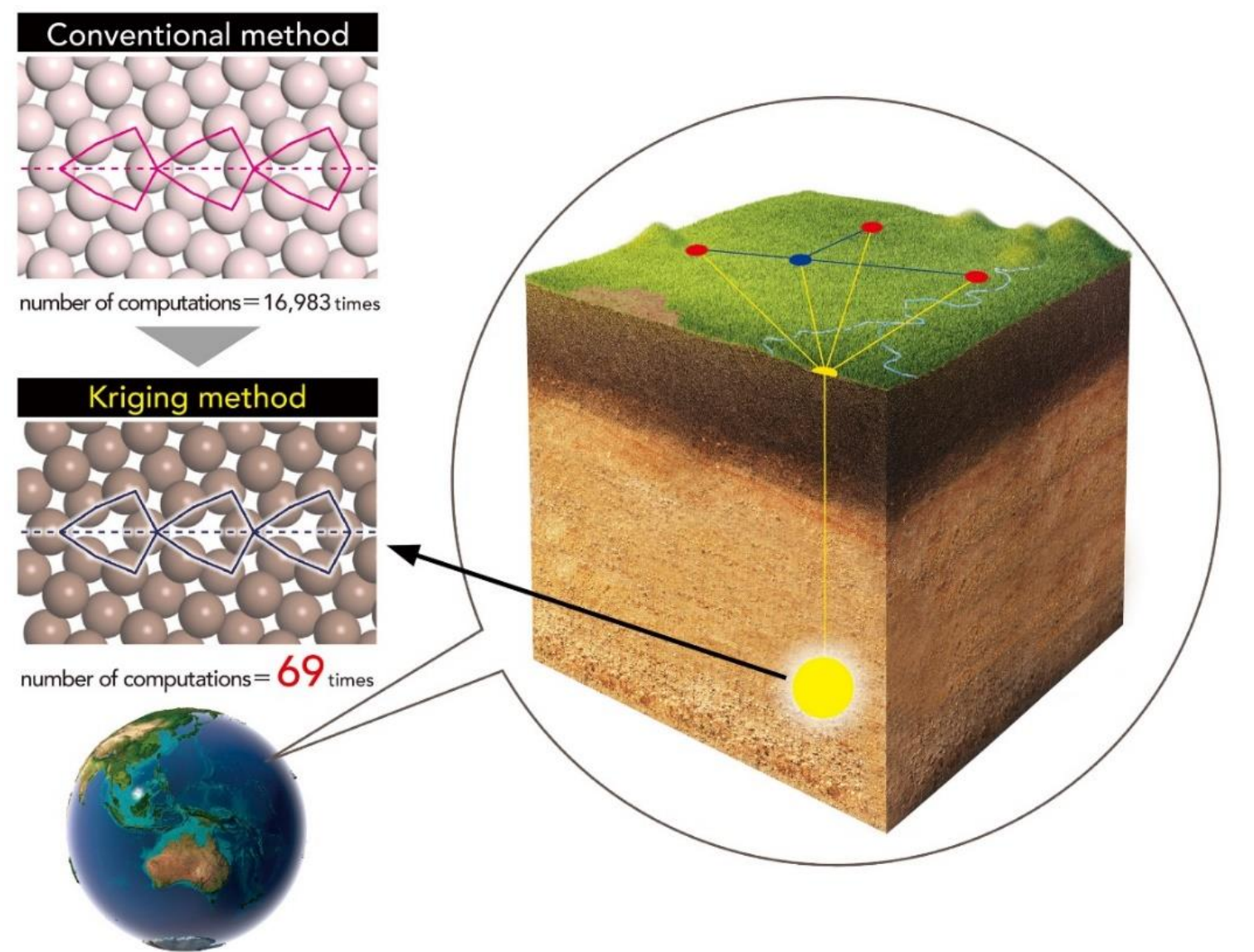
人工知能技術を活用することで
界面構造を決定するスピードを高速化



転移学習により人工知能が過去の経験を学習

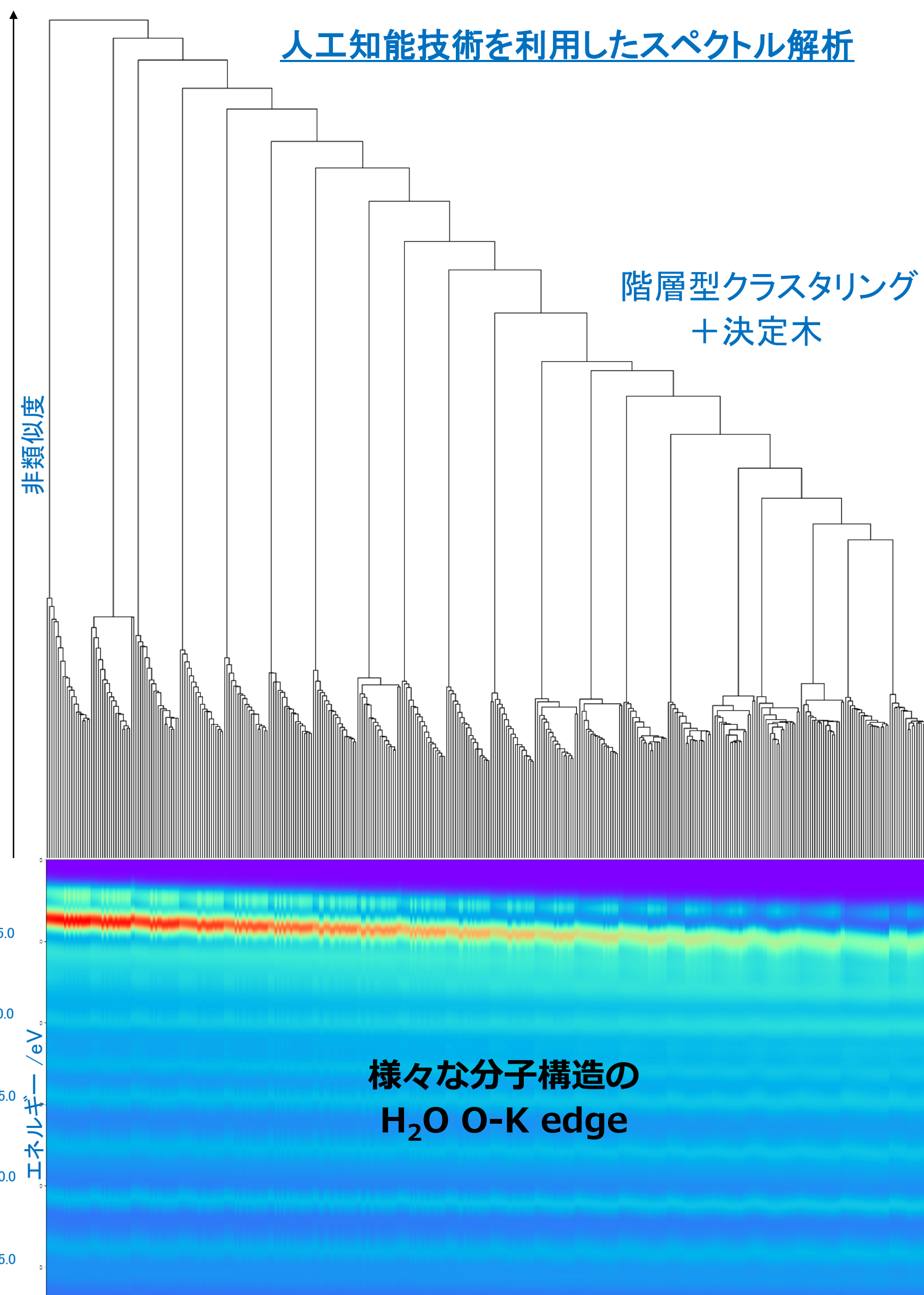


資源探索分野における人工知能技術を利用することで
界面構造を高速かつ高精度に決定



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



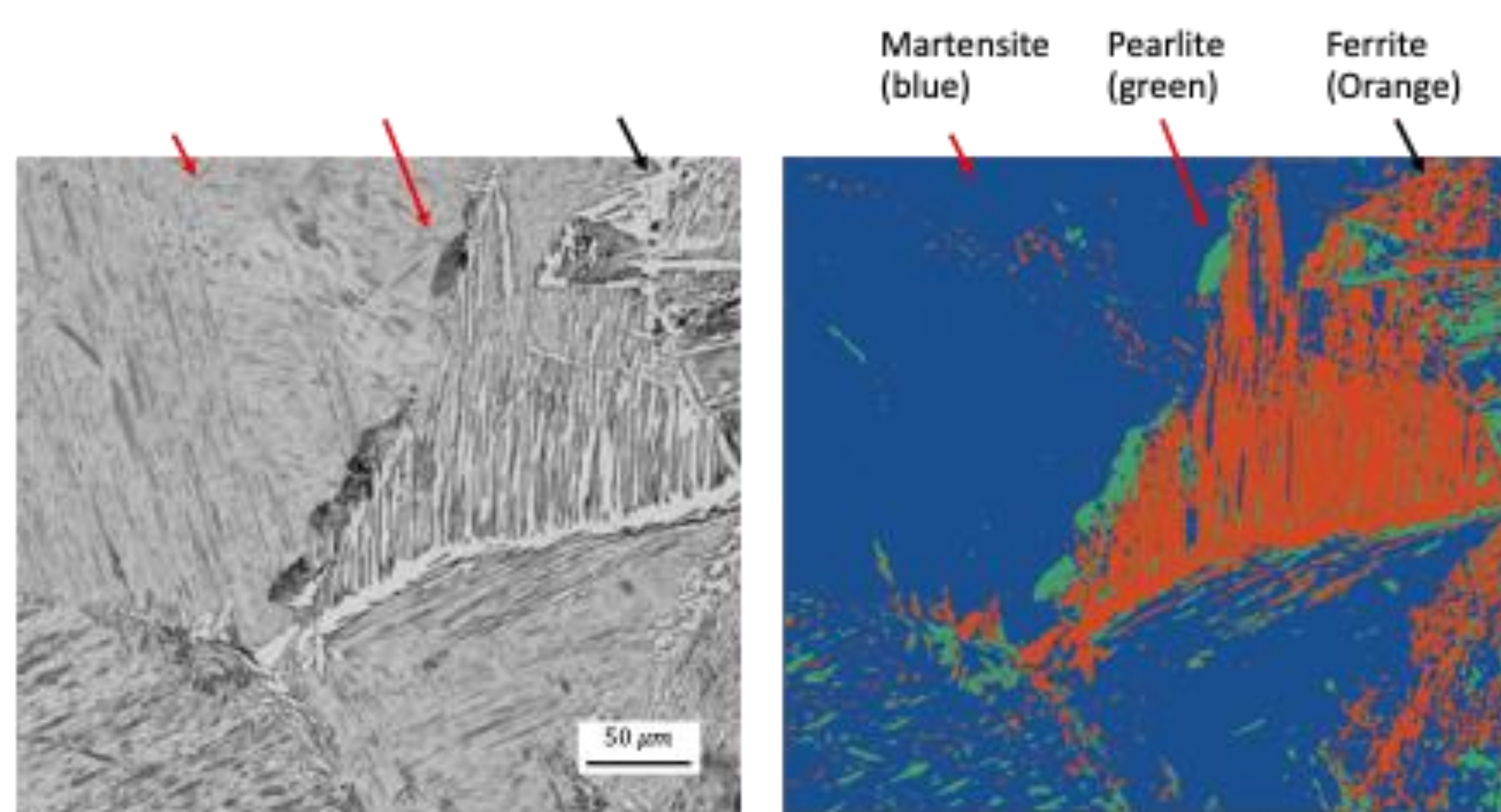
- S. Kiyohara et al., J. Phys.: Materials, 2 (2019) 024003
- H. Oda et al., J. Phys.: Materials, 2 (2019) 034005
- S. Kiyohara et al., Scientific Reports, 8 (2018) 13548
- S. Kiyohara and T. Mizoguchi, J. Chem. Phys. 148 (2018) 241741
- S. Kiyohara et al., Physica B, 532 (2018) 9.
- S. Kikuchi et al., 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.

鉄鋼材料のプロセス・組織・特性を理解する

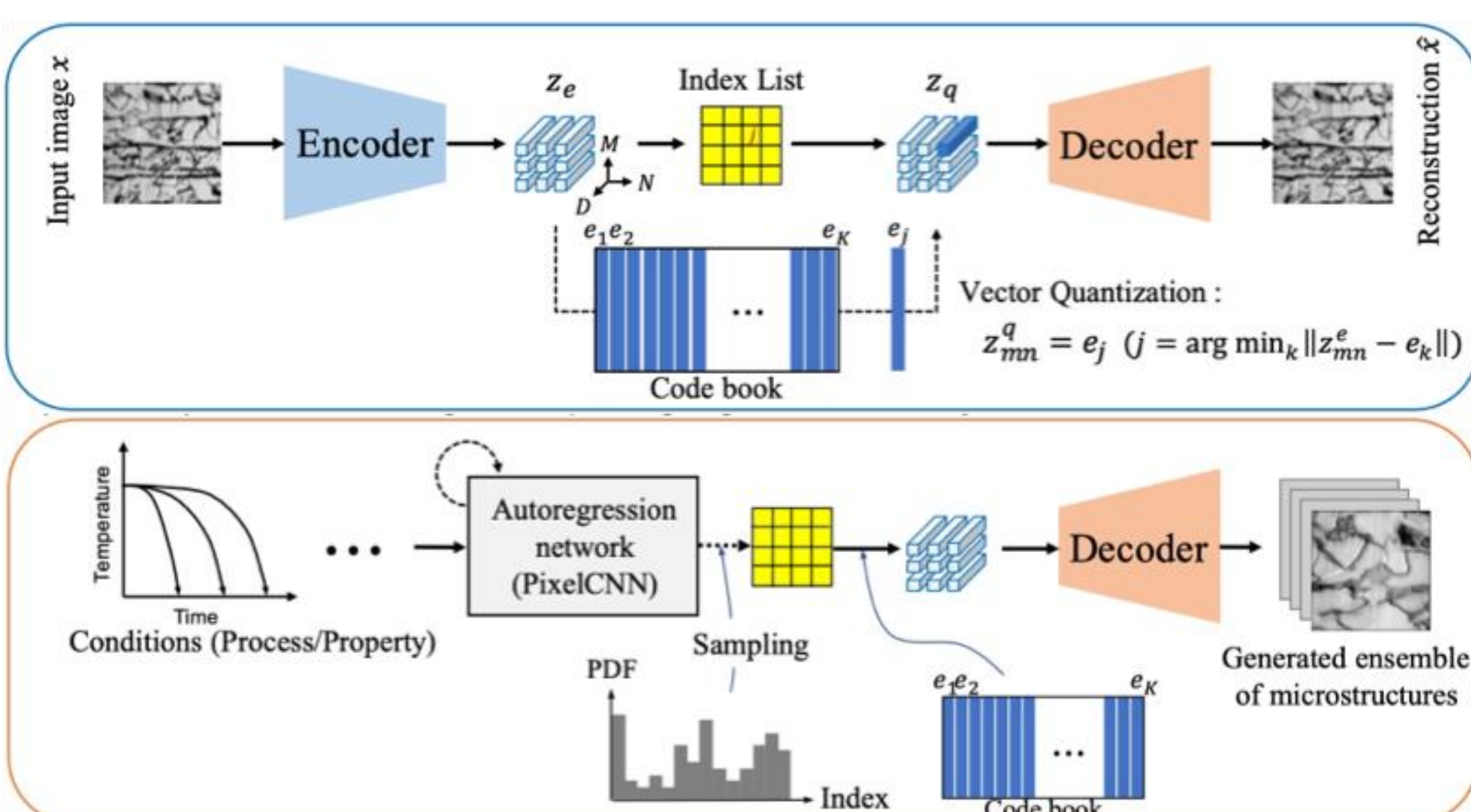
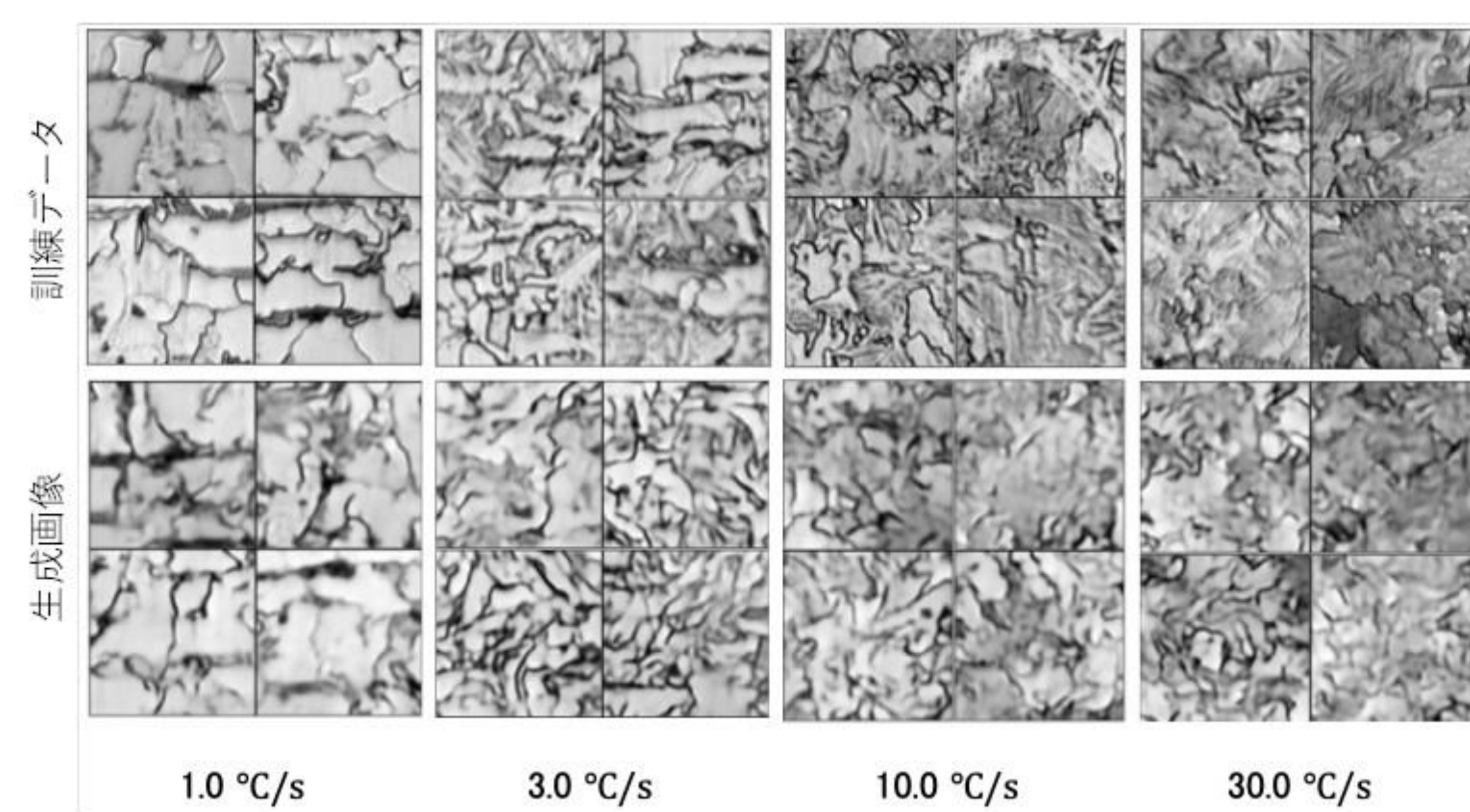
- 鉄鋼複雑組織の空間秩序を自動抽出し自動生成する深層学習モデルの開発
- PINNポテンシャルの開発と鋼の特異的な変形機構の解明
- スパースモデリングと冶金学モデルの融合

材料組織の幾何学的特徴量の自動抽出

鉄鋼の構成相を教師なしで自動認識

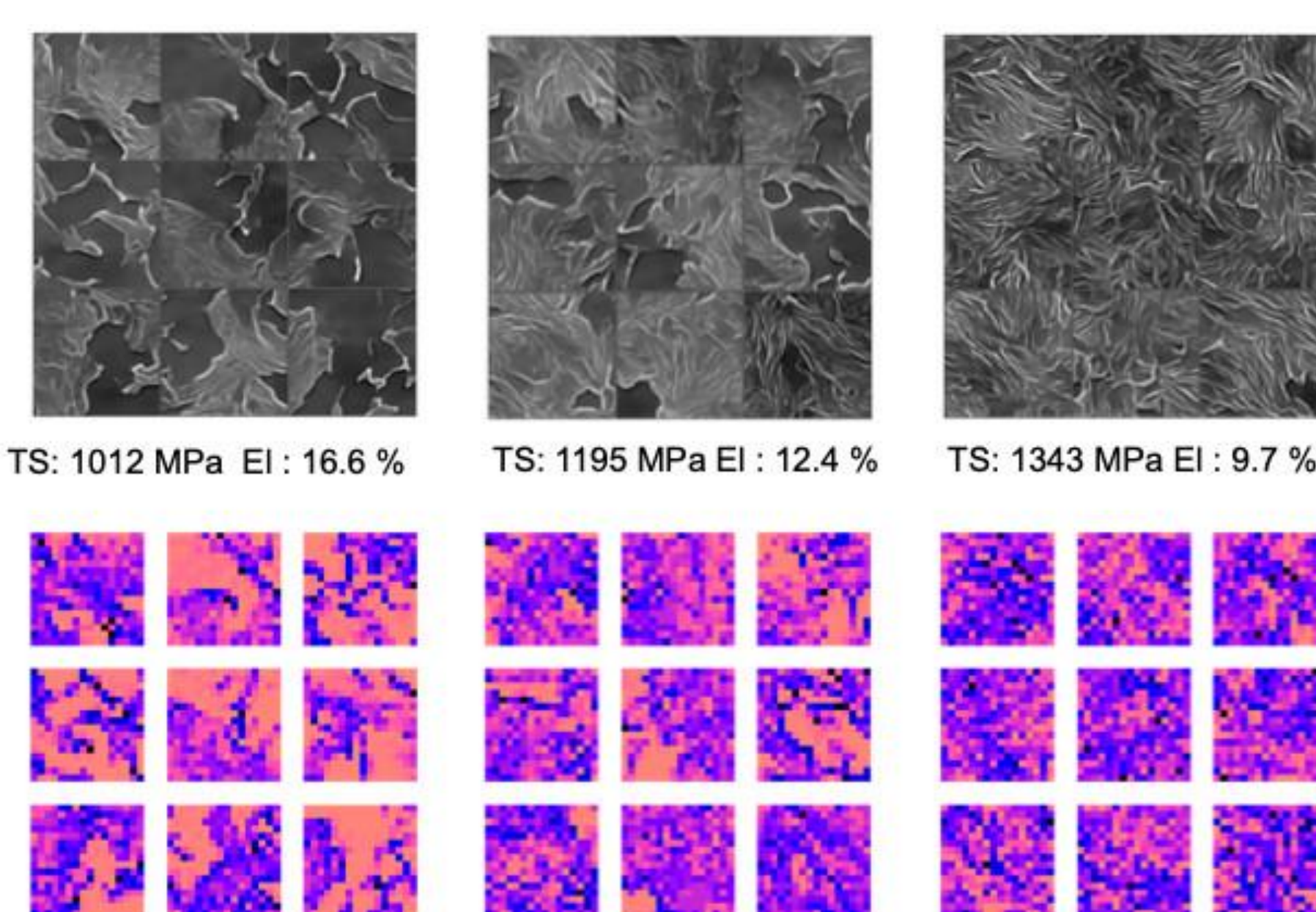


プロセス条件に対応した鉄鋼組織を自動生成



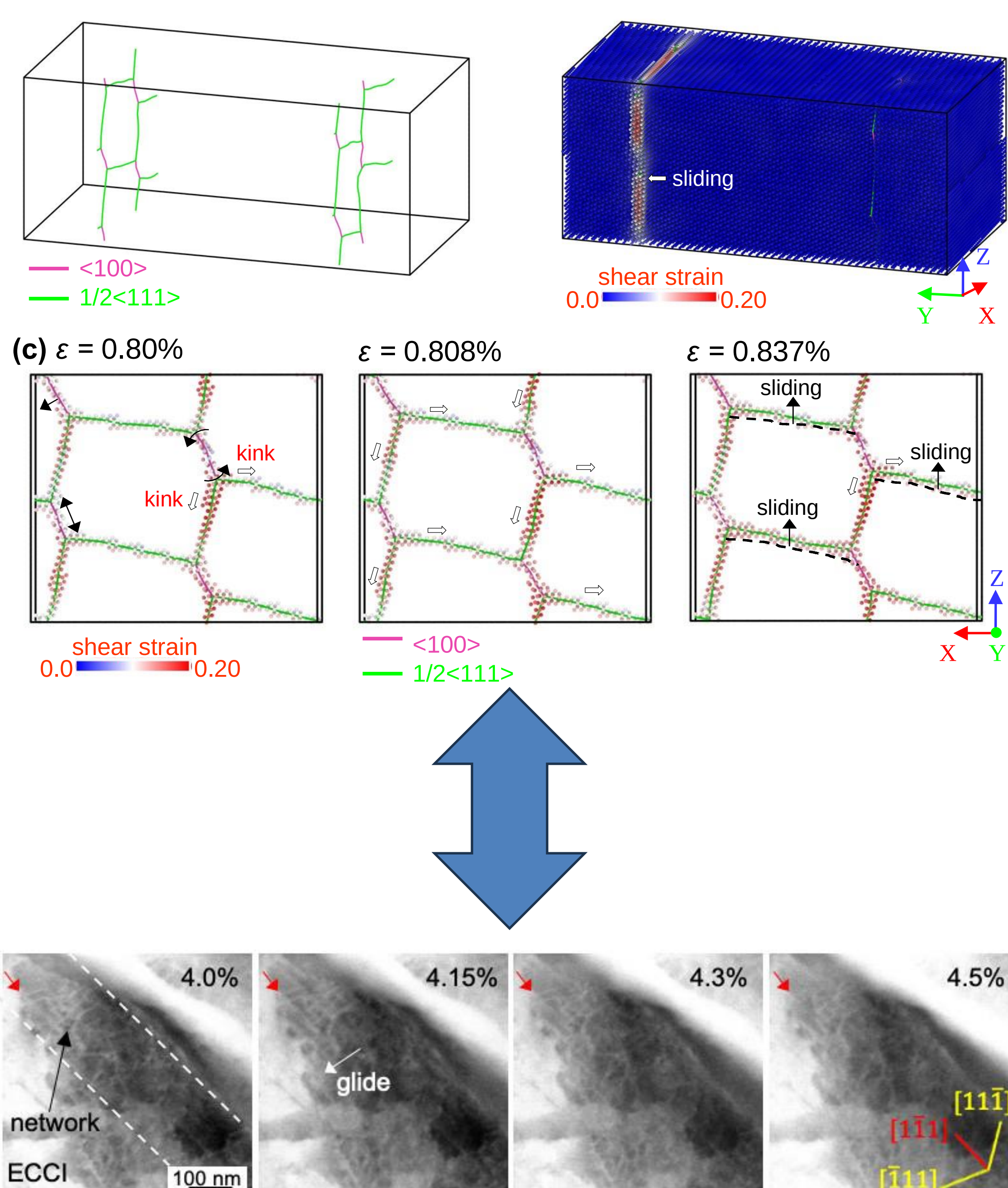
鉄鋼屋の思考過程を模した深層学習モデル

力学特性を満たす鉄鋼組織像を自動生成



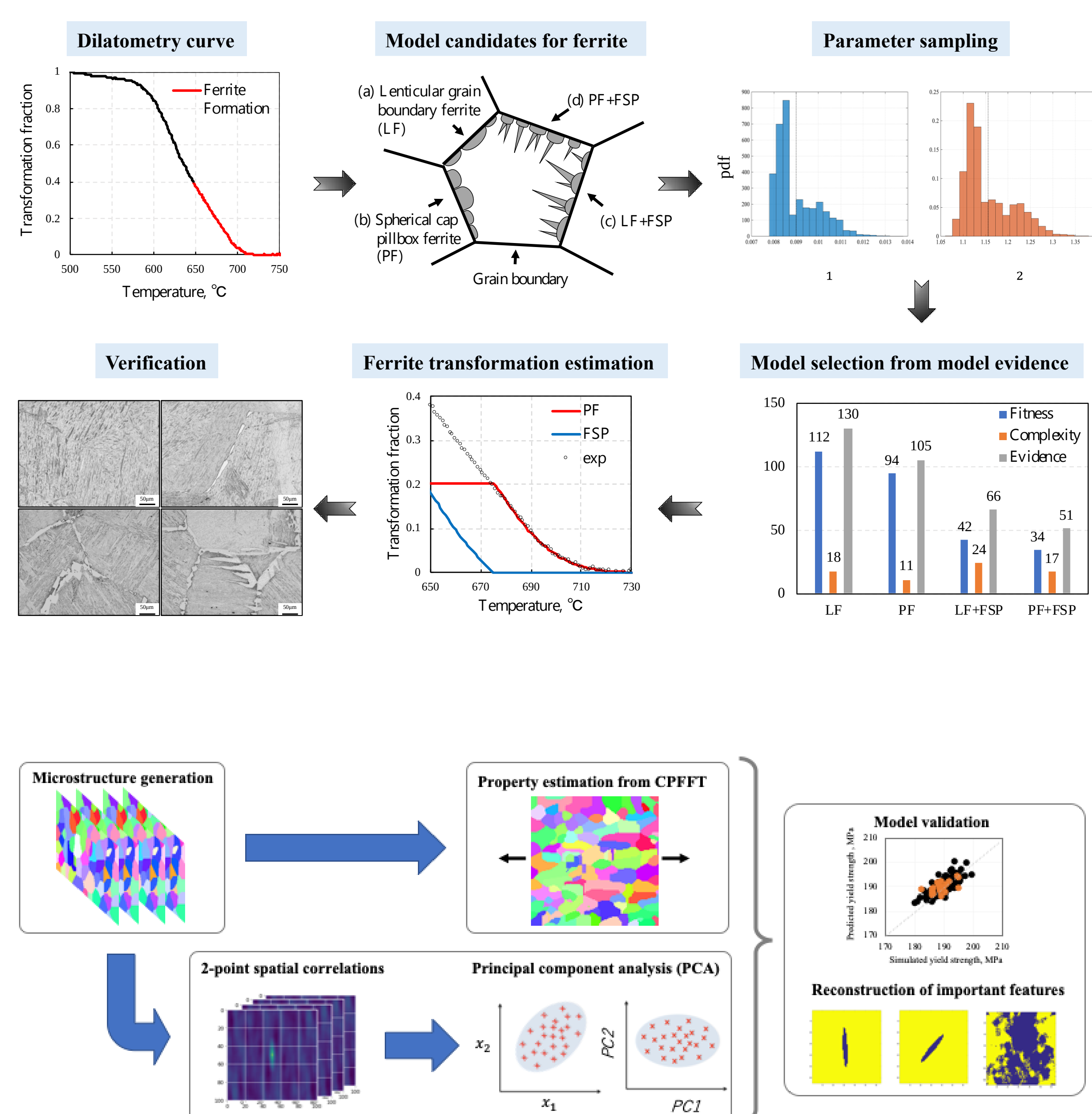
計算材料科学とデータ駆動科学の融合

PINNポテンシャルによる界面すべり現象の再現



ECCI法による転位のその場観察

RCMCMC法による変態挙動の支配的因子の抽出



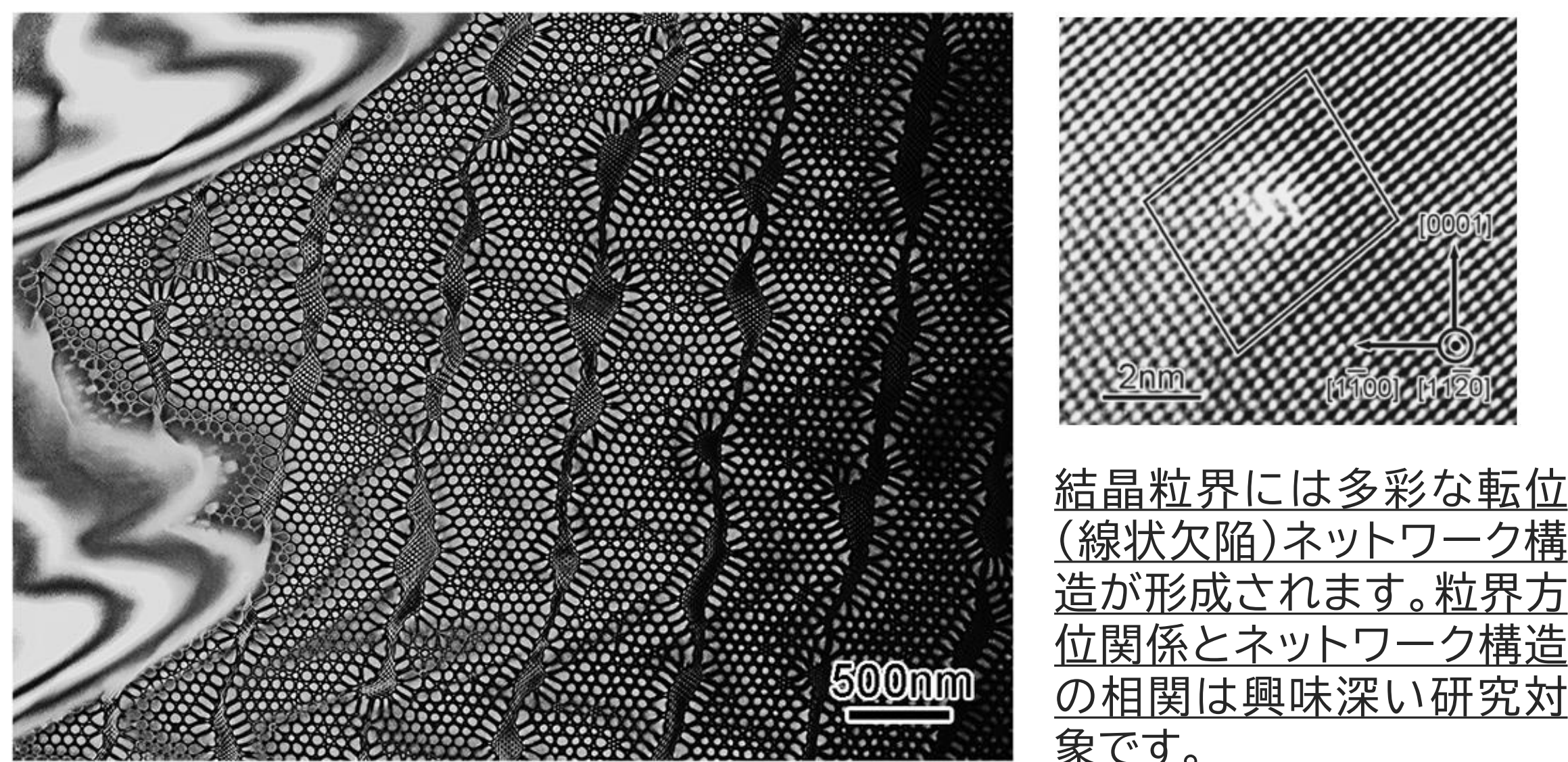
結晶塑性有限要素法とスパース学習によるDP鋼の力学特性の組織因子の抽出

結晶格子欠陥の構造解析による材料物性の理解

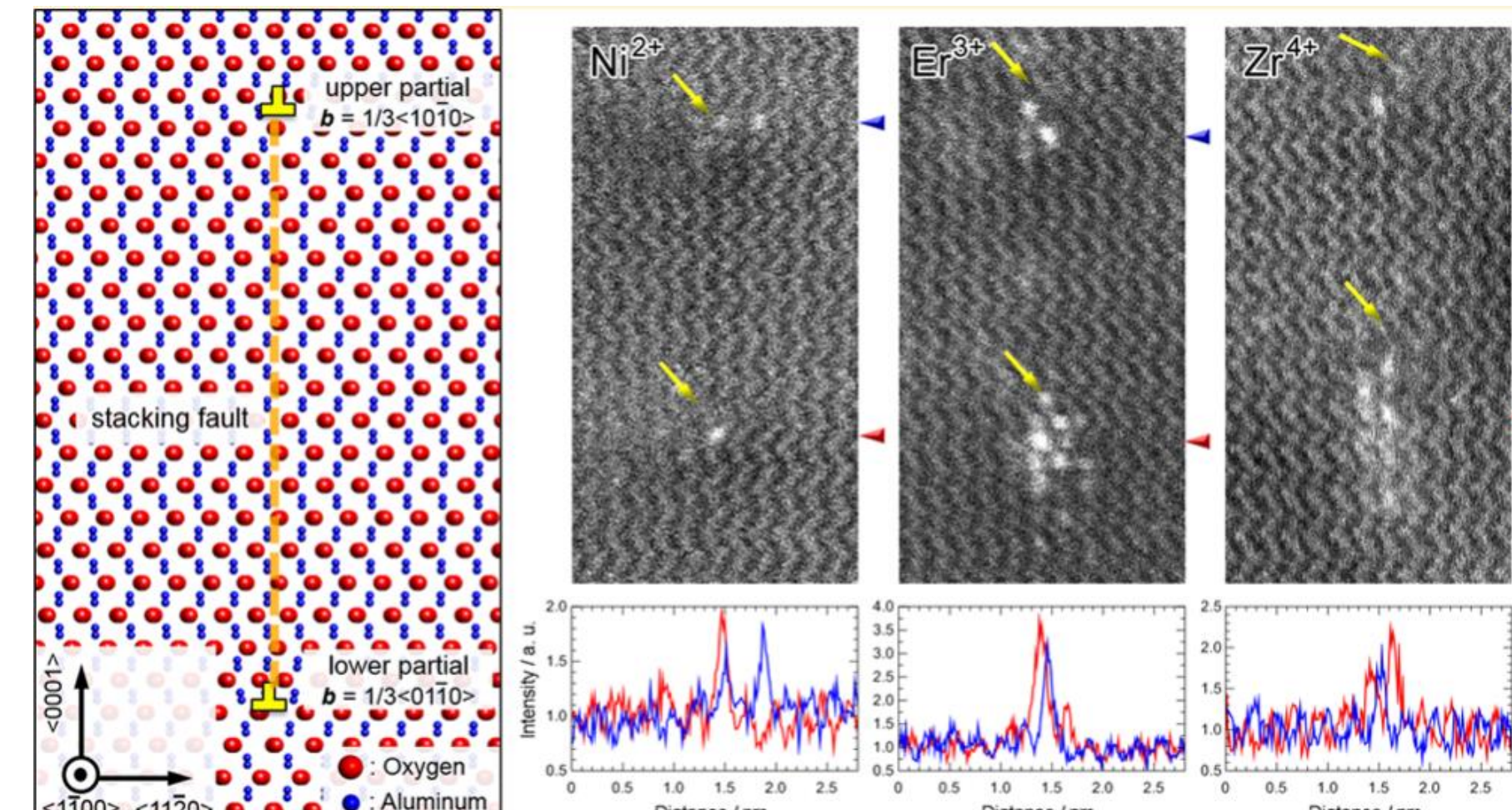
- 透過型電子顕微鏡観察による結晶格子欠陥の構造解析
- その場透過型電子顕微鏡荷重負荷試験法を用いた結晶格子欠陥の動的挙動観察
- 原子分解能その場荷重負荷試験システムの開発

結晶格子欠陥の構造解析

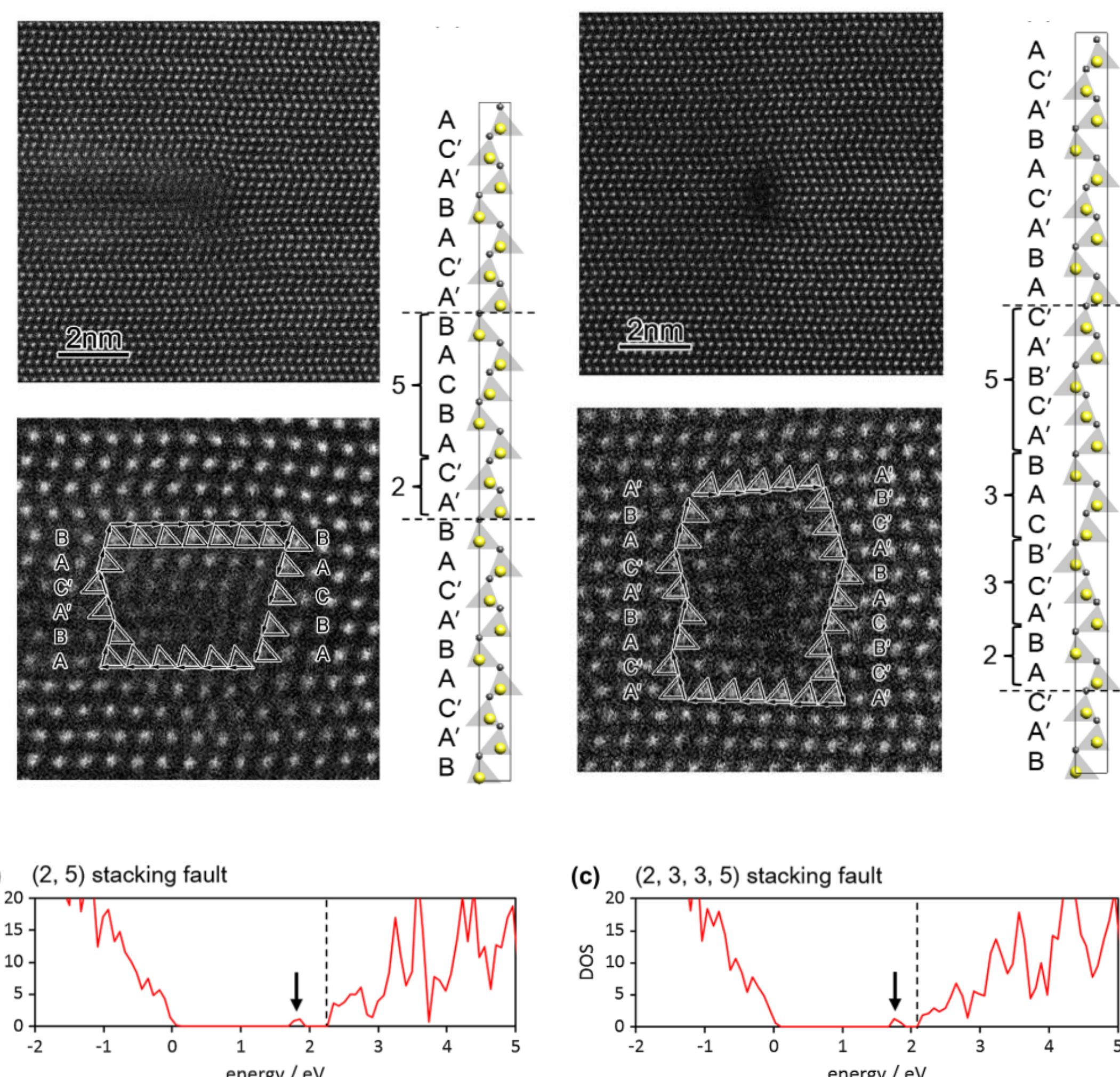
◆ α - Al_2O_3 中の転位ネットワークと転位コア構造



◆ α - Al_2O_3 中の転位コアへの異種元素偏析

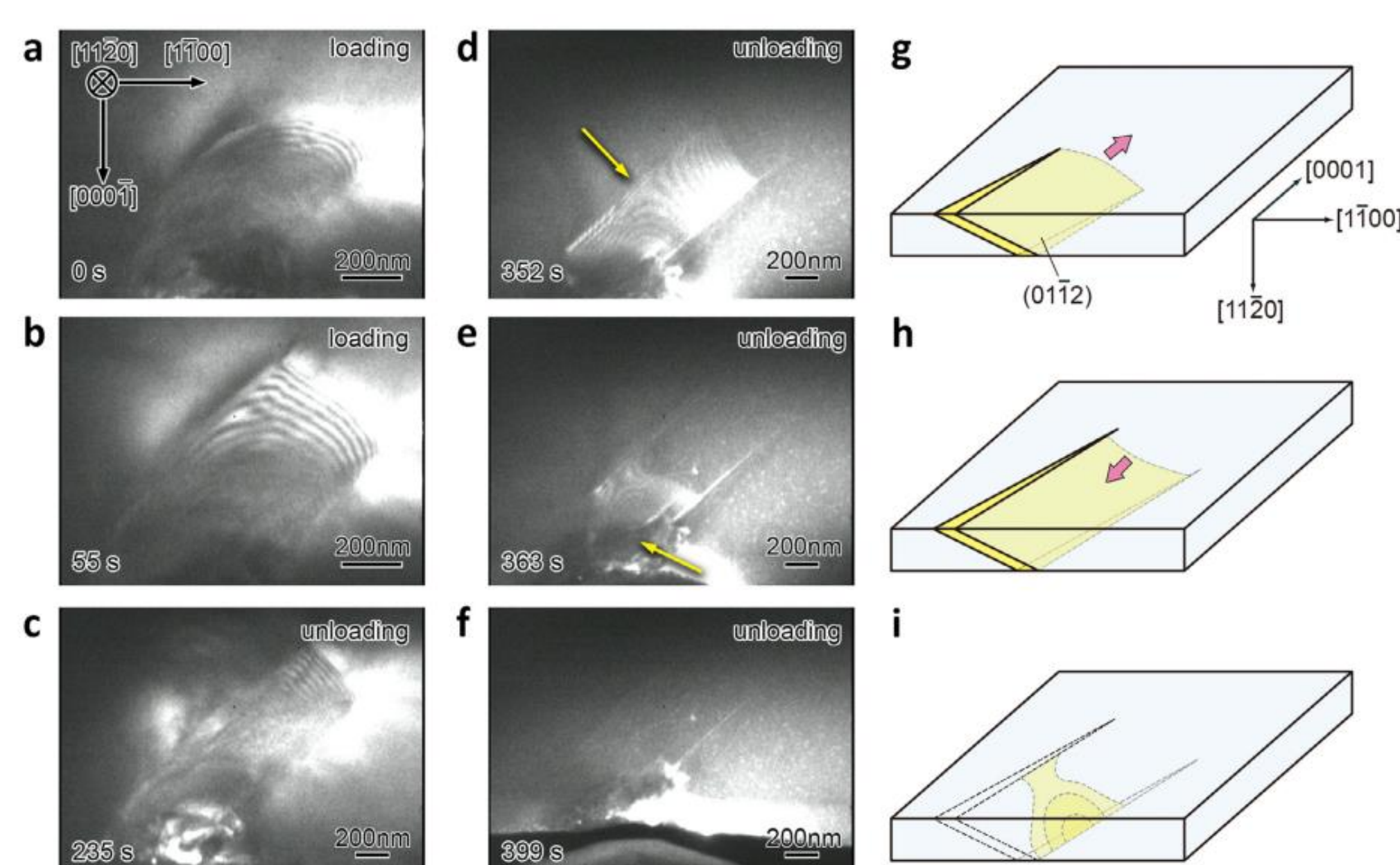


◆ 4H-SiC中の積層欠陥構造の解析

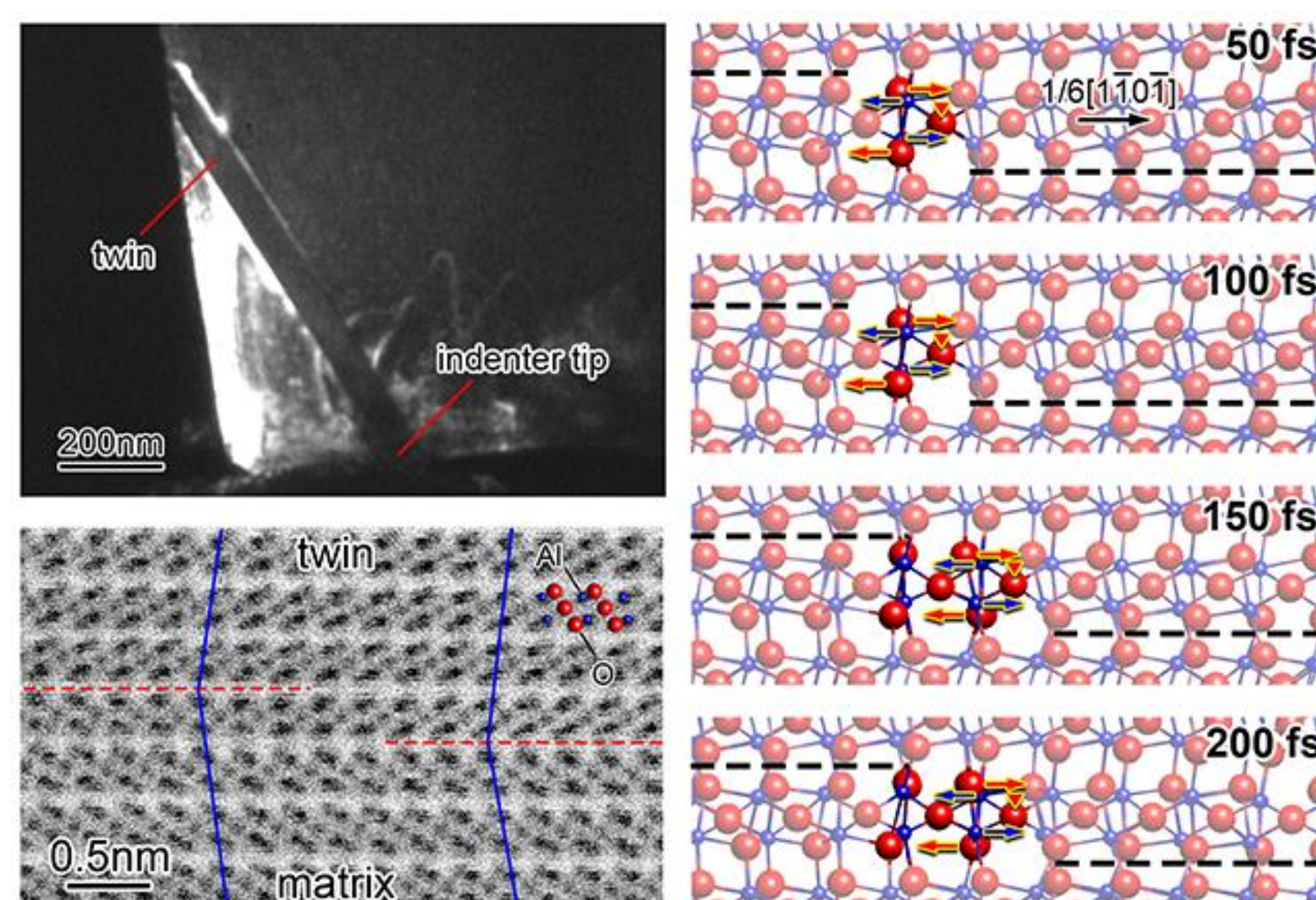


その場荷重負荷試験法を用いた格子欠陥の動的挙動観察

◆ 変形双晶の消失過程の観察

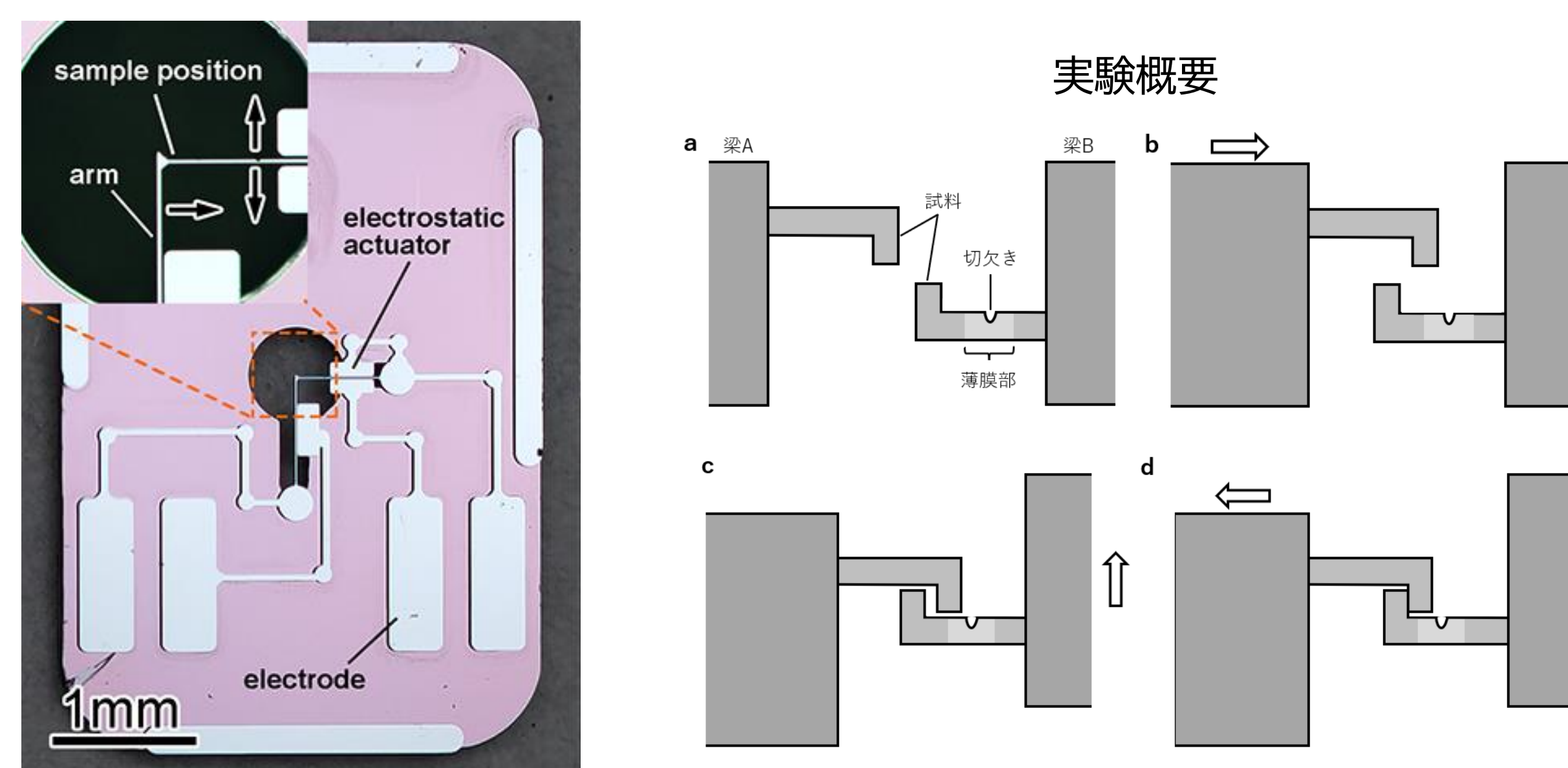


◆ 変形双晶の界面原子構造と界面移動の原子シミュレーション

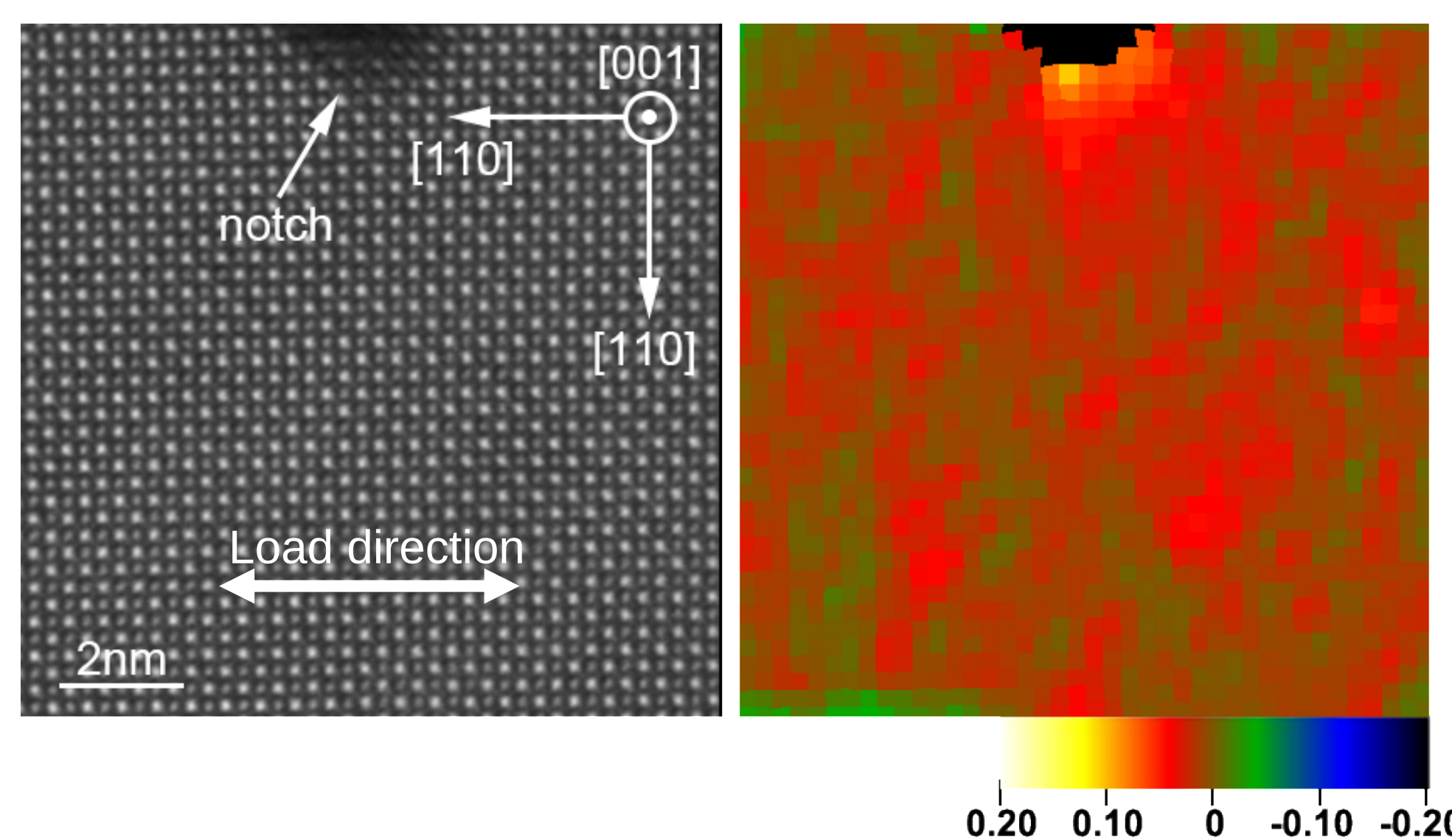


原子分解能その場荷重負荷試験システムの開発

◆ 透過型電子顕微鏡内荷重負荷試験用MEMSデバイス



◆ 荷重負荷時の原子像とひずみマップ



References

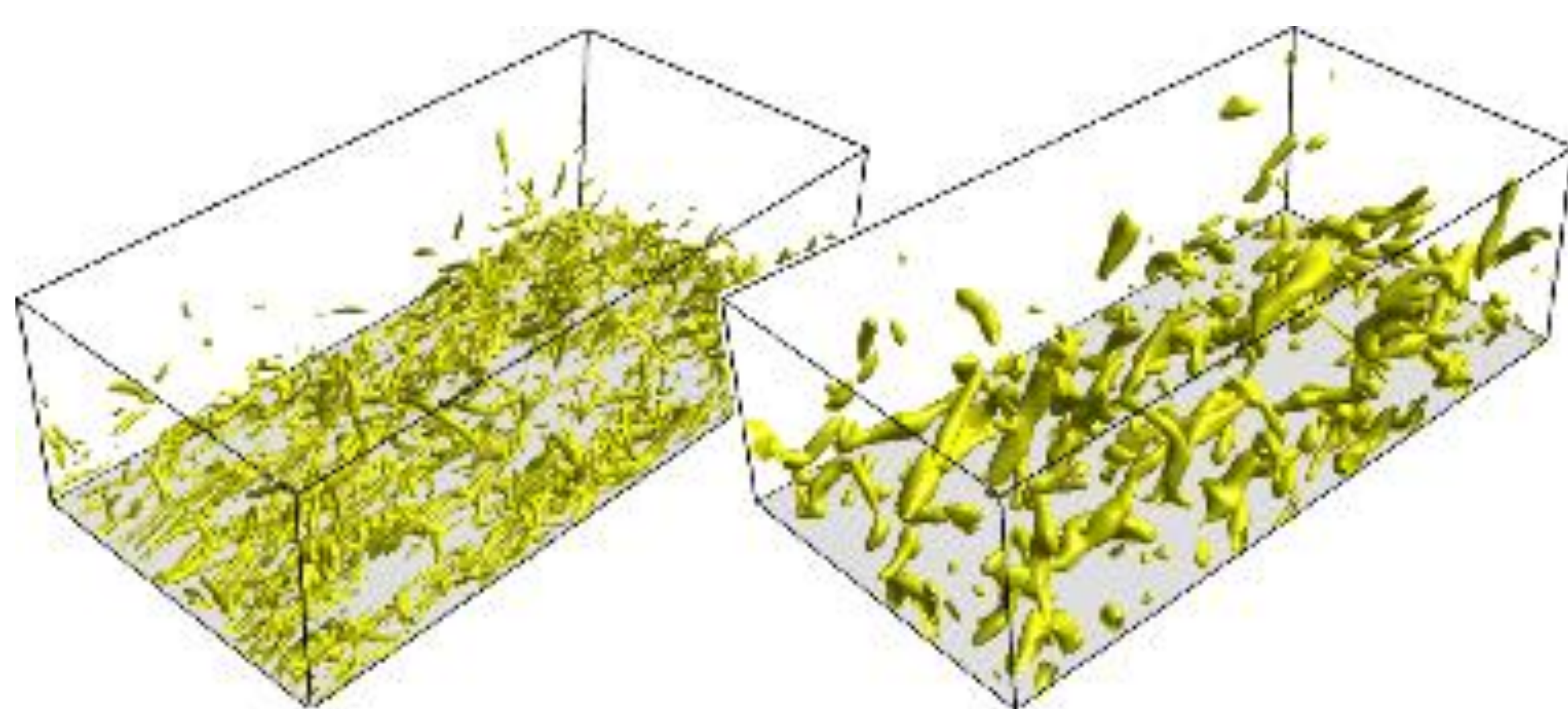
- E. Tochigi, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, Crystals **8**, 133-1-14 (2018).
- E. Tochigi, Y. Kezuka, A. Nakamura, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, Nano Lett. **17**, 2908 (2017).
- E. Tochigi, H. Matsuhata, H. Yamaguchi, T. Sekiguchi, H. Okumura, Y. Ikuhara, Philos. Mag. **97**, 657(2017).
- E. Tochigi, B. Miao, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, Acta Mater. **216**, 117137, (2021).
- T. Sato, E. Tochigi, T. Mizoguchi, Y. Ikuhara, H. Fujita, Microelectro. Eng. **164**, 43 (2016).
- E. Tochigi, T. Sato, N. Shibata, H. Fujita, Y. Ikuhara, Microsc. Microanal. **25**, S2, 770 (2019).
- E. Tochigi, T. Sato, N. Shibata, H. Fujita, Y. Ikuhara, Microsc. Microanal. **26**, S2, 1838 (2020).

乱流の物理とモデリング

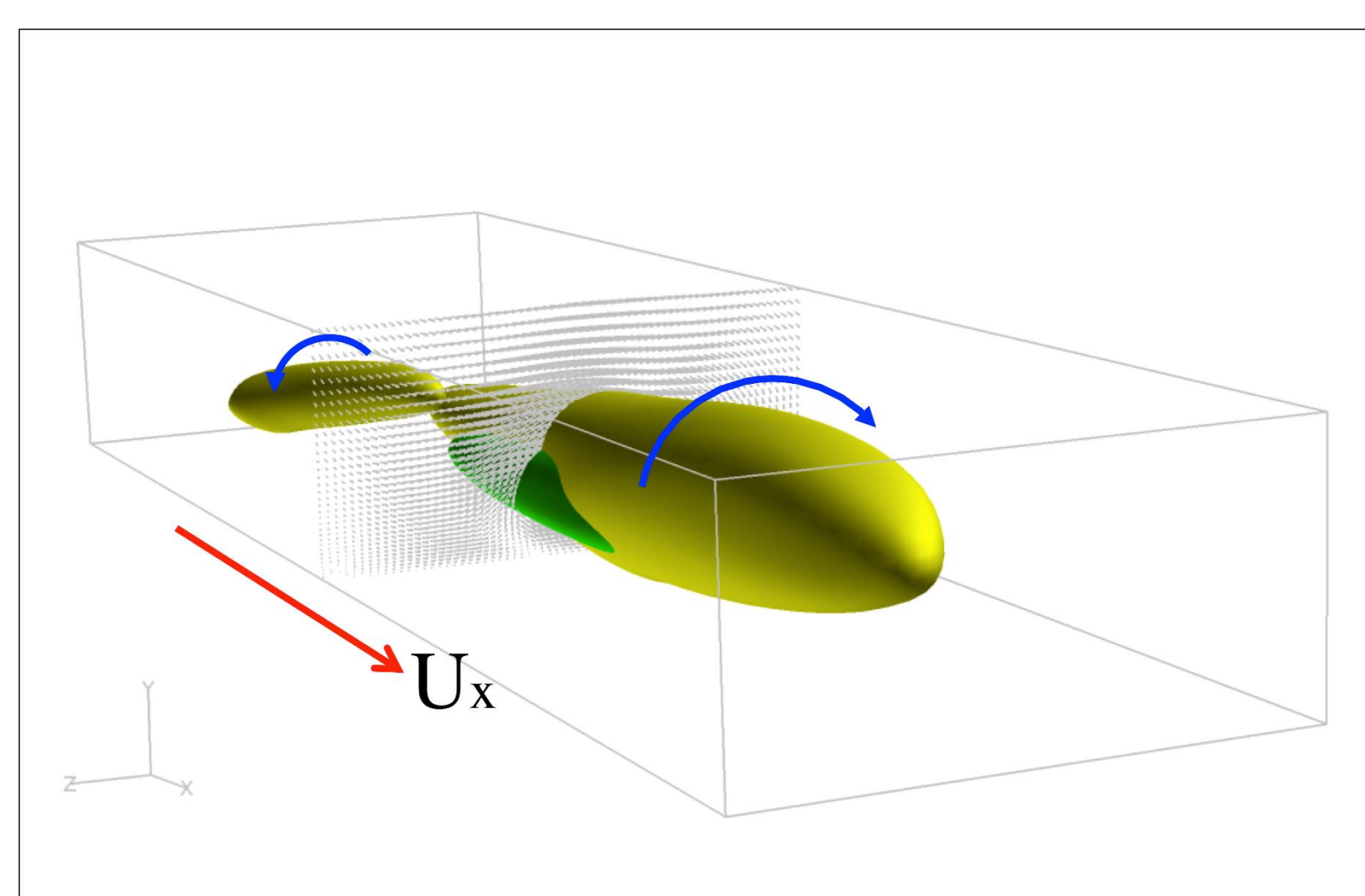
- 物理機構にもとづくLESモデルとRANSモデルの研究
- 回転・旋回流の数値シミュレーション
- 電磁流体乱流の物理とモデリング

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による解析とモデリング

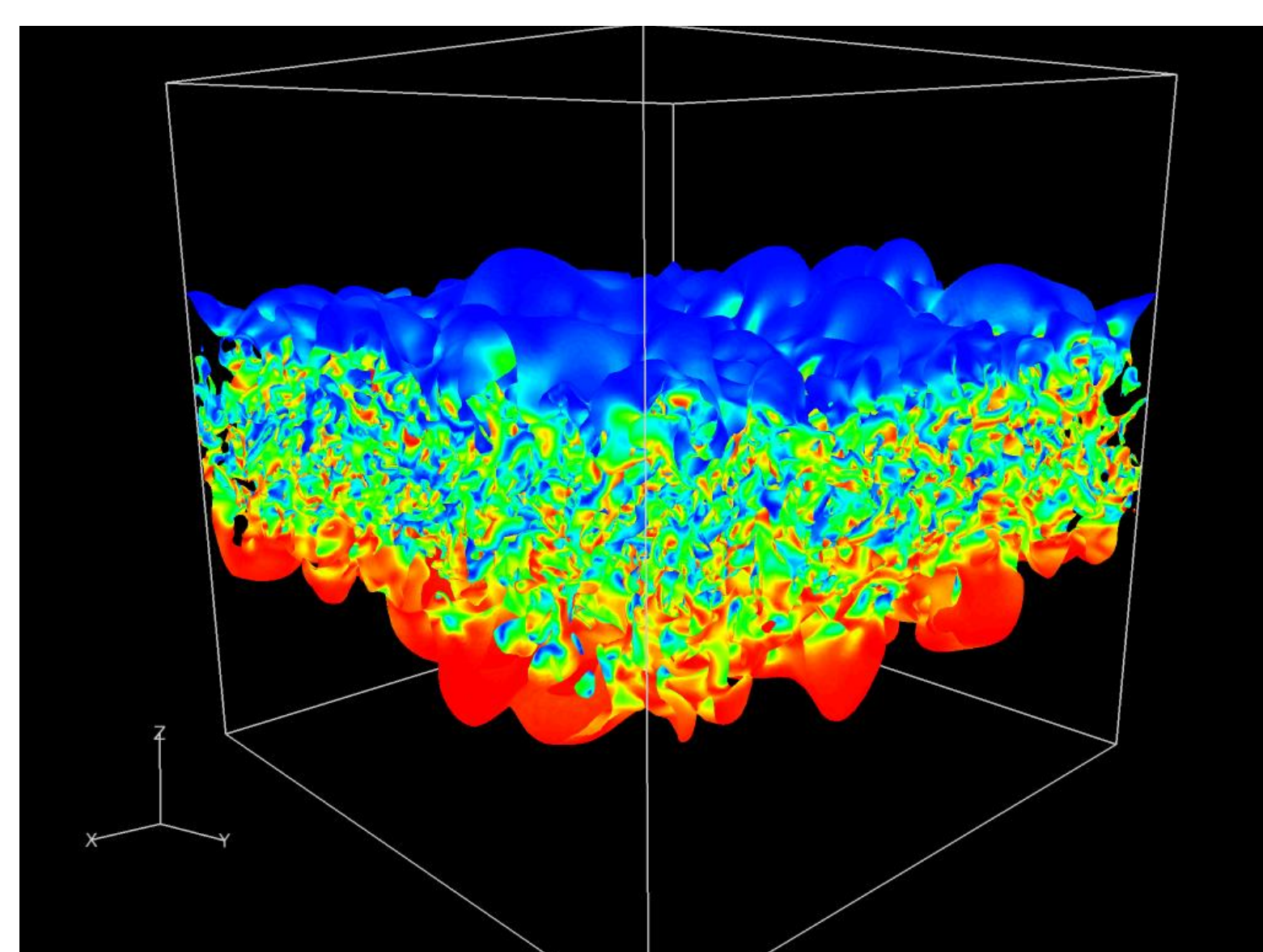


スケール空間エネルギー密度による解析
左図: 小スケールの渦, 右図: 中スケールの渦

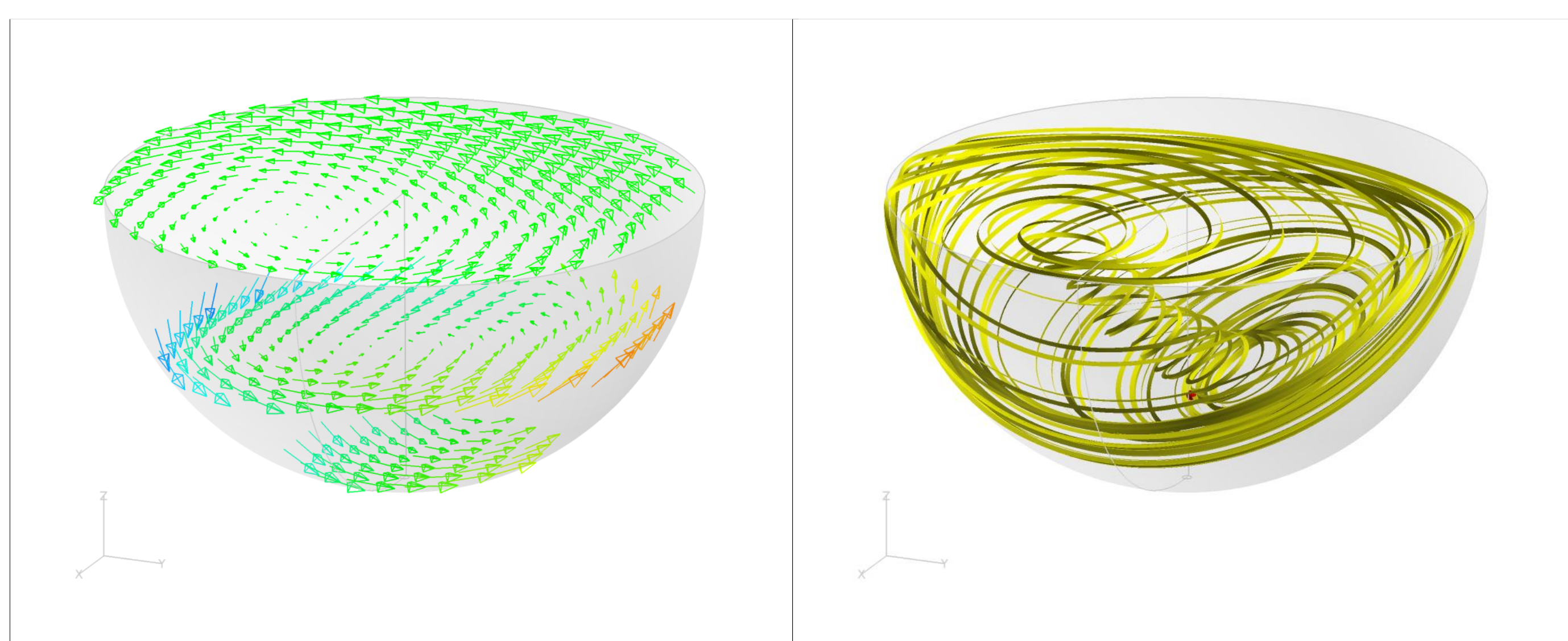


条件付き平均で抽出された壁近くの渦構造

回転・旋回流の数値シミュレーション

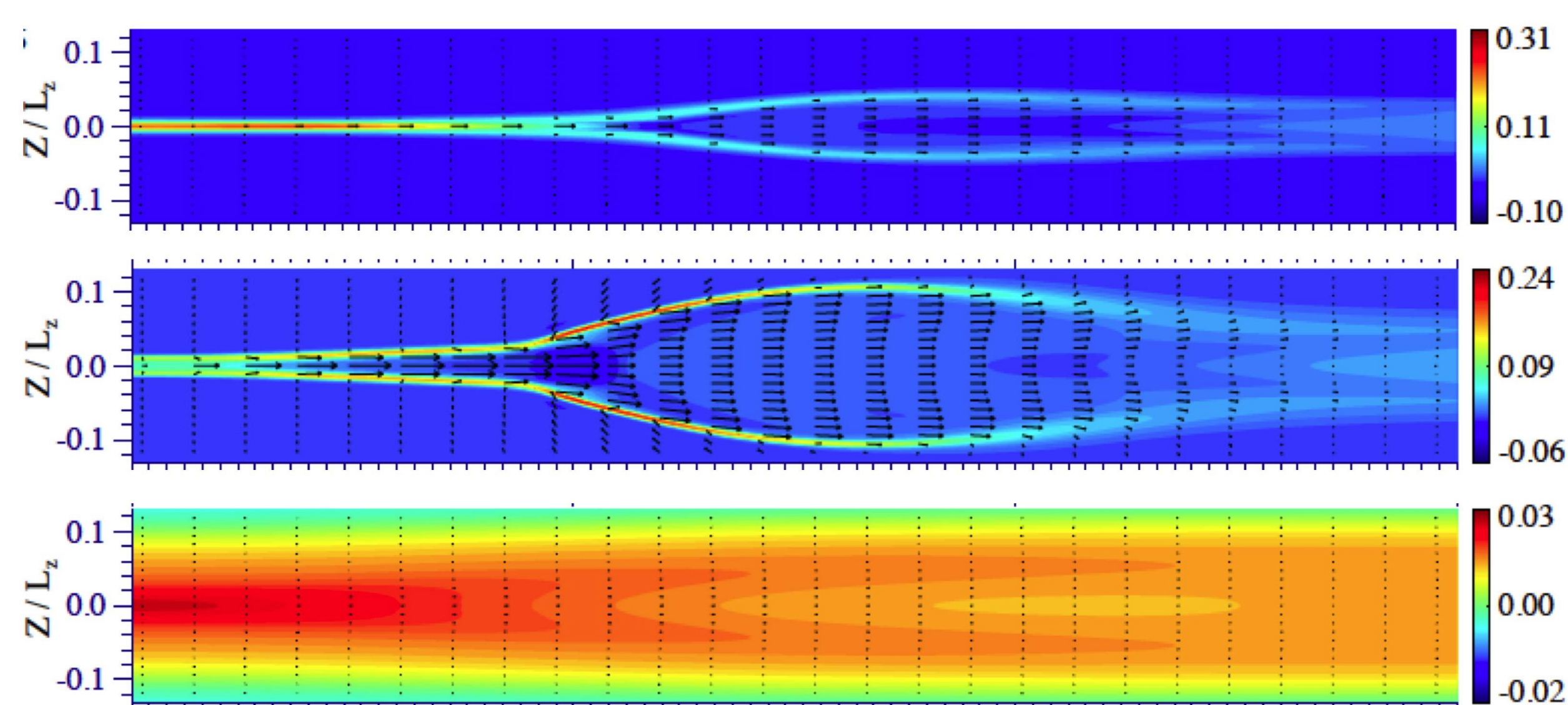


回転系の乱流拡散の運動エネルギー

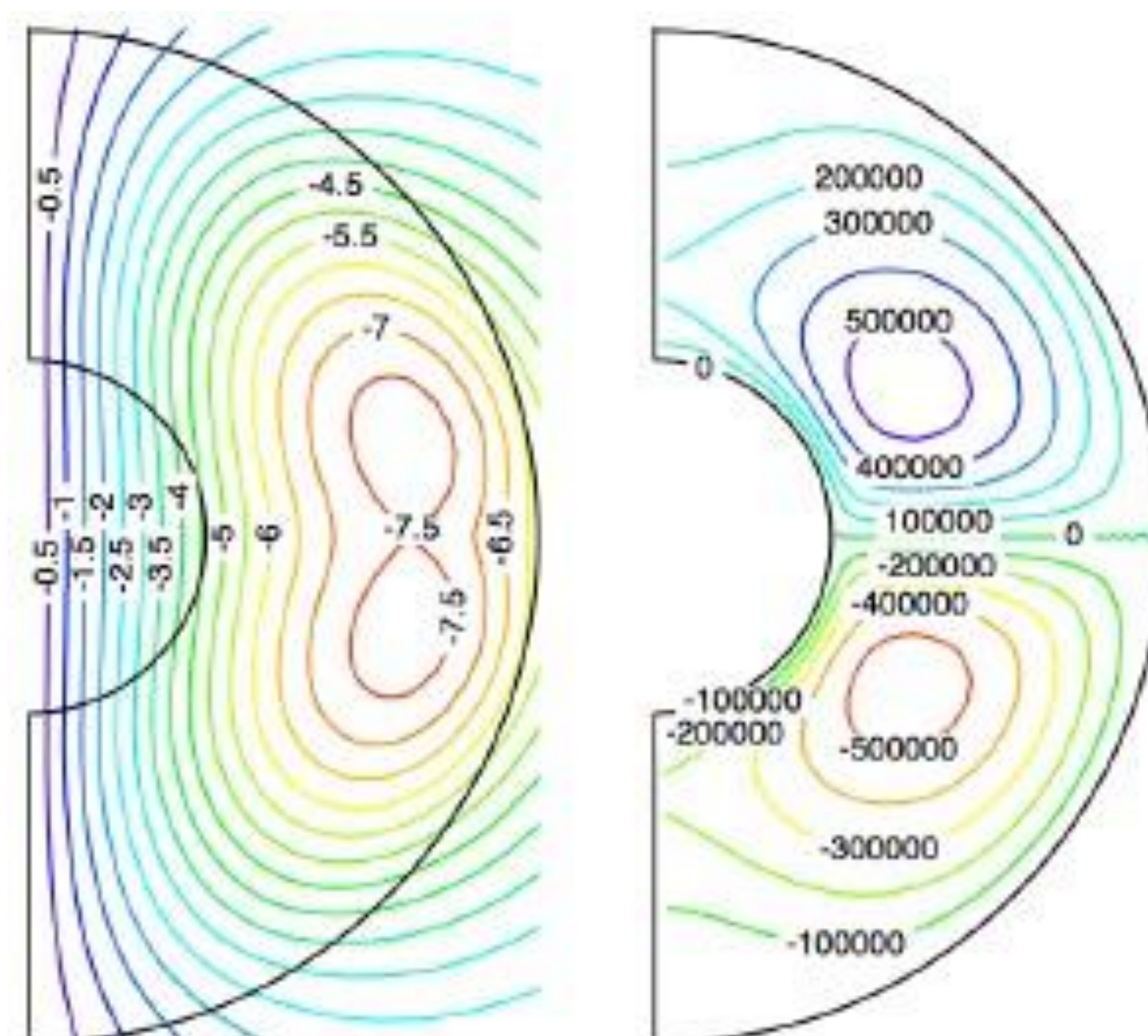


回転式の蒸留装置内の流れの数値解析
左図: 速度ベクトル, 右図: 流線

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



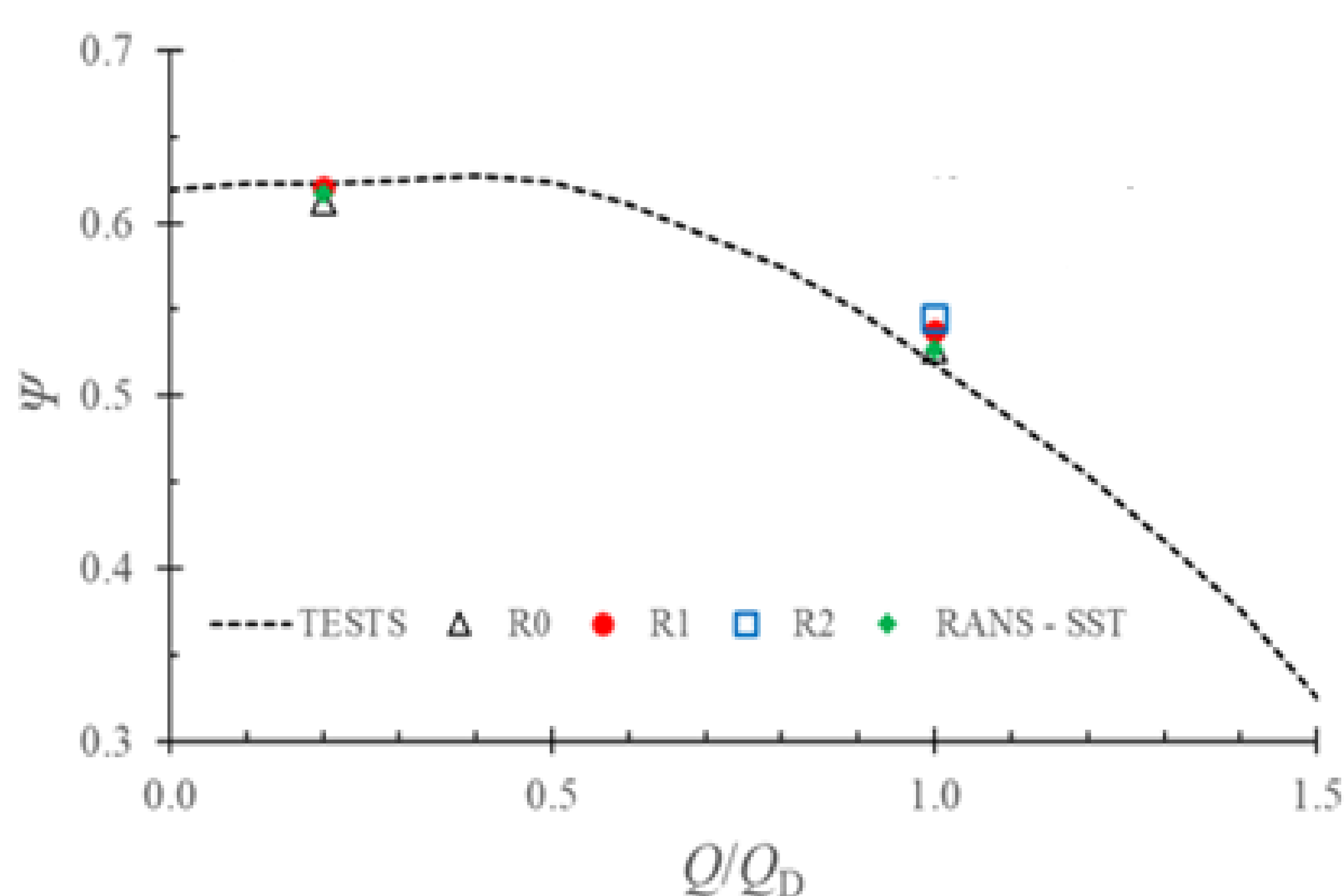
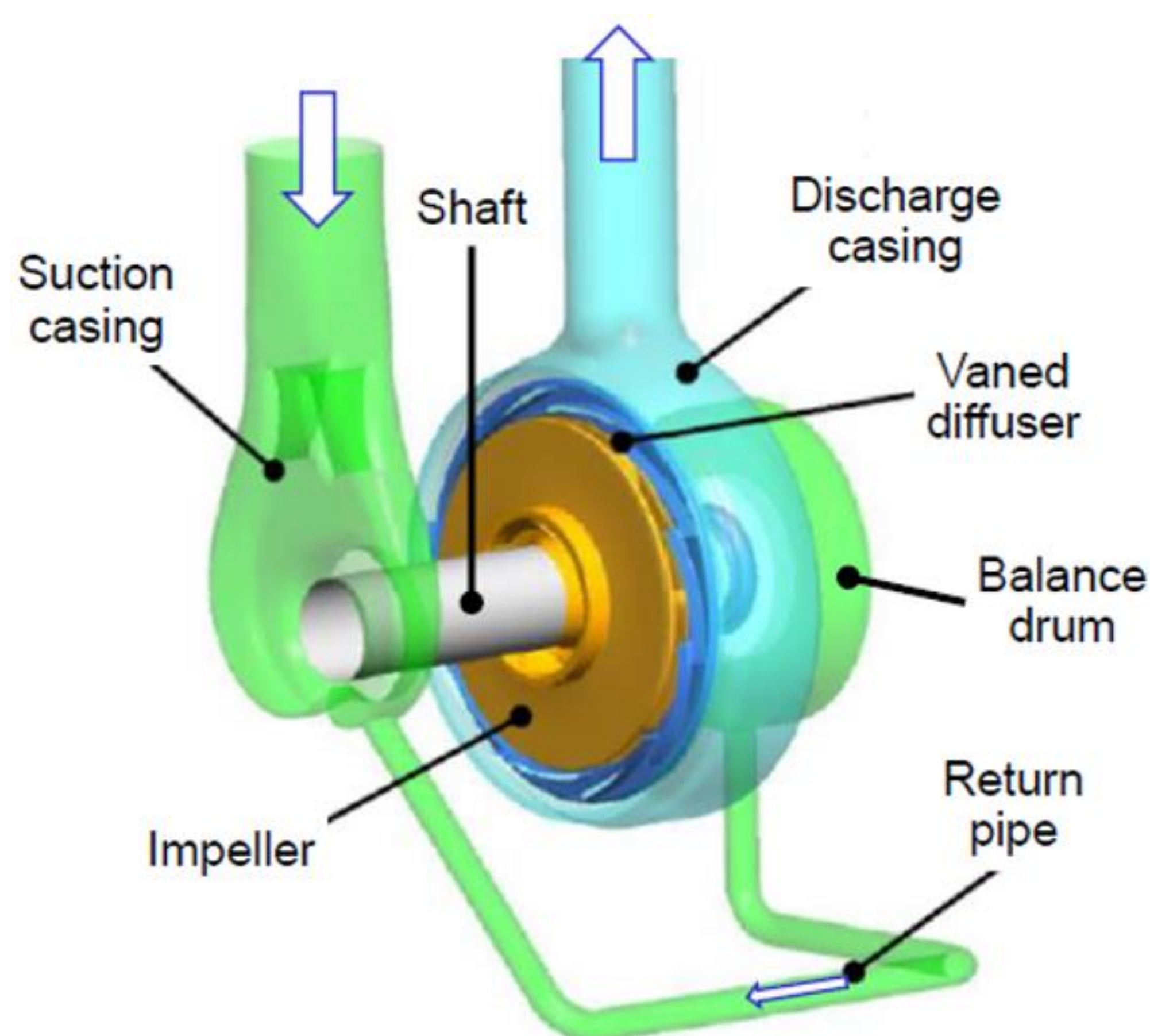
回転球殻の磁場と乱流ヘリシティの分布

熱流体システム制御工学

大規模な数値計算が可能な流体解析ソフトウェアの開発と基礎研究・応用研究の推進

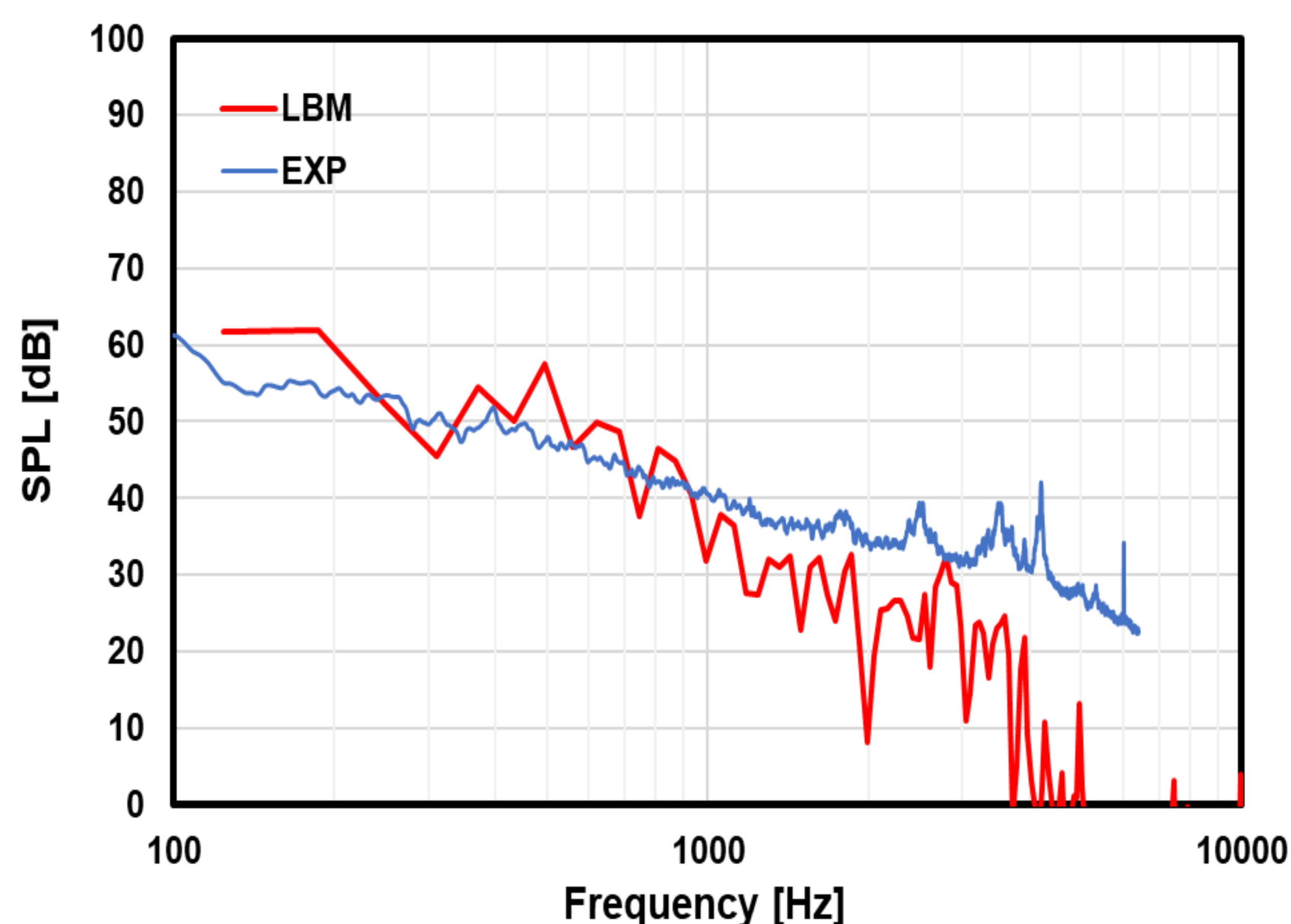
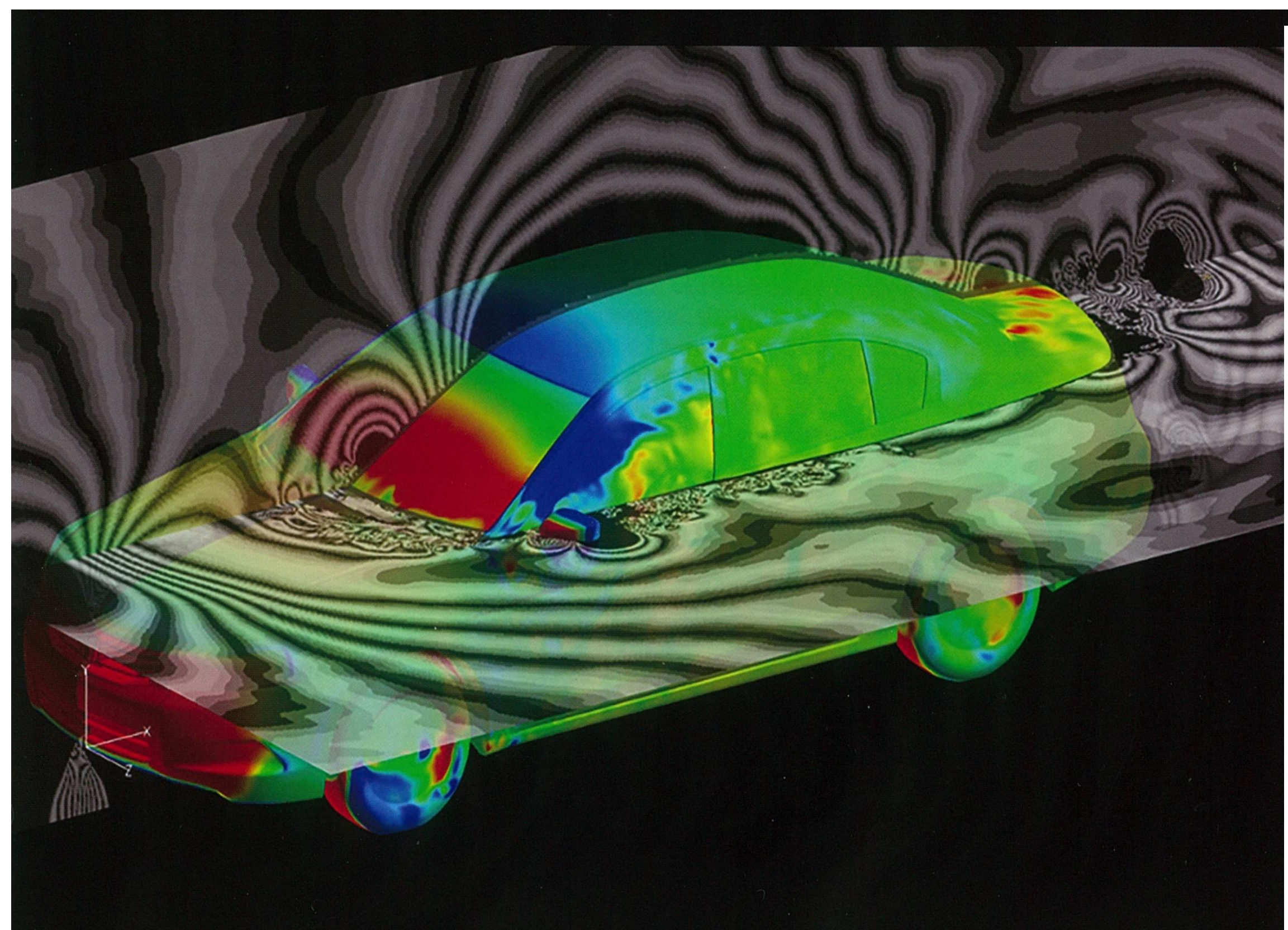
本研究室は有限要素法に基づく汎用的な大規模LES解析ソルバーFrontFlow/bule(FFB)とLattice Boltzmann法 (LBM) に基づく大規模LES解析ソルバーFrontFlow/x(FFX)の二つのLES解析ソルバーを開発しています。FFBは 最大1,000億要素規模の多くの実用計算の実績があります。FFXは階層的な直交格子法 (BCM: Building Cube Method) を用いることによって、自動車のエンジンルームやタイヤハウス内の流れなど、複雑形状の流れ計算用の格子を完全に自動生成できる特長があり、2兆格子程度の実用計算の実用化を目指しています。さらに、風洞実験や流体数値解析も駆使して封雑な熱流体現象の解明にも取り組んでいます。

有限要素法に基づく汎用的な大規模LES解析ソルバーFFBの研究開発



FFBによる遠心ポンプ内部流れと性能の予測結果

Lattice Boltzmann法に基づく大規模LES解析ソルバーFFXの研究開発



FFXによる自動車の空力音響結果

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

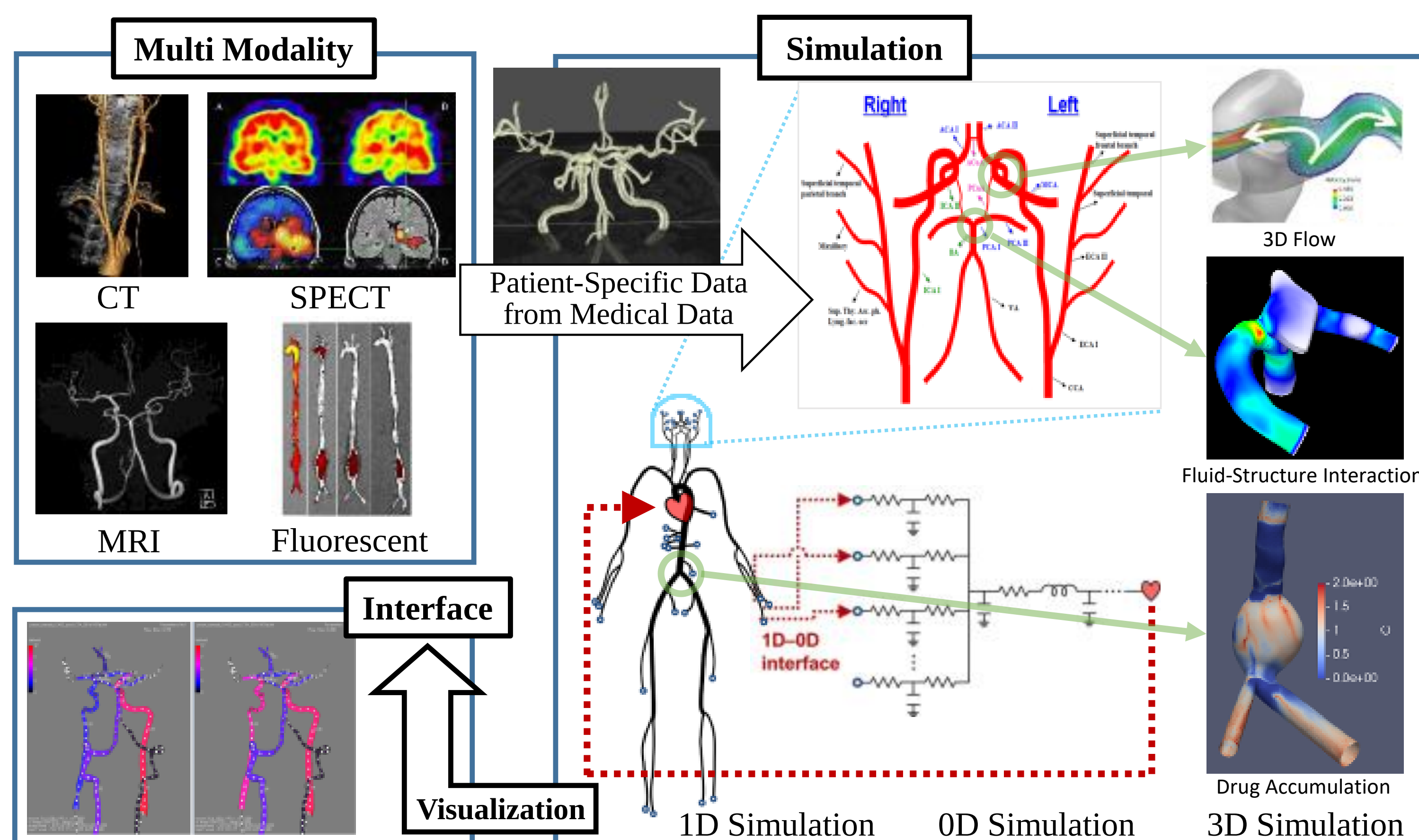
概要

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

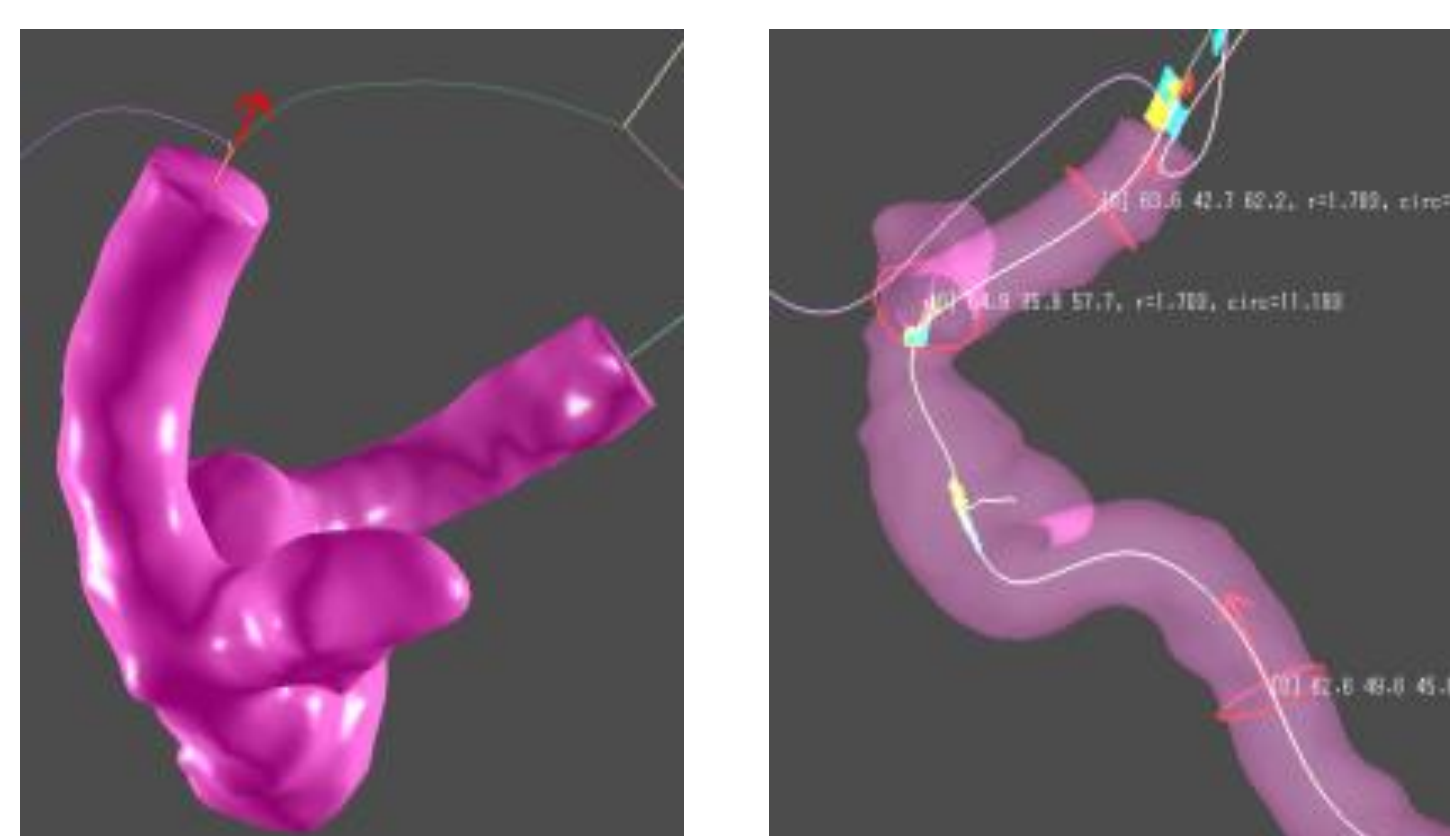
Interface: 血行動態の効果的な可視化システム



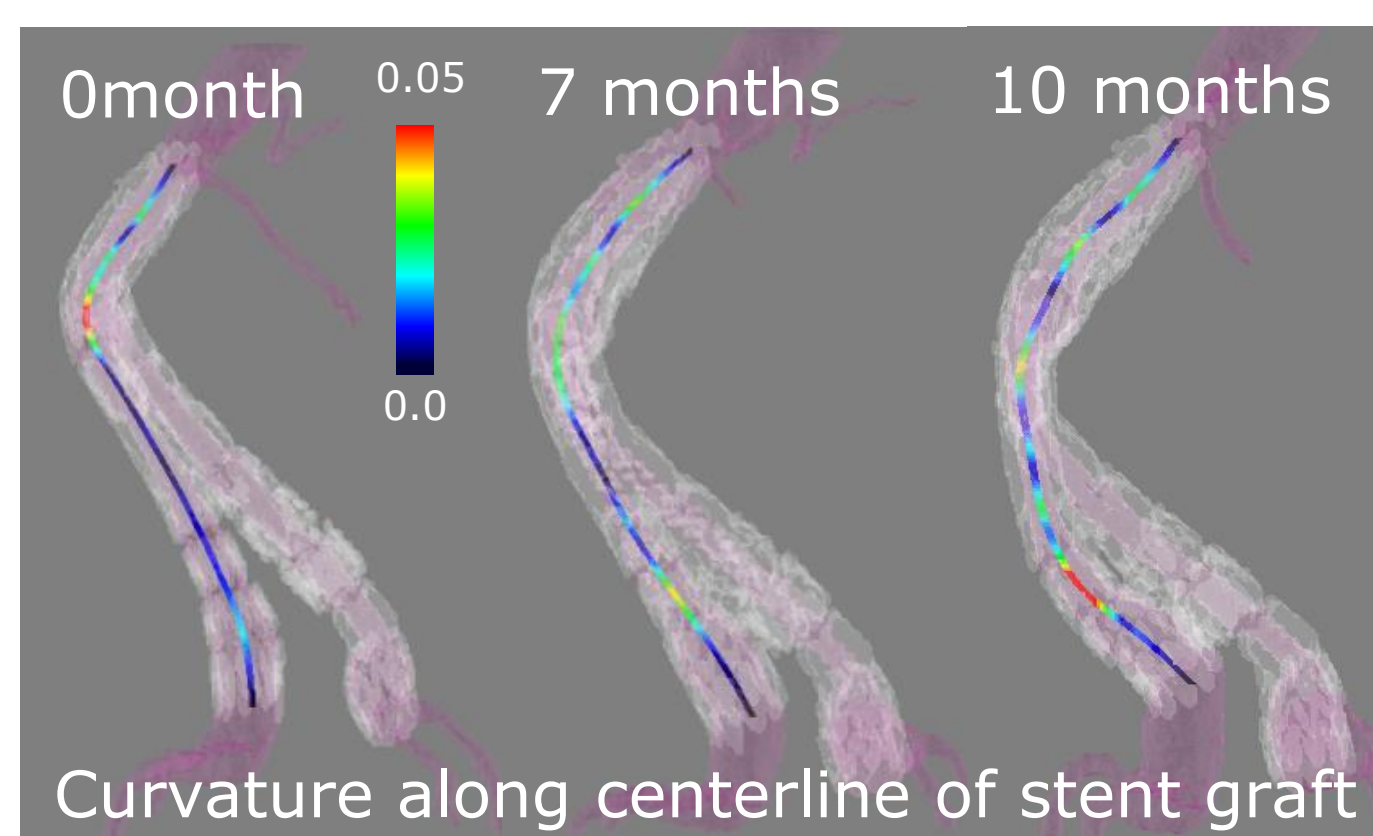
マルチスケール・フィジックスシミュレーションの概要

V-Modeler

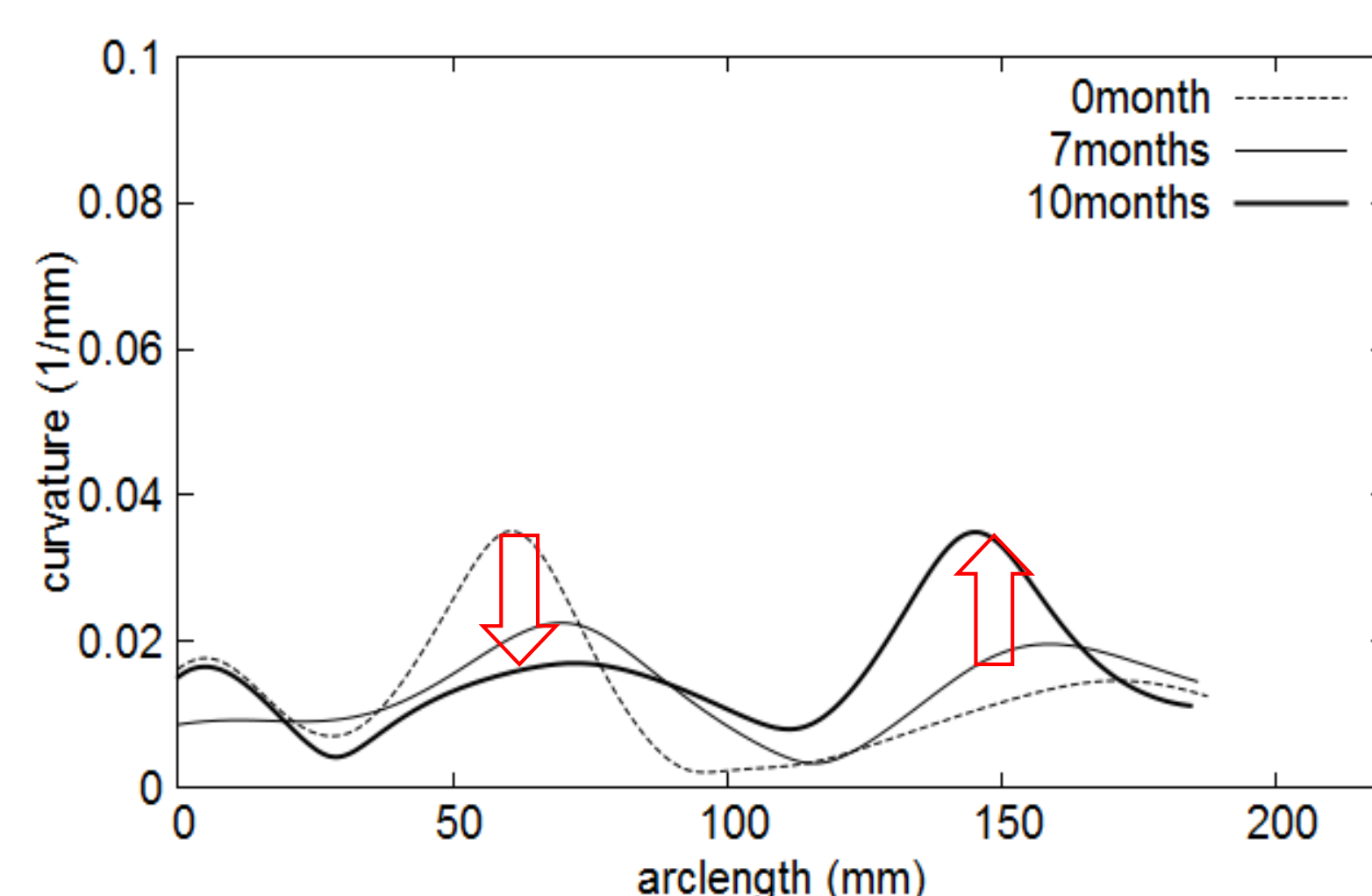
医用画像からの血管およびステントグラフトの3次元形状の経時変化を調査するためのモデリングシステム



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

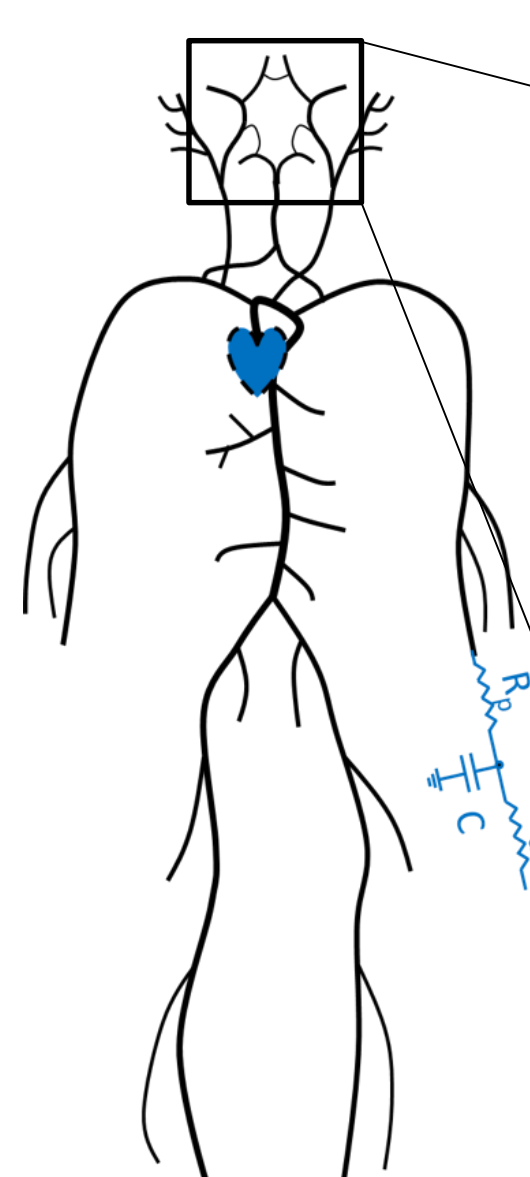
患者固有の脳循環に対する1次元-0次元血流解析プログラム
全身循環の影響を考慮した解析が可能

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



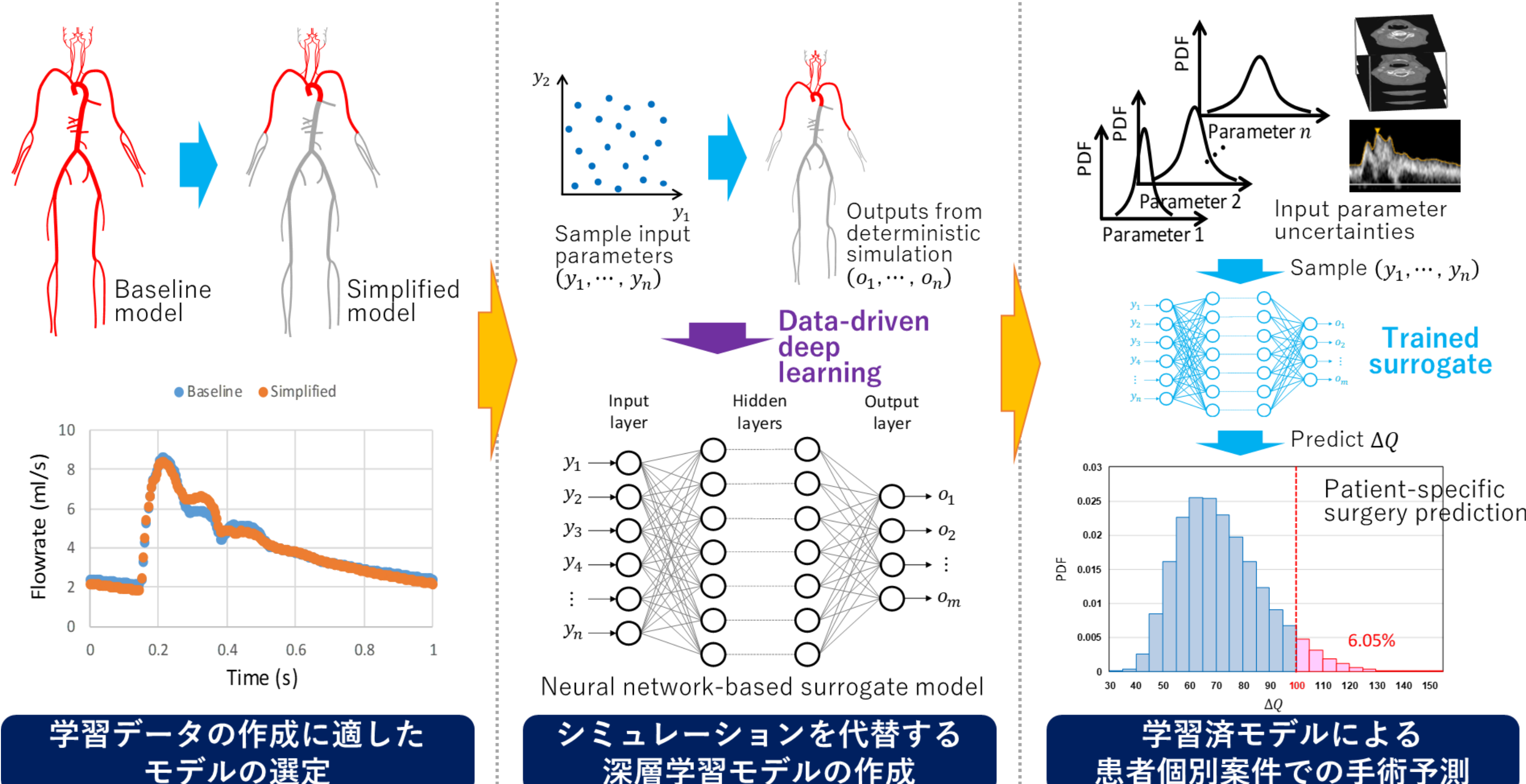
1次元-0次元血流解析の
3D可視化システムの開発

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

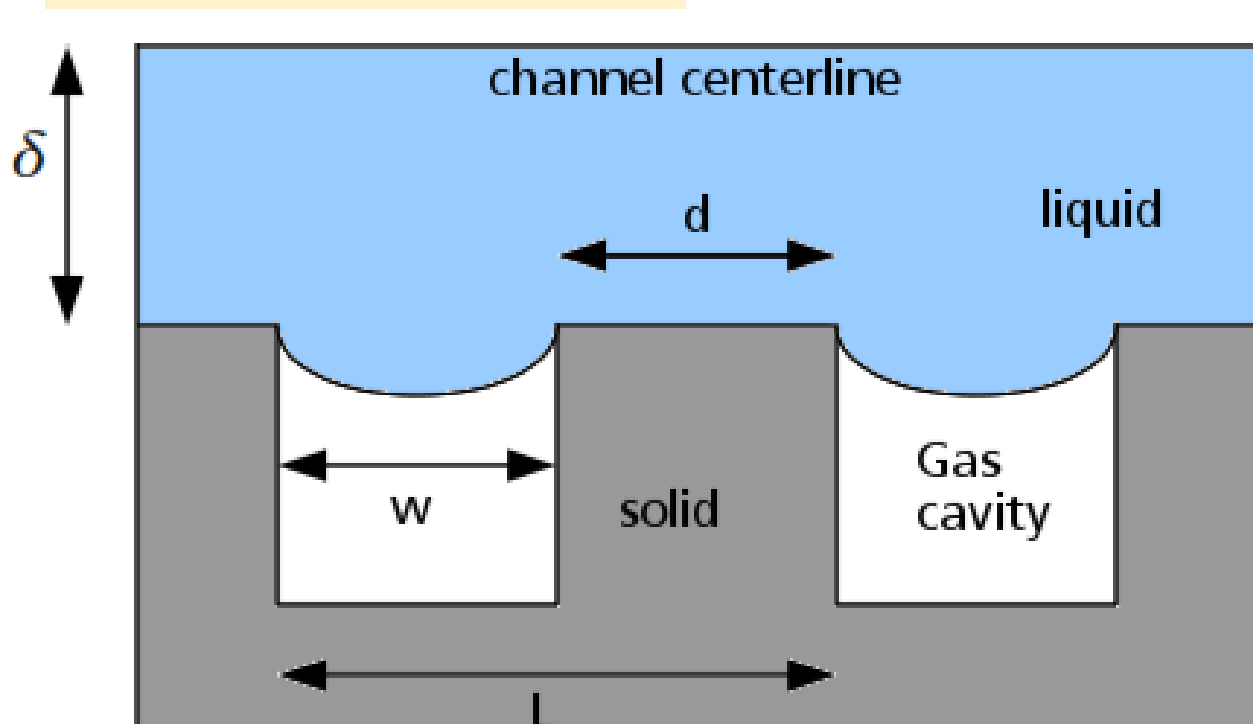
- ・予測結果のばらつきを確率分布として評価
- ・一般的なPCでも即時に行えるような、実用性に富む手法開発



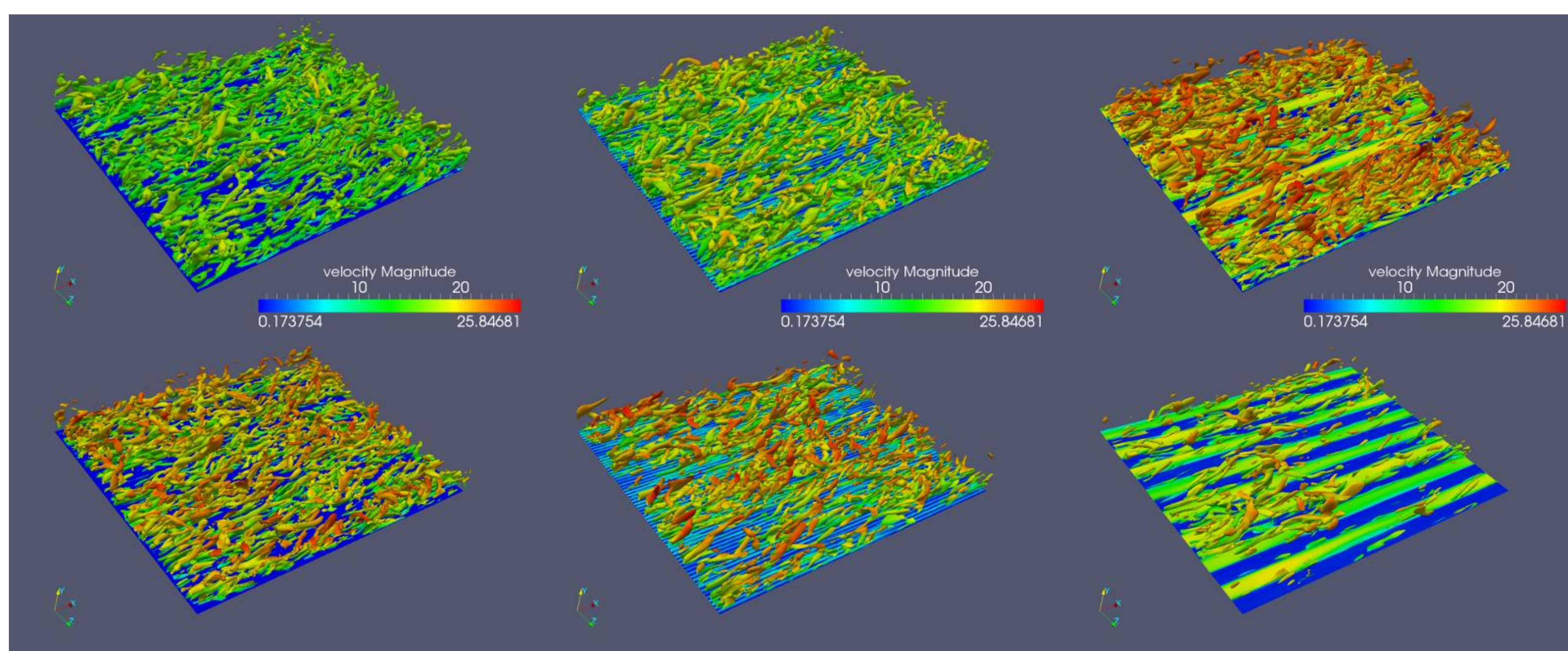
流れの予測と制御

- 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

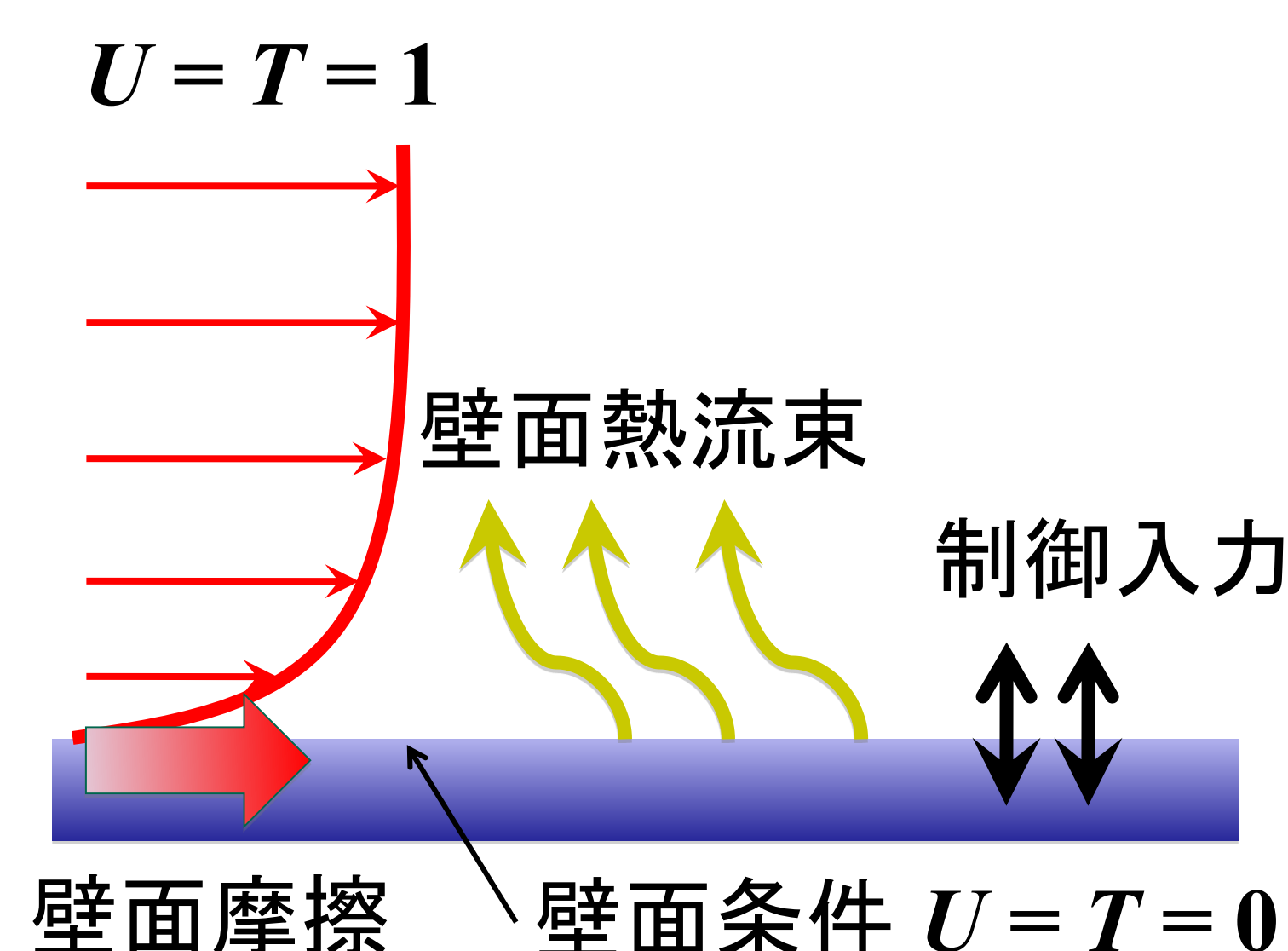


超撥水面の幾何形状

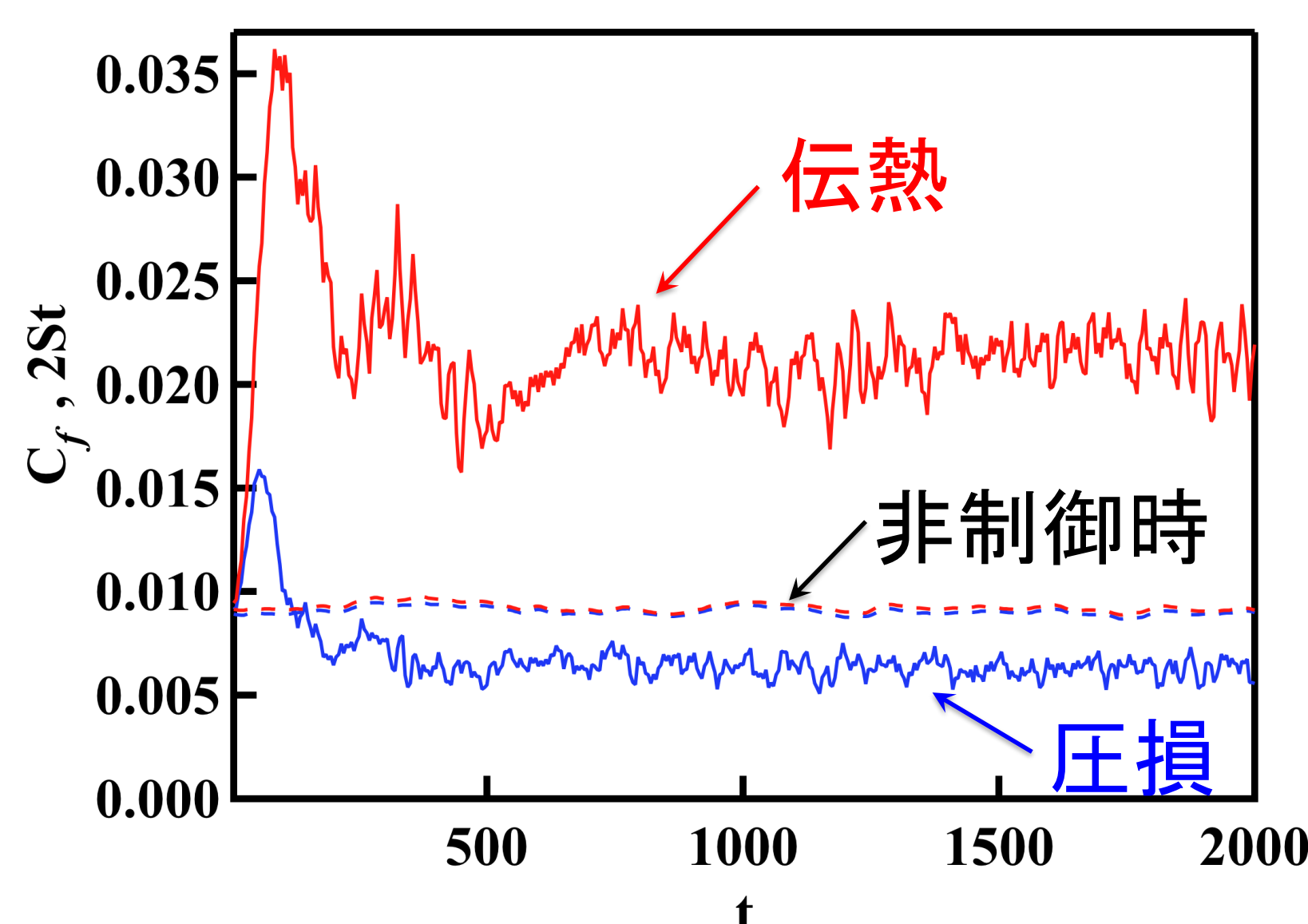


主流方向の溝の上を流れる乱流場の可視化(上: 圧力勾配一定, 下: 流量一定)

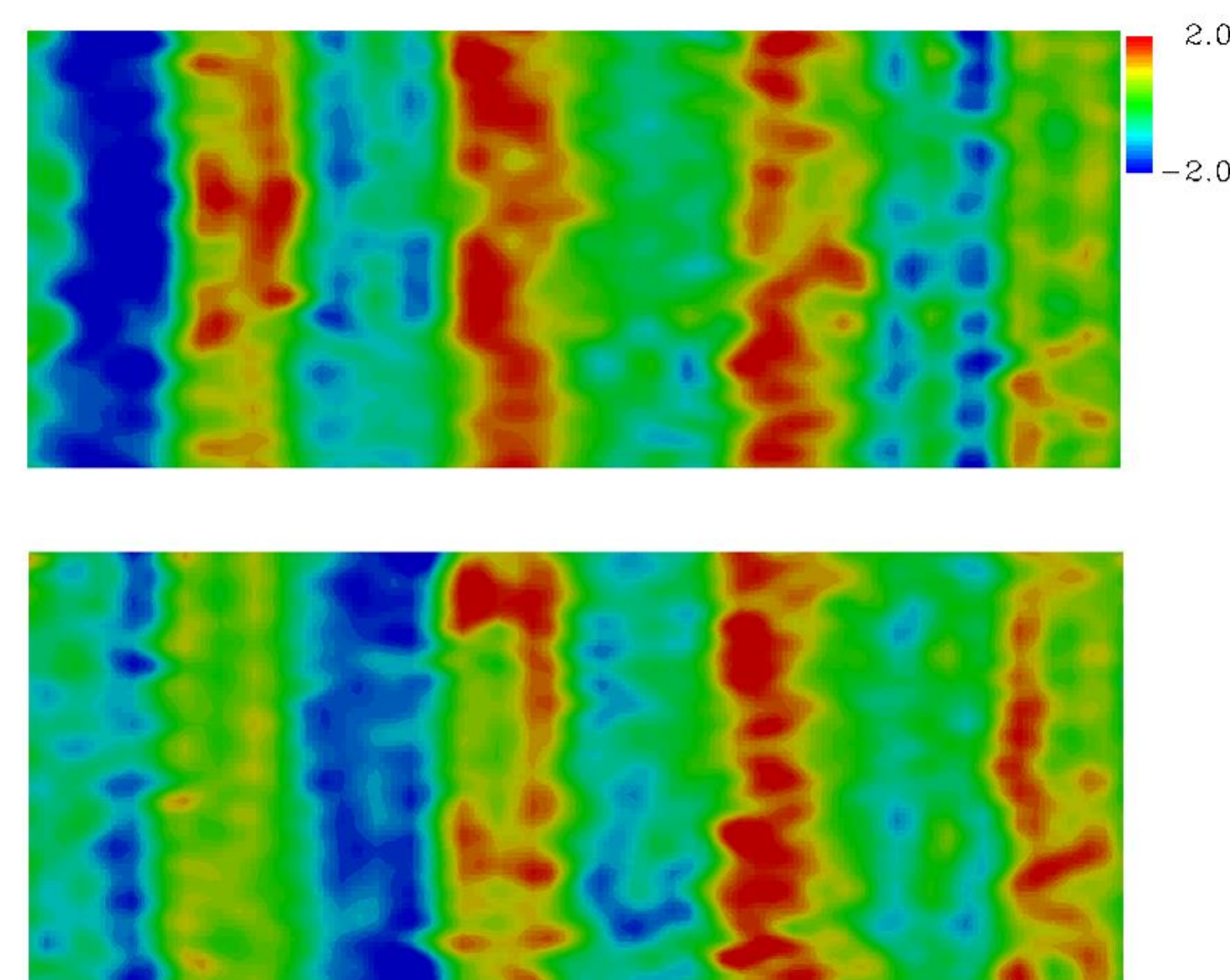
壁乱流における伝熱促進と抵抗低減の同時達成



伝熱を伴う壁乱流場の概念図



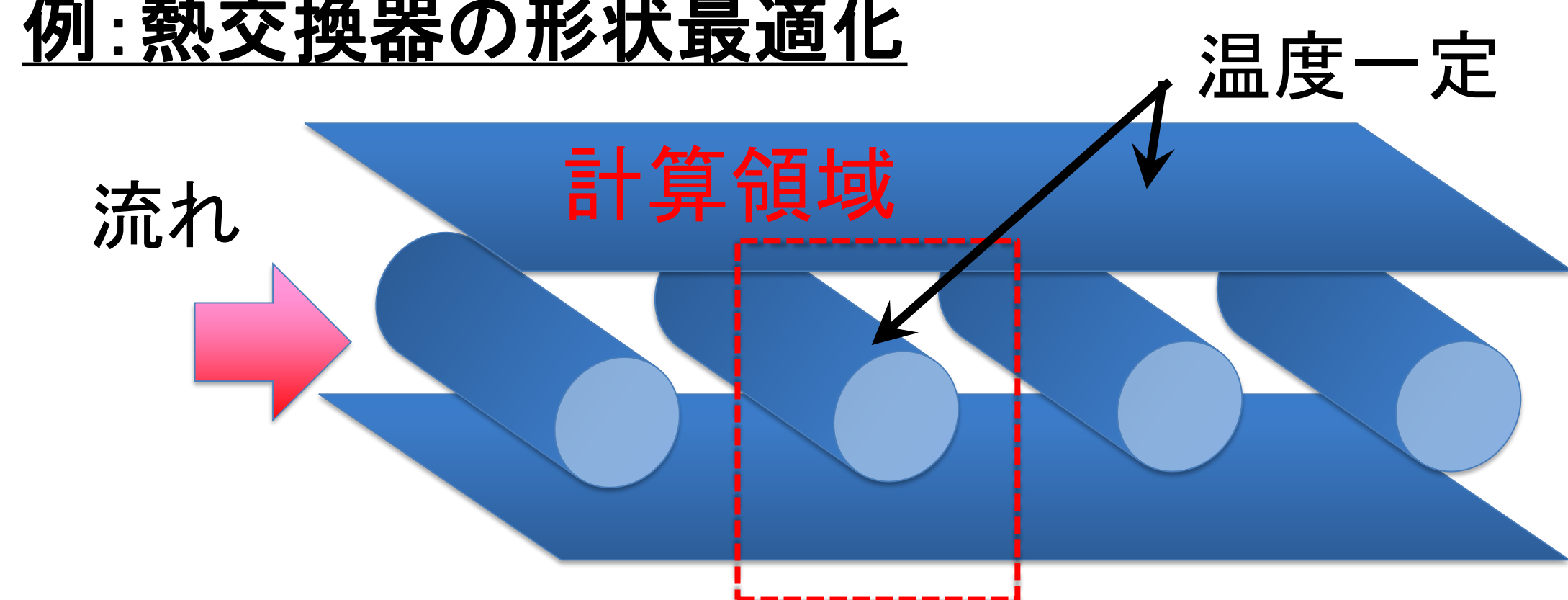
制御後の伝熱と圧損の時間発展



最適制御入力分布
(赤: 吹き出し, 青: 吸い込み)

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

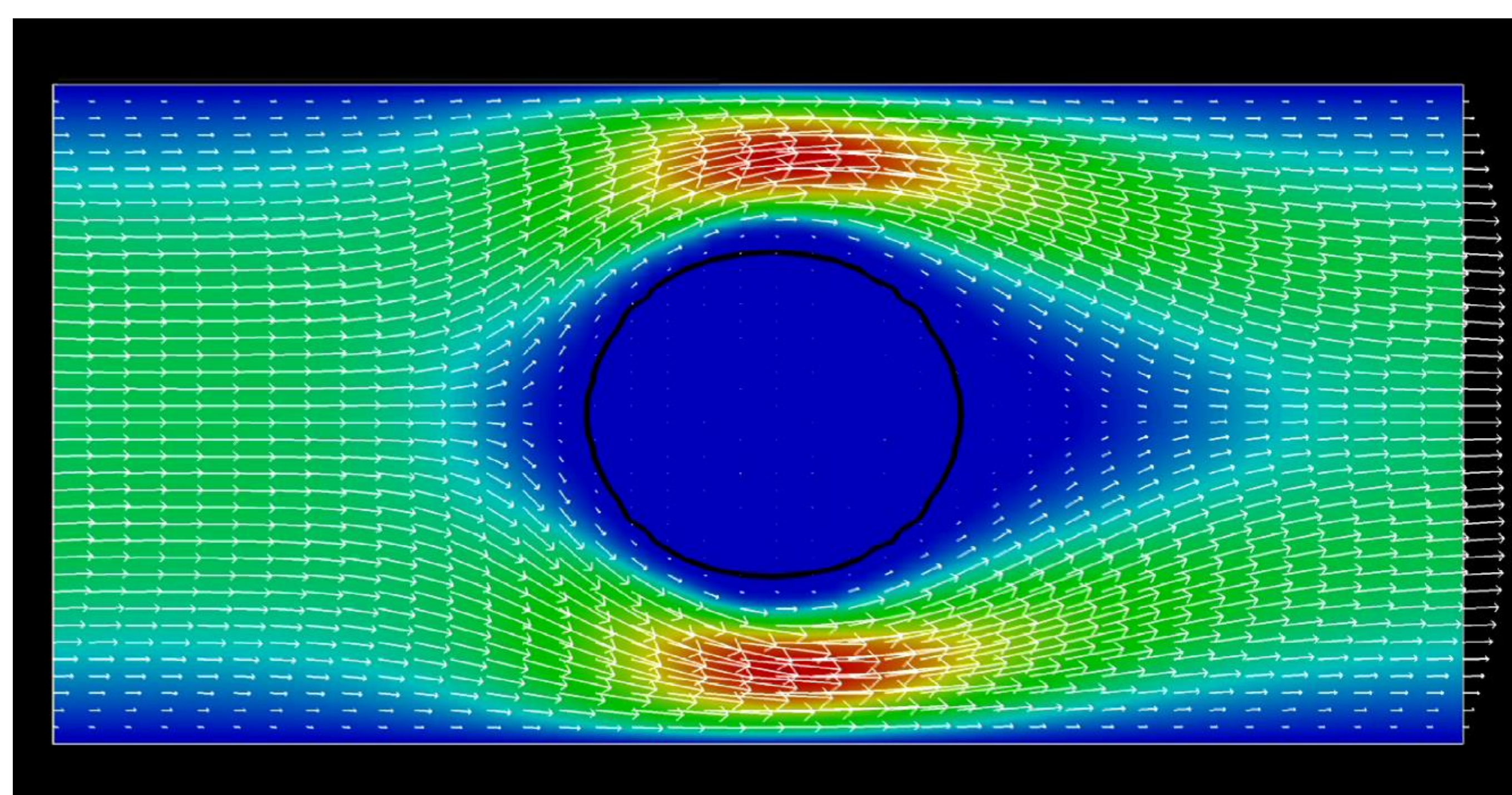


コスト関数

$$J = \alpha \cdot C_f - \beta \cdot Nu$$

流動抵抗 伝熱

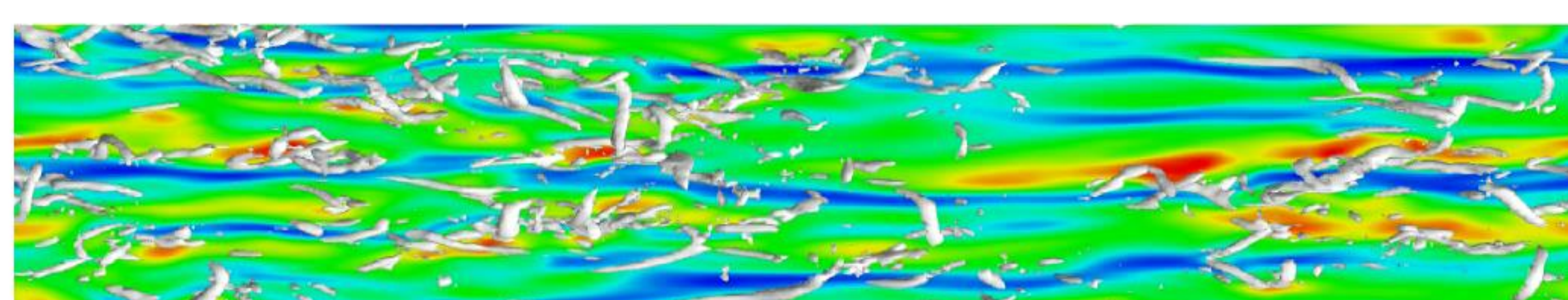
J を最小化するように固体配置を最適化する



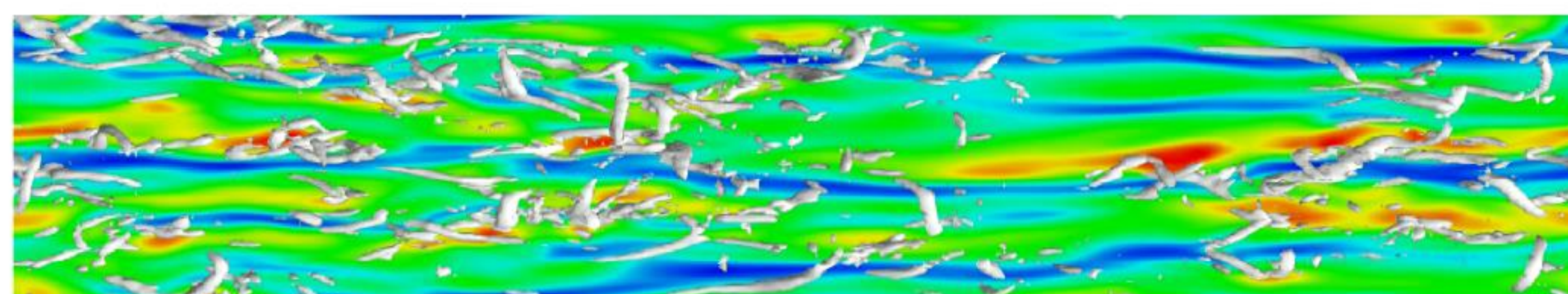
有限のセンサー情報に基づく流れとそれに付随するスカラー場の最尤推定

なぜ天気予報は難しいか ～カオス, 非線形～

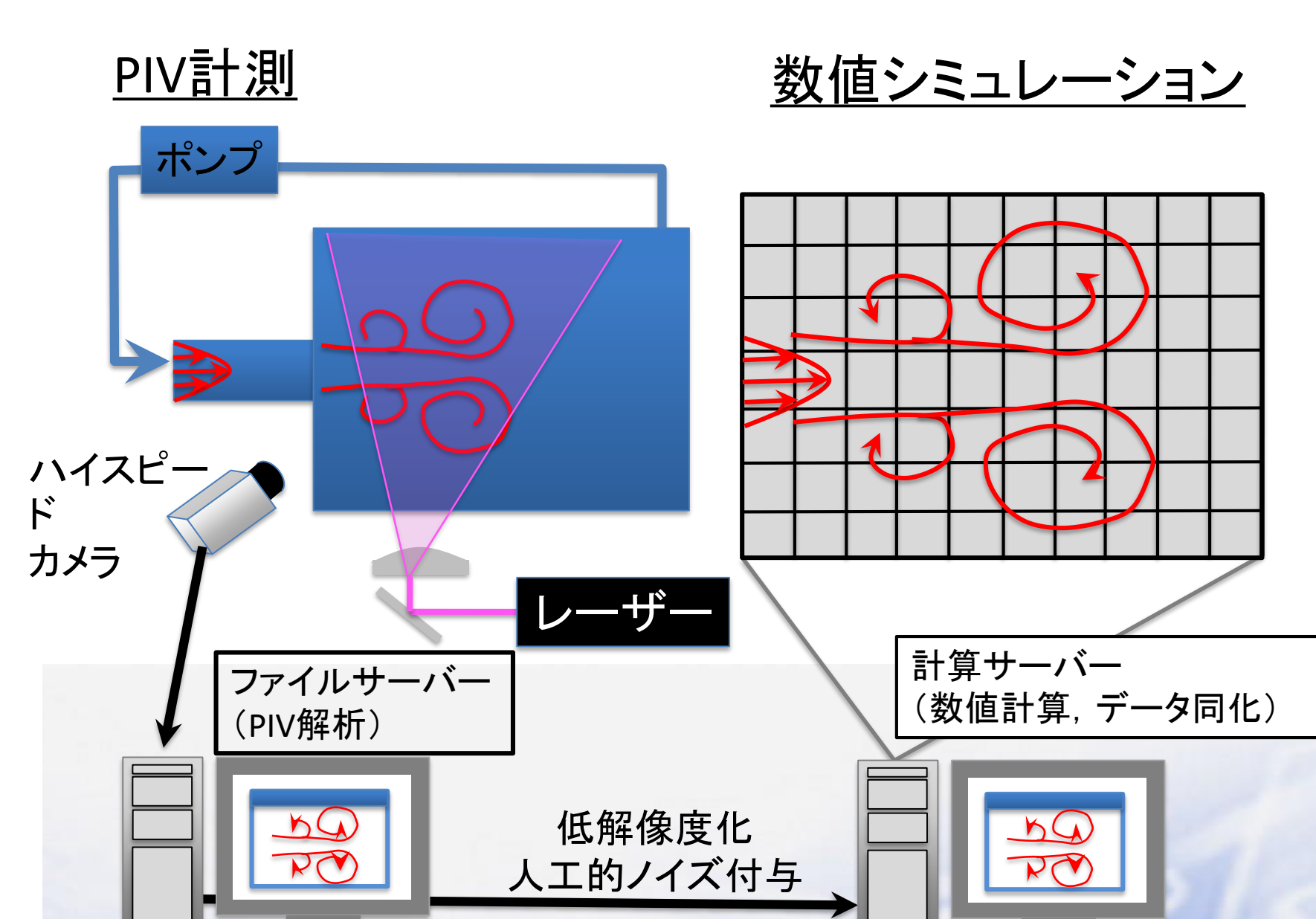
倍精度
計算



単精度
計算



実験と数値計算の融合による流れの推定

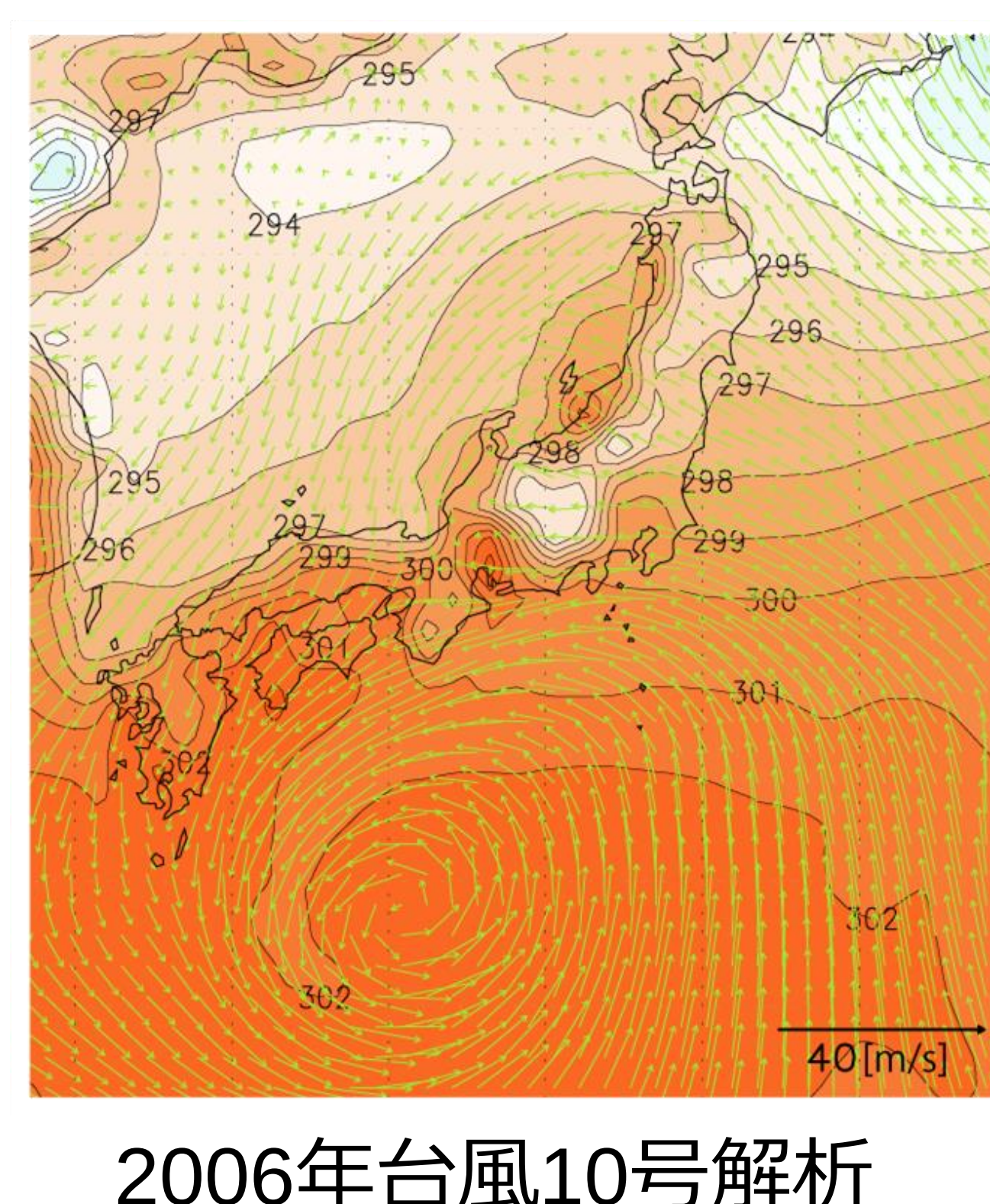
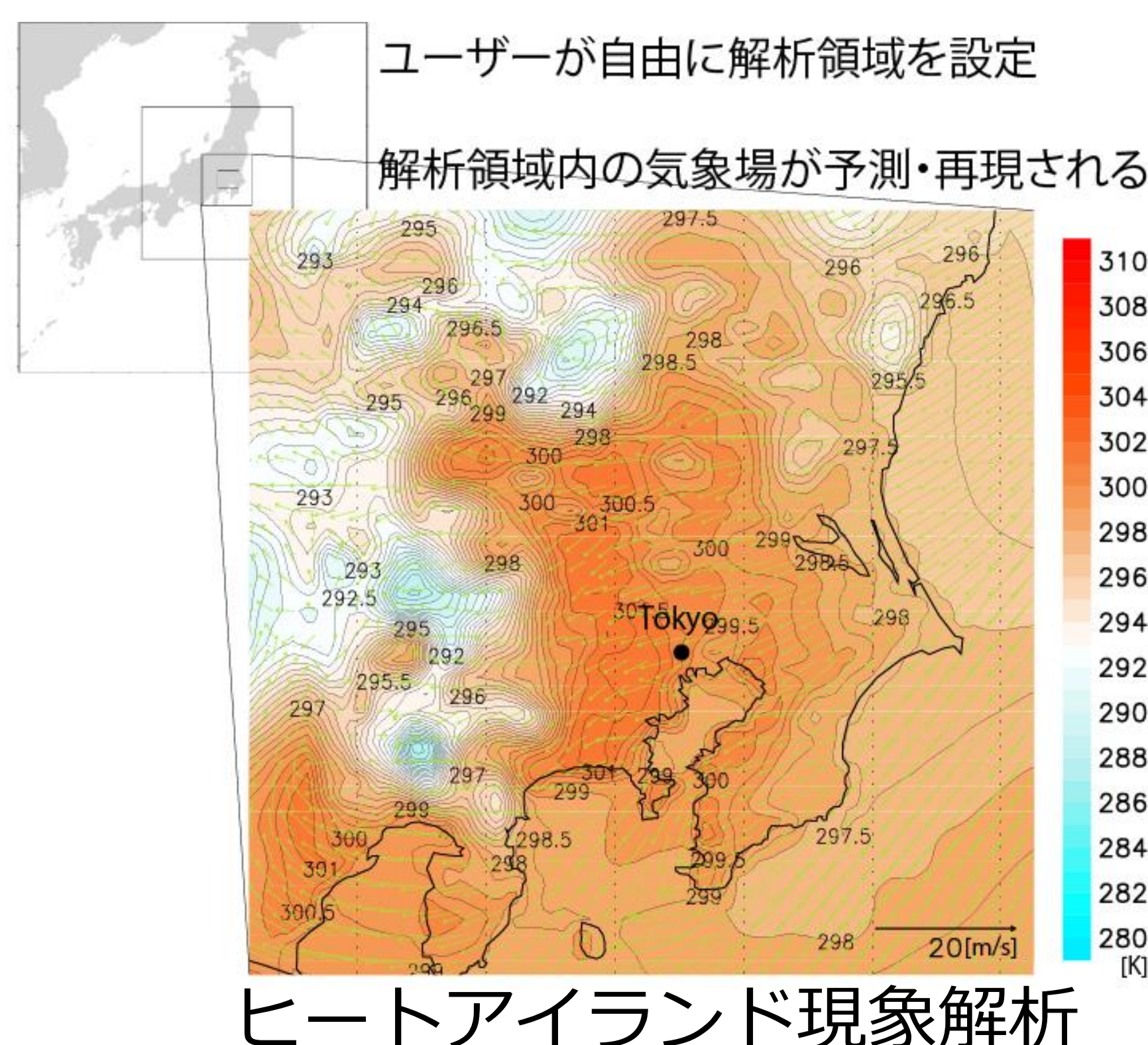
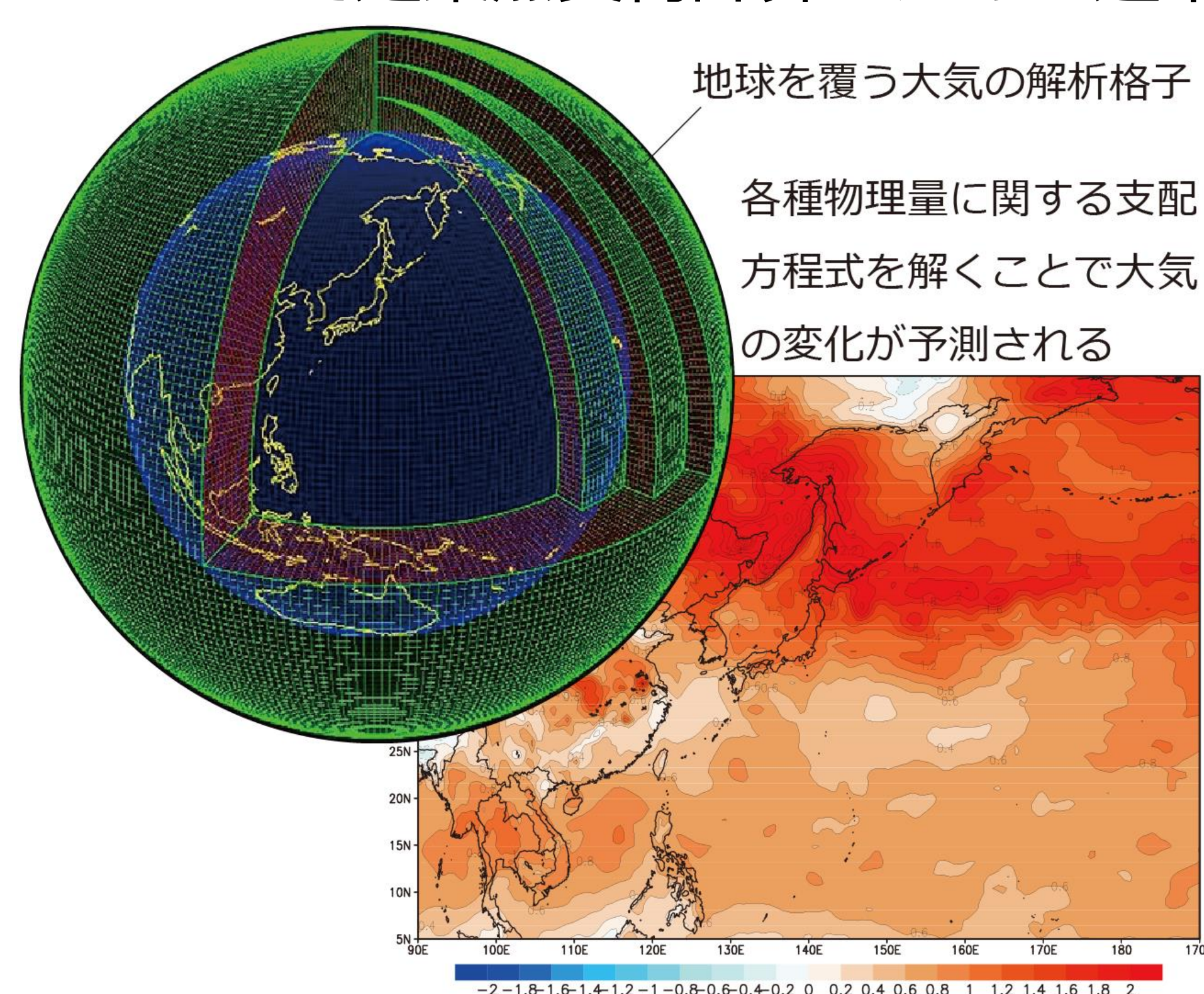


未来の都市空間設計のための建築・都市の熱・空気環境予測

- ▶ 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

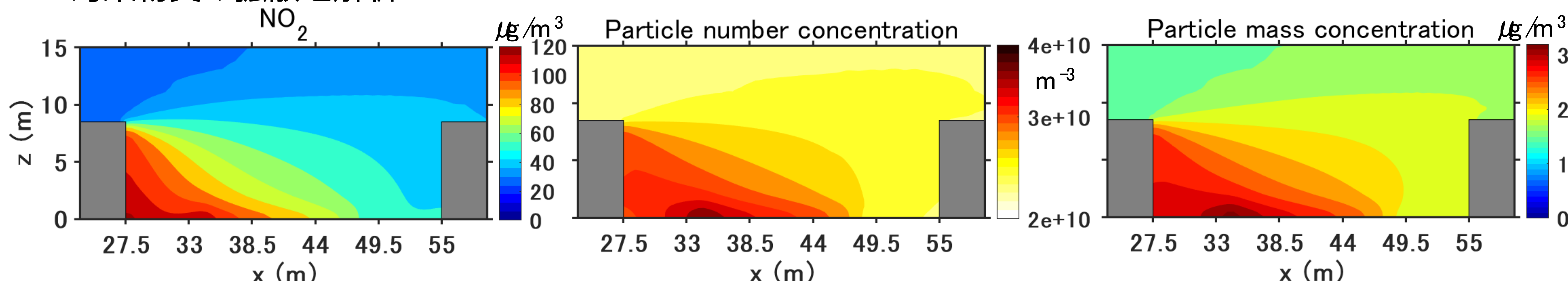
WRFを用いた極端気象の再現

- ▶ 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

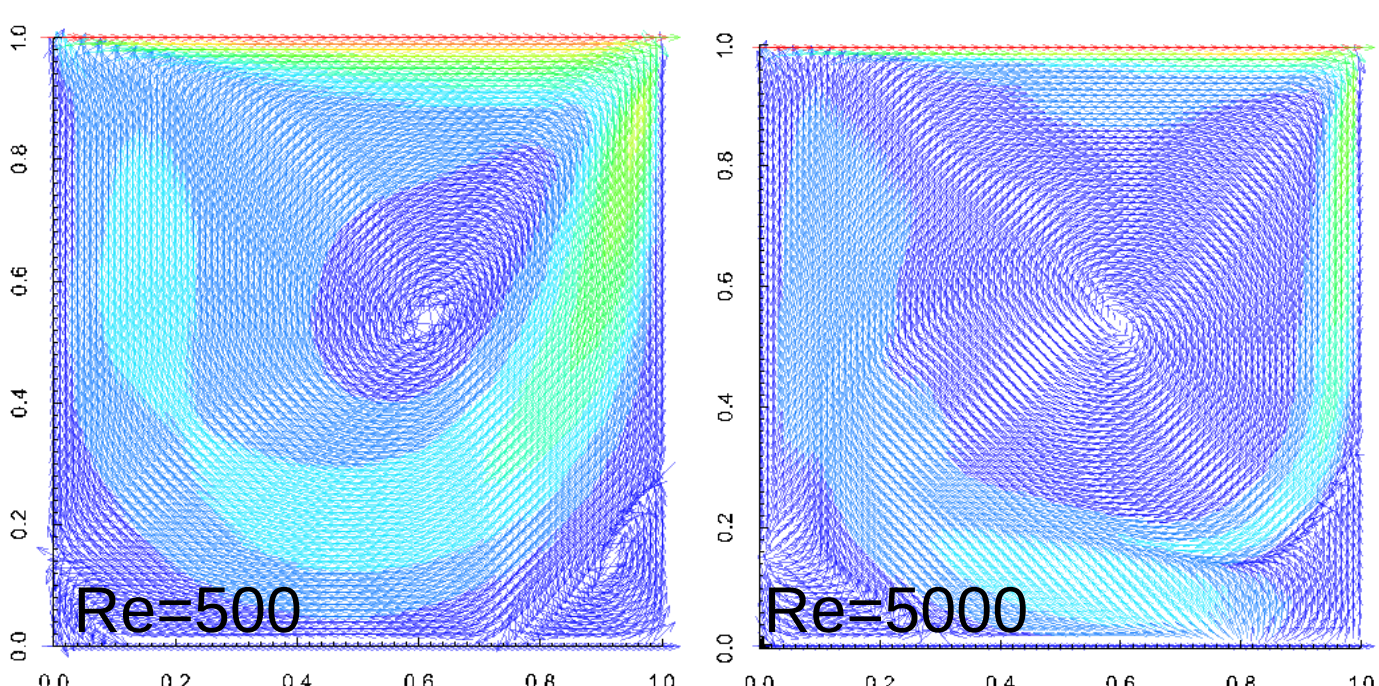
- ▶ ガスとエアロゾルの化学反応を解析するボックスモデルを数値流体力学と連成し、交通排出による汚染物質の拡散を解析



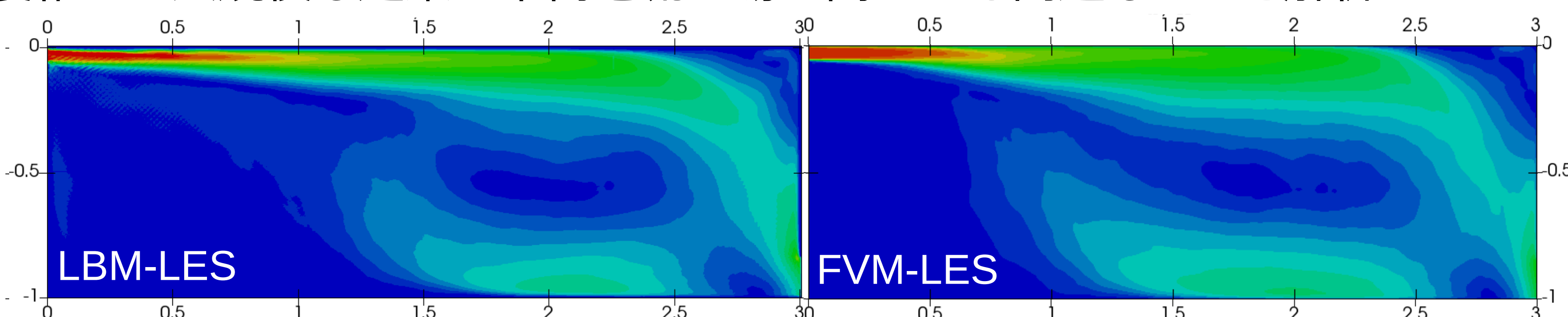
ストリートキャニオンにおけるNO₂の時間質量濃度およびPM₁₀の時間平均数量濃度と質量濃度の分布

格子ボルツマン法による建築風環境の解析

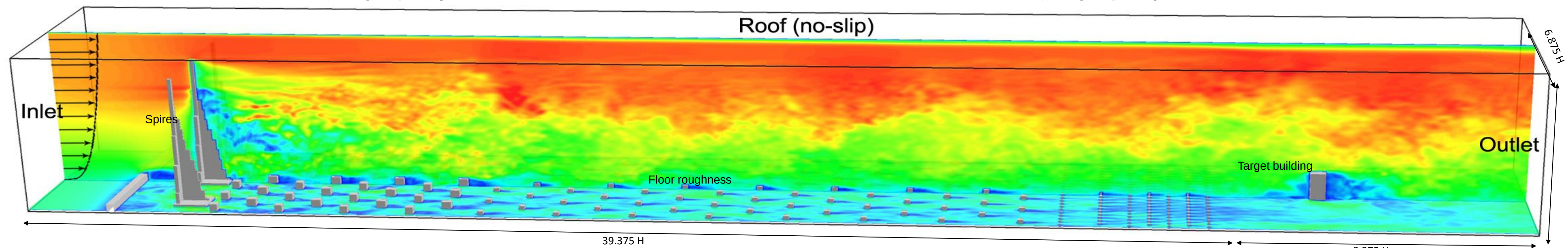
- ▶ 格子ボルツマン法により、複雑かつ大規模な建築と市街地流れ場に関しても高速なLESを解析



三次元キャビティの解析結果



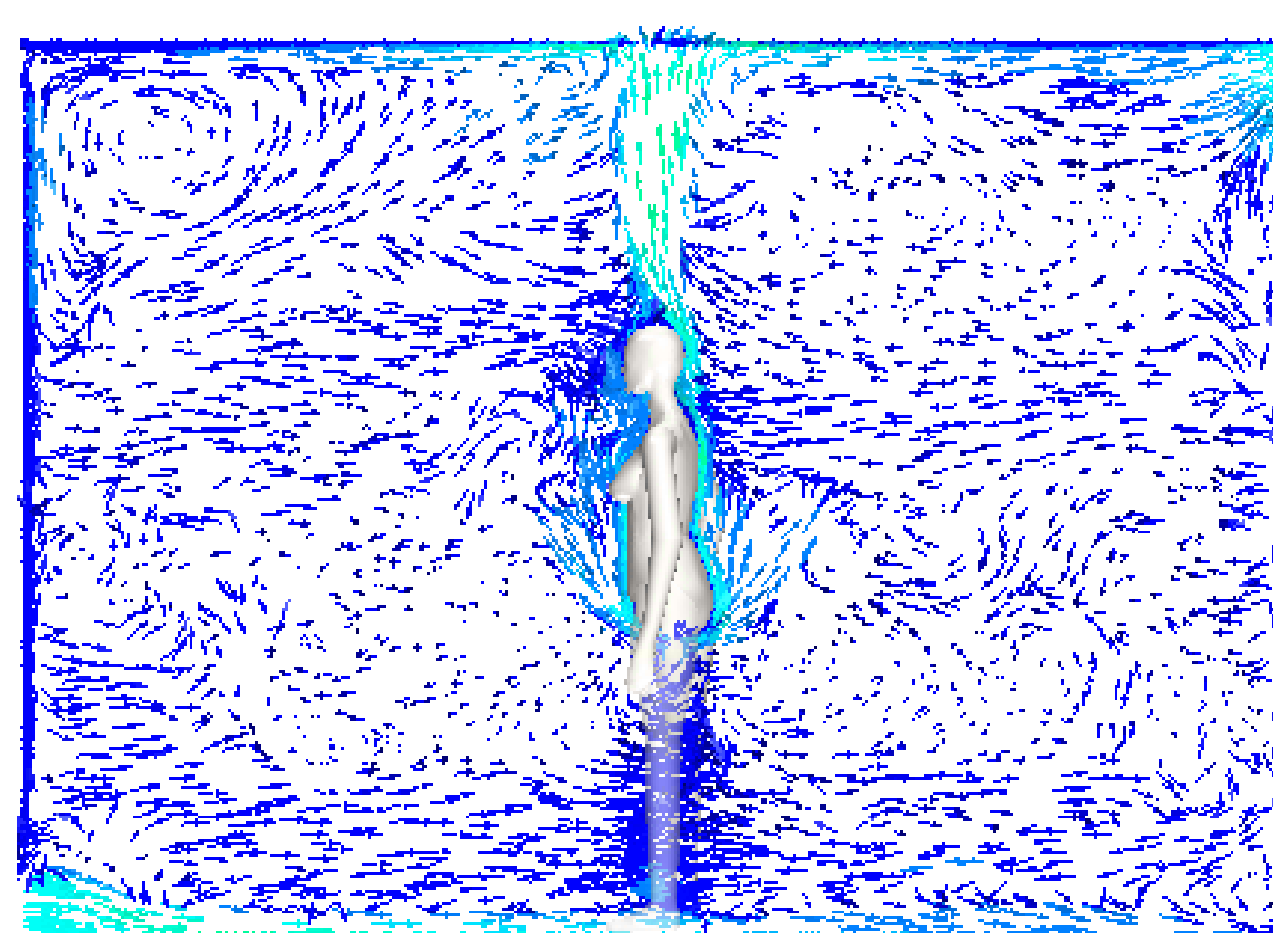
室内気流の解析結果



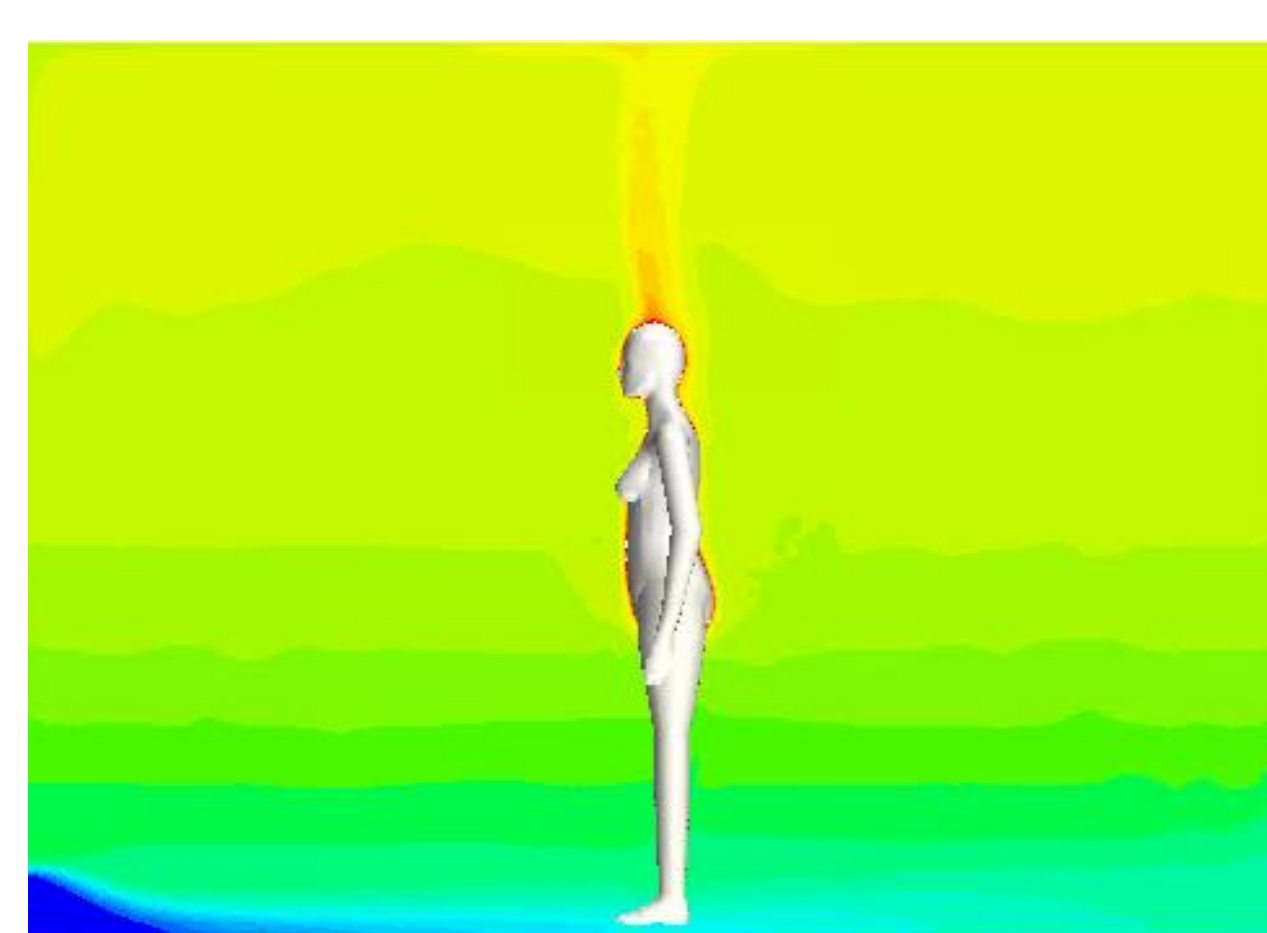
屋外気流の解析結果

対流放射連成法による室内環境解析

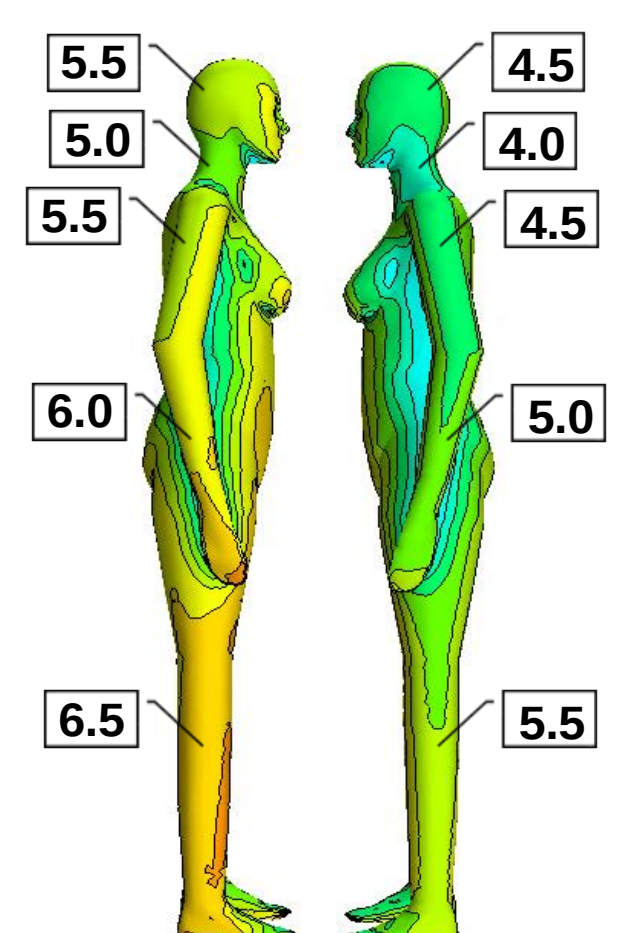
- ▶ 対流放射連成解析法により、周壁温度が人体周辺微気象に及ぼす影響を検討



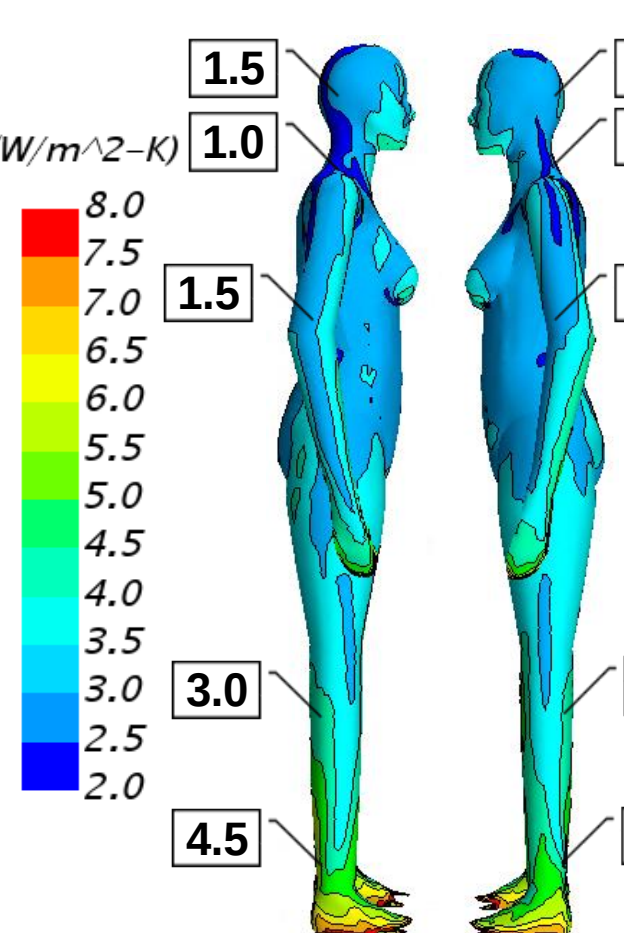
人体周辺風速分布



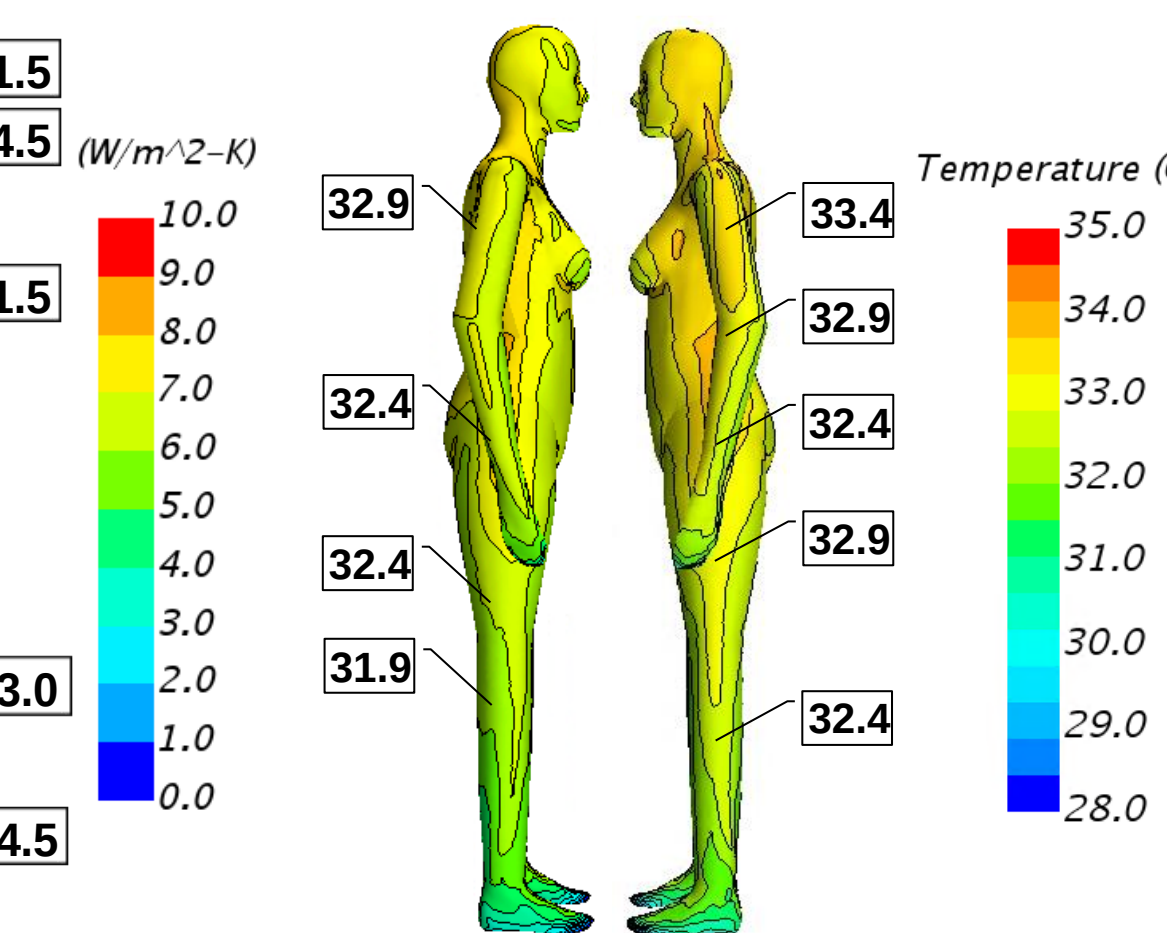
人体周辺温度分布



放射熱伝達率



対流熱伝達率

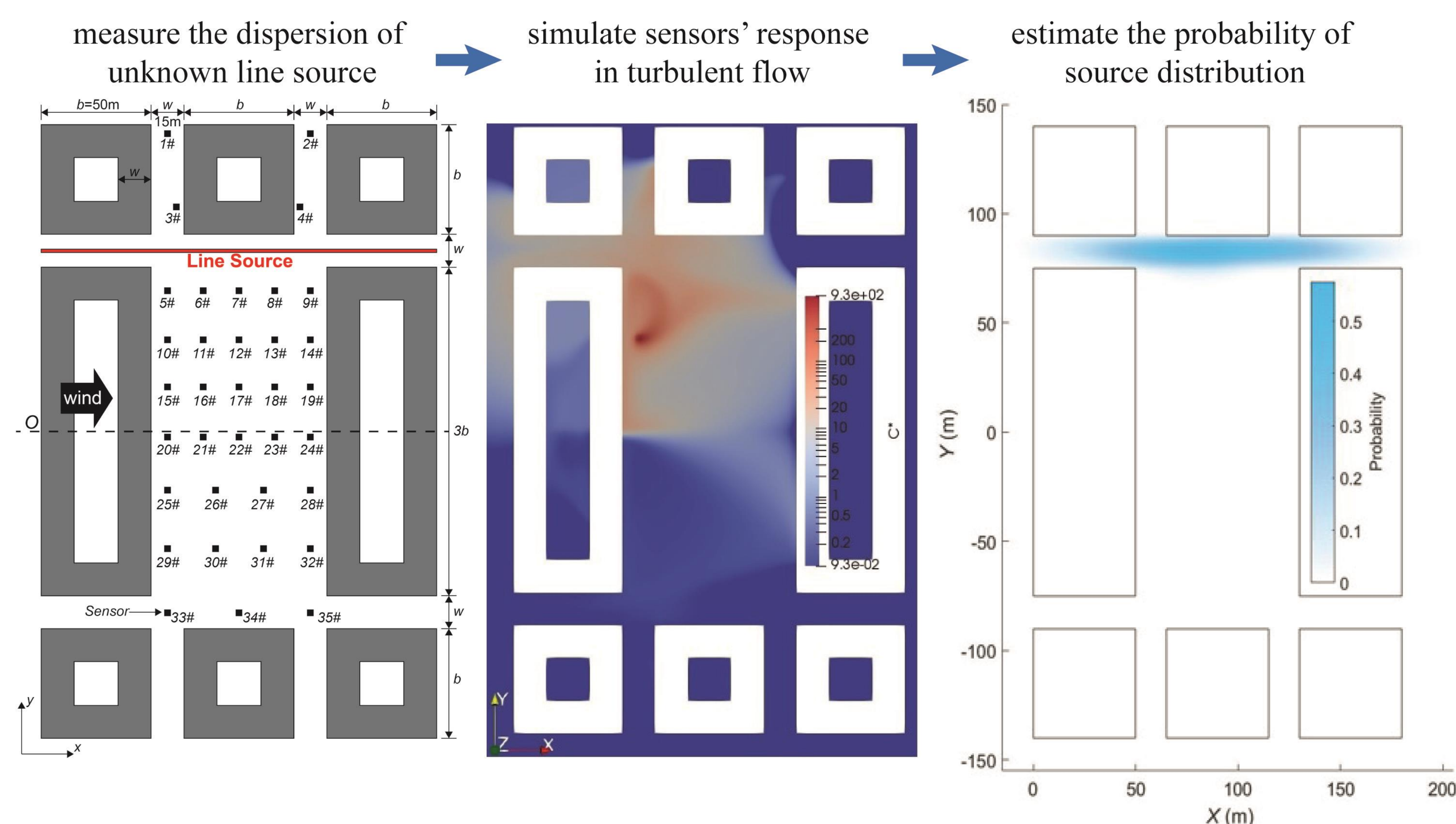


皮膚表面温度

シミュレーションとセンシングを融合した環境解析

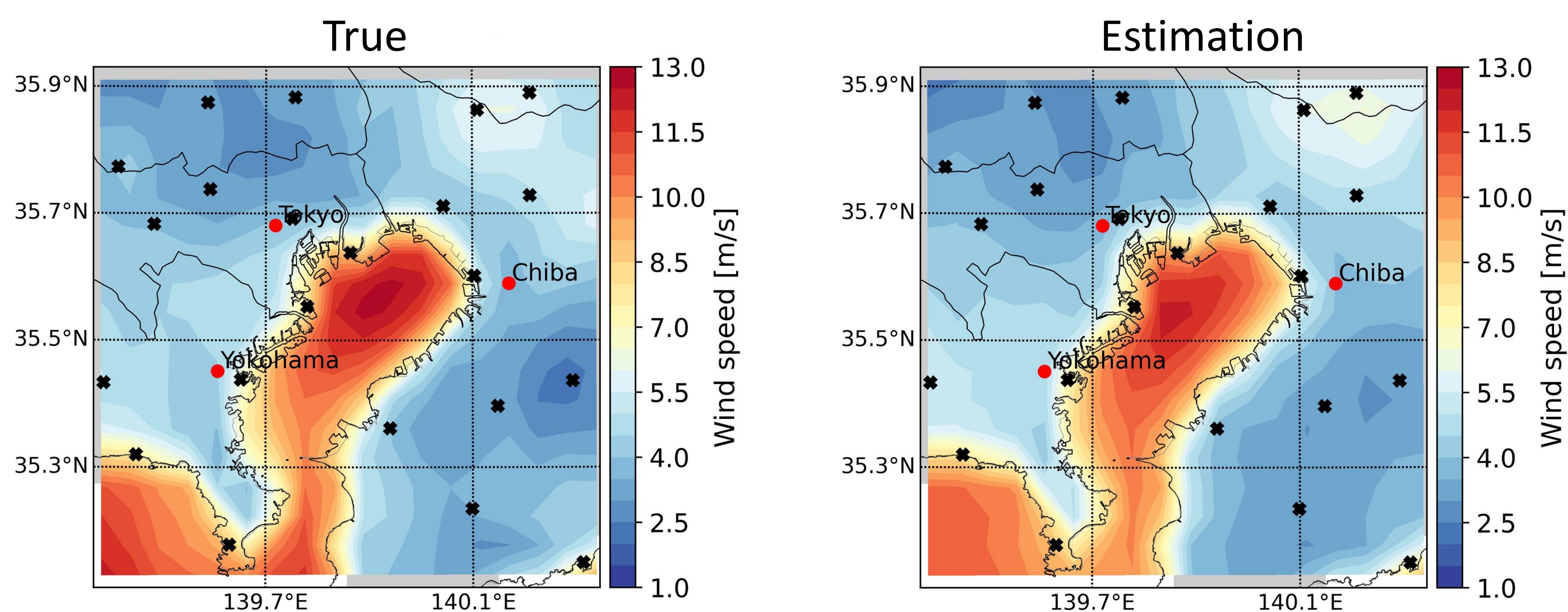
- 建築・都市空間における環境情報の高度化や解析効率化を目的とした研究を行っている。
- 主に空気の流れとその質に関して、シミュレーションやセンシング、またそれらを融合した解析技術を開発している。
- キーワード: 数値流体解析(CFD), 気象解析, 逆解析, データ・フュージョン, ベイズ推定, 機械学習

空気汚染物質の未知発生源同定



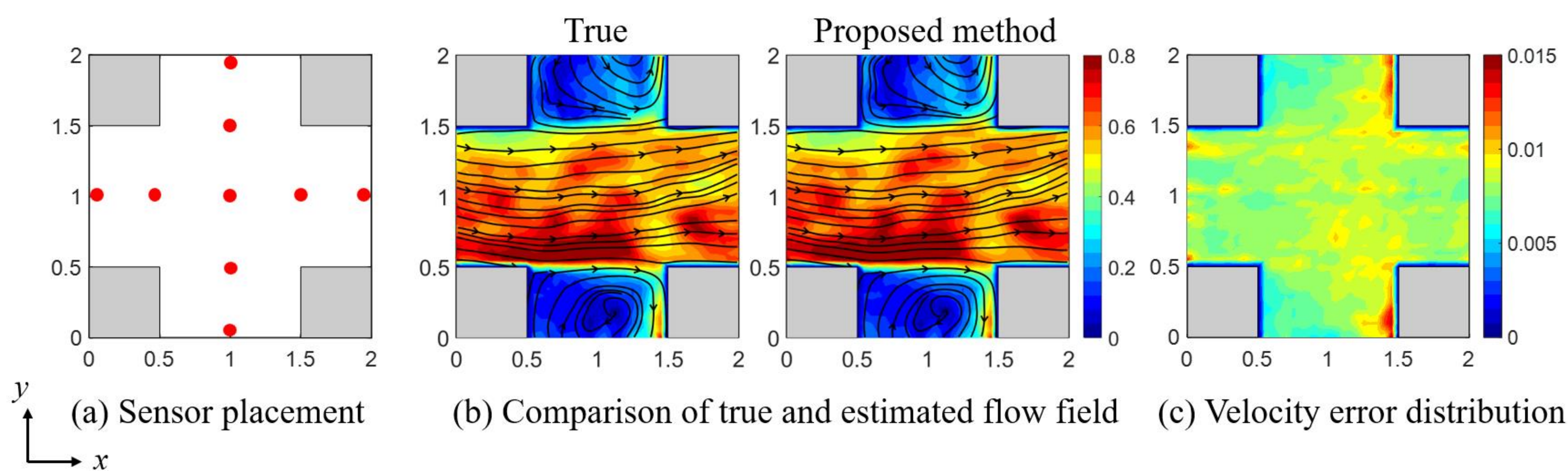
数値流体解析・計測データおよび統計解析(ベイズ推定)を応用した 市街地空間における汚染物質発生源同定

都市上空の長期風況分布の推定



局地客観解析データと観測データを融合した都市域の風速空間分布の推定(※は観測点)

都市内気流の迅速かつ高空間解像度な分布推定



数値流体解析・センシングデータと機械学習モデルによる市街地瞬時気流の分布推定



革新的シミュレーション研究センター

Center for Research on Innovative Simulation Software



佐藤文俊研究室

教授 佐藤 文俊

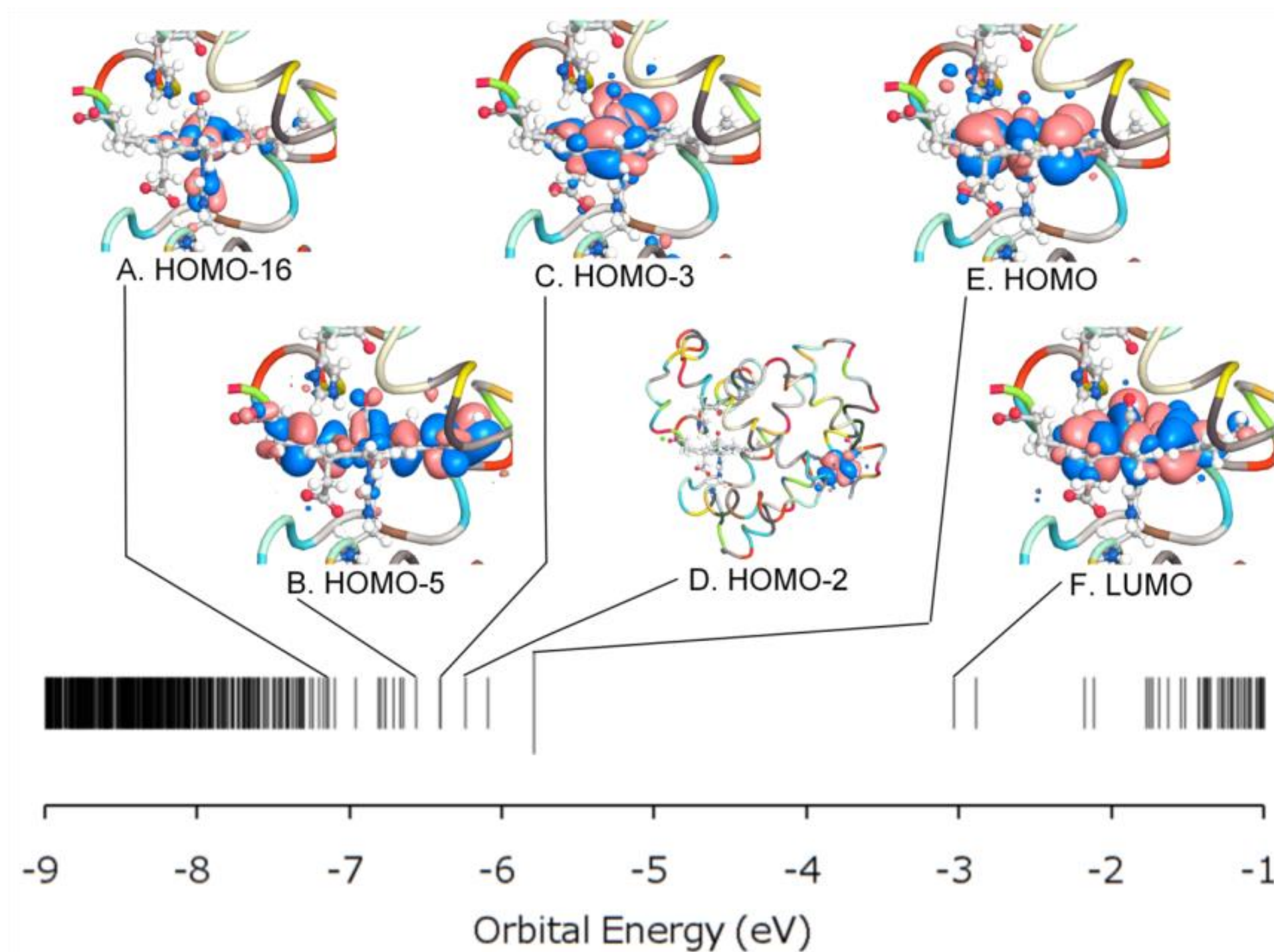
助教 平野 敏行

De-501-503

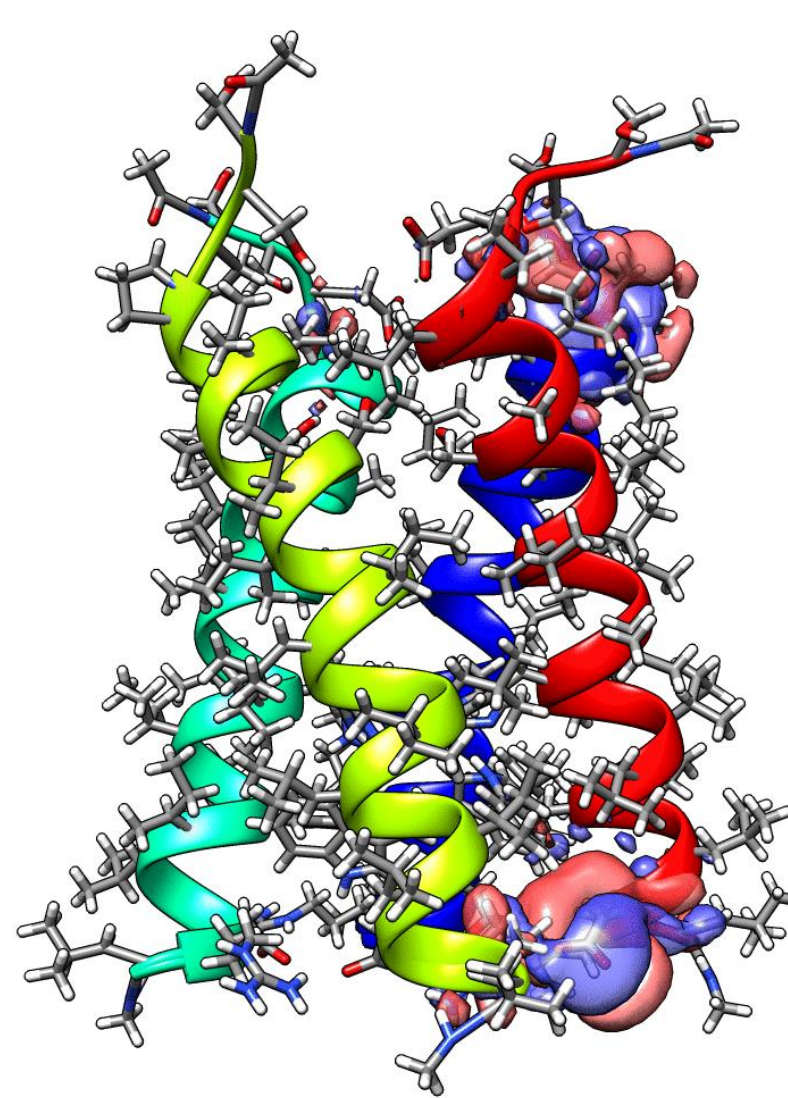
生体分子やナノ分子の革新的なシミュレーション

- 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)

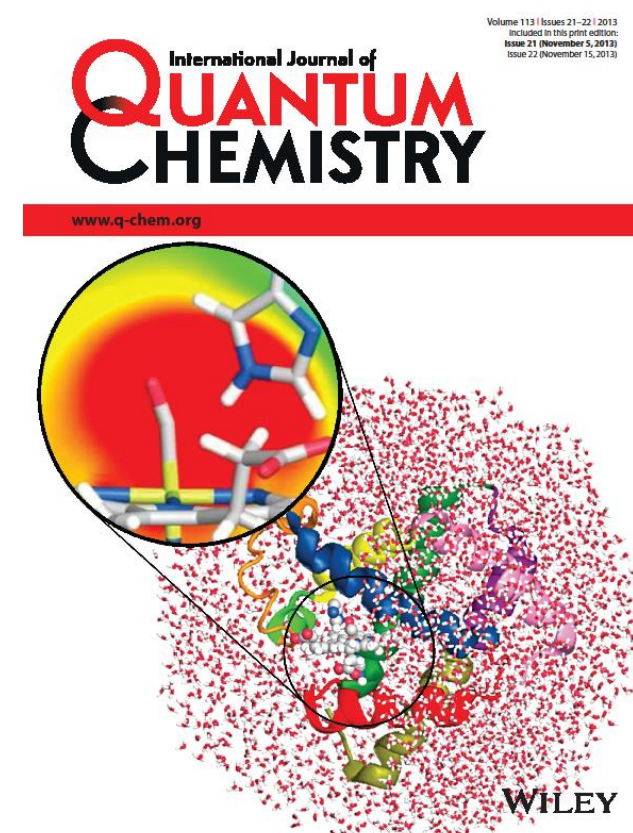
ProteinDFによるタンパク質全電子計算



金属タンパク質の全電子計算

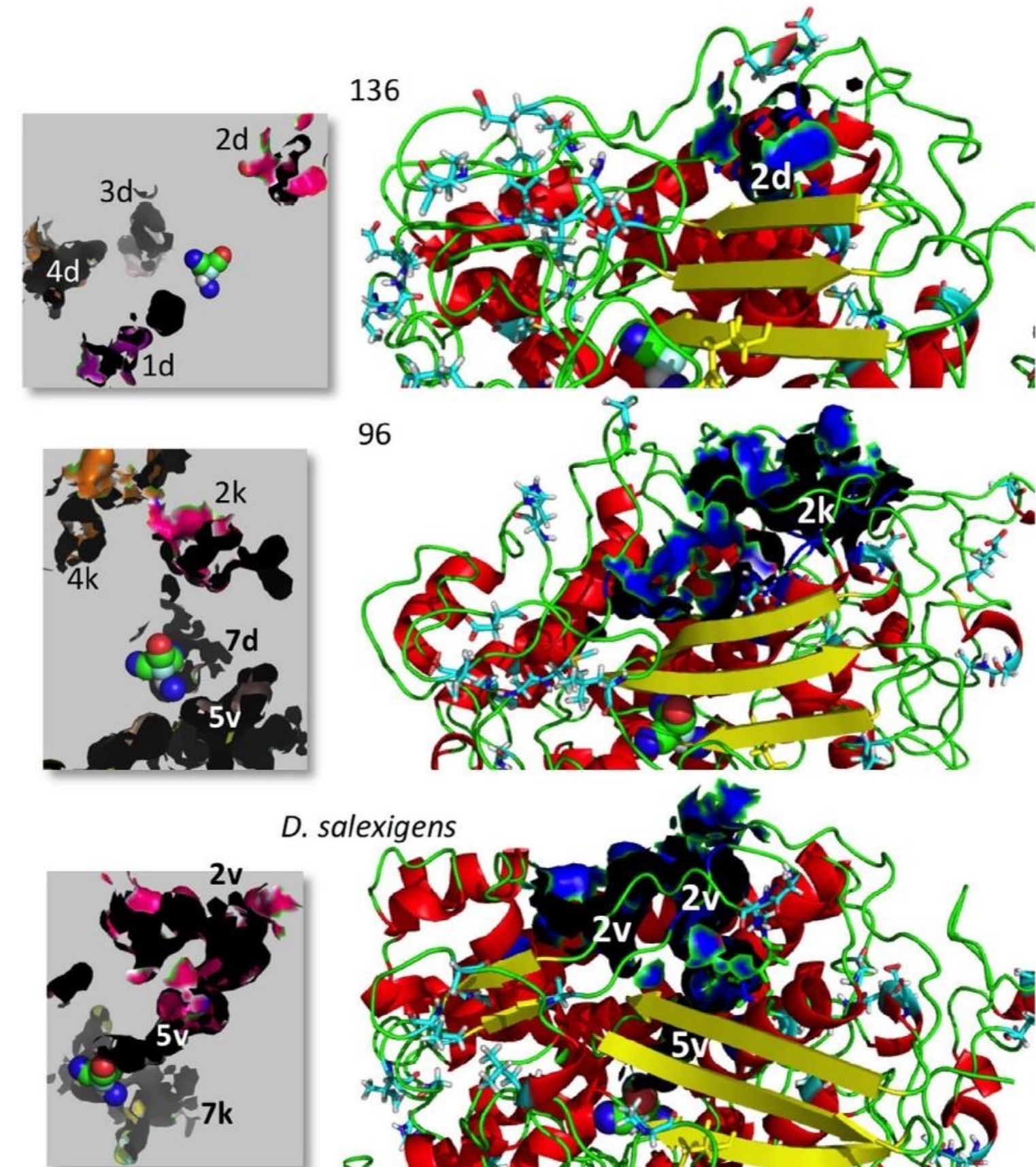


プロトンチャネルの第一原理MD

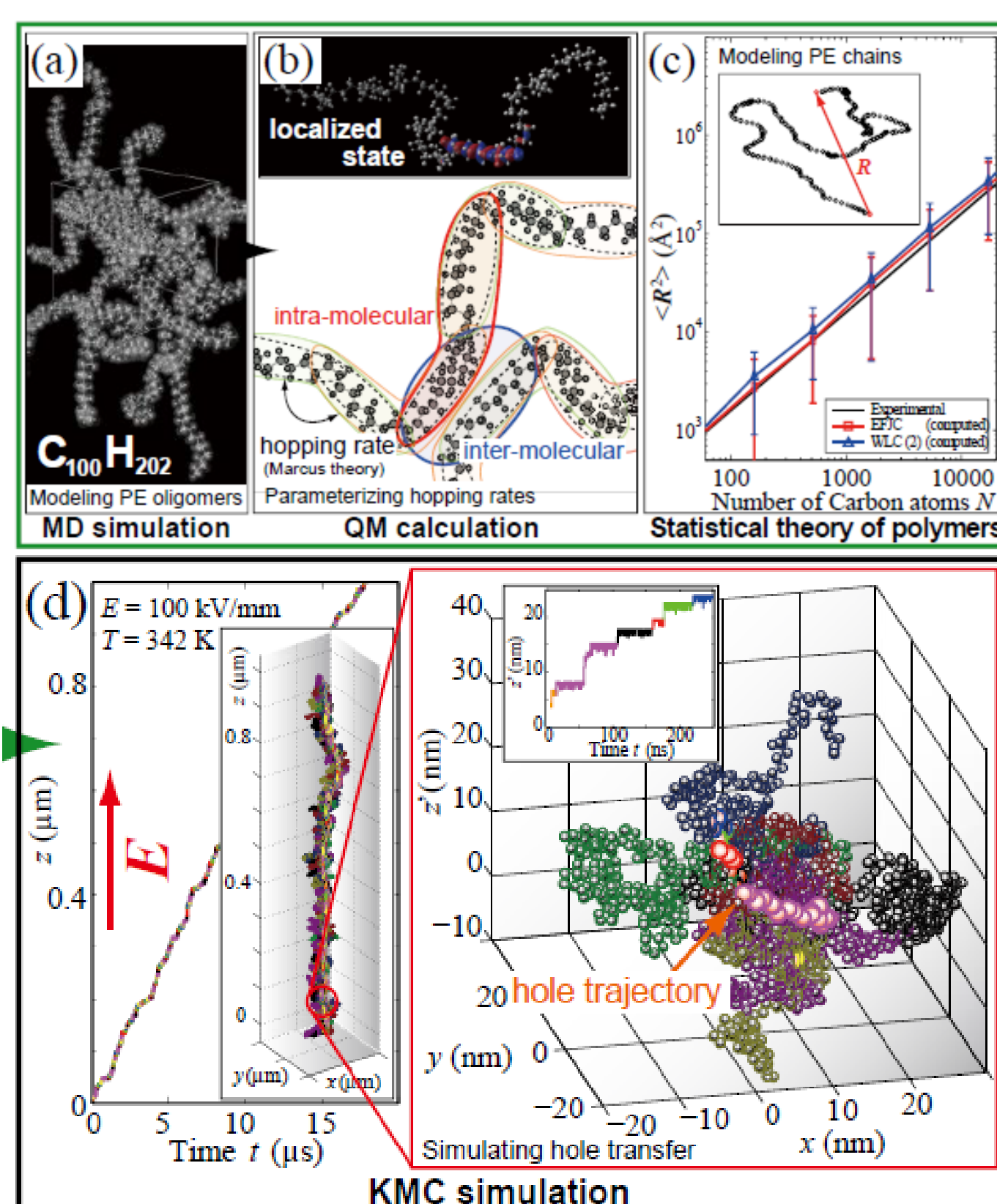


- T. Hirano, F. Sato, *PCCP*, 2014, **16**, 14496.
- K. Chiba, T. Hirano, F. Sato, M. Okamoto, *IJCQ*, 2013, **113**, 2345.

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



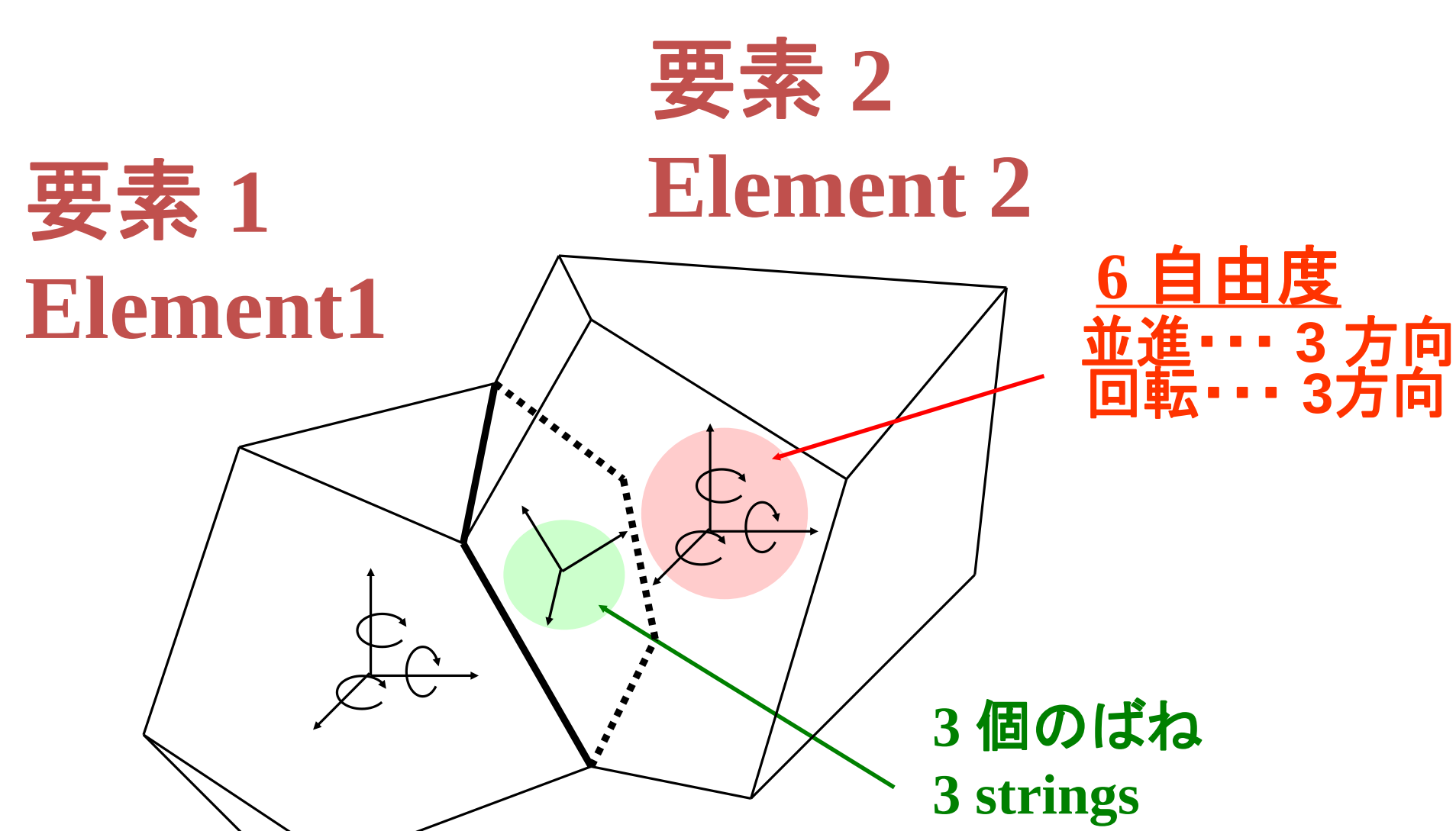
各種教科書あり

- 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.

鉄筋コンクリート構造の微細構造解析

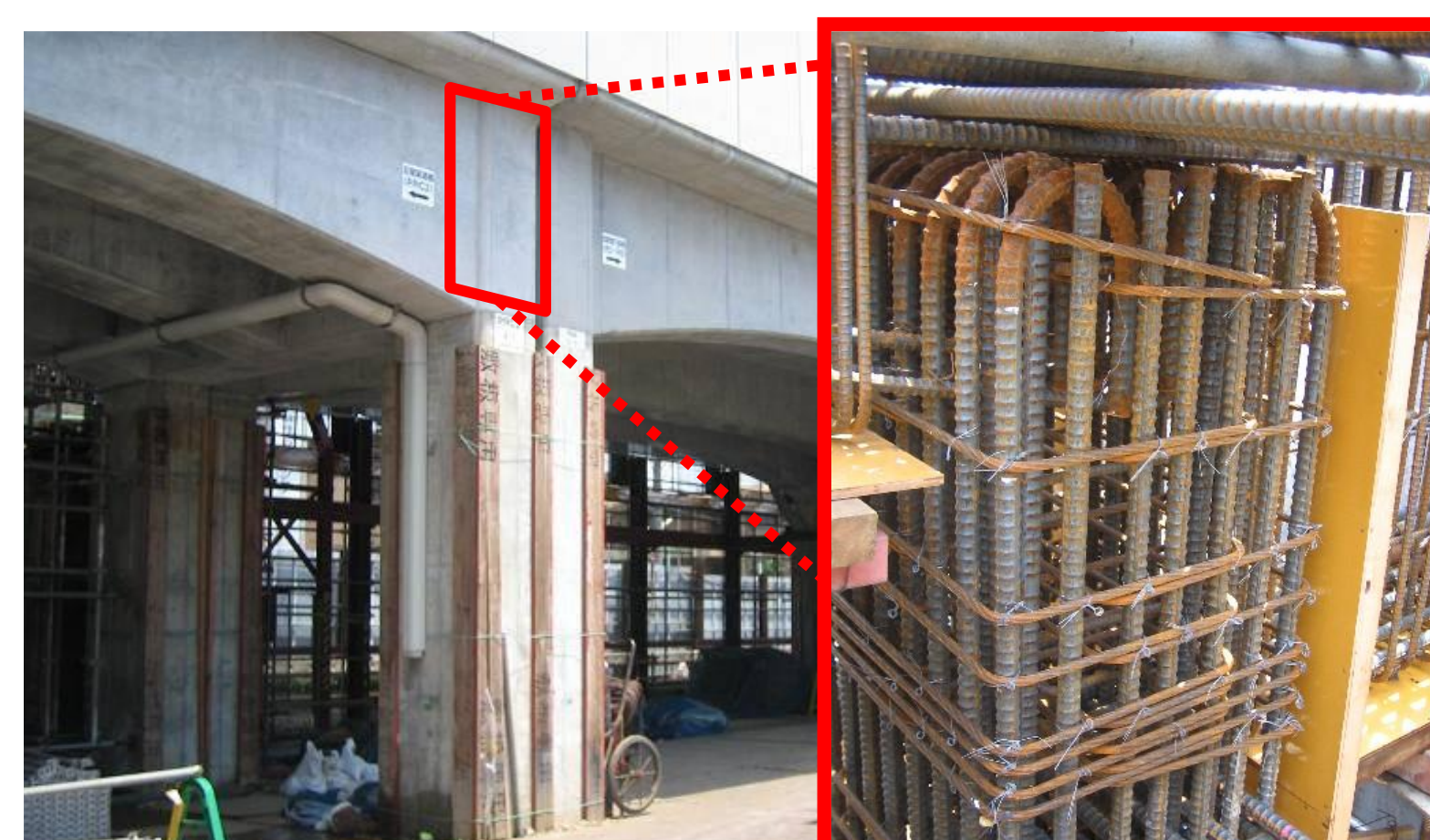
- 鉄筋コンクリートの微細構造解析による配筋の合理化
- 劣化した鉄筋コンクリートの残存構造性能評価

鉄筋コンクリートの微細構造解析による配筋の合理化



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

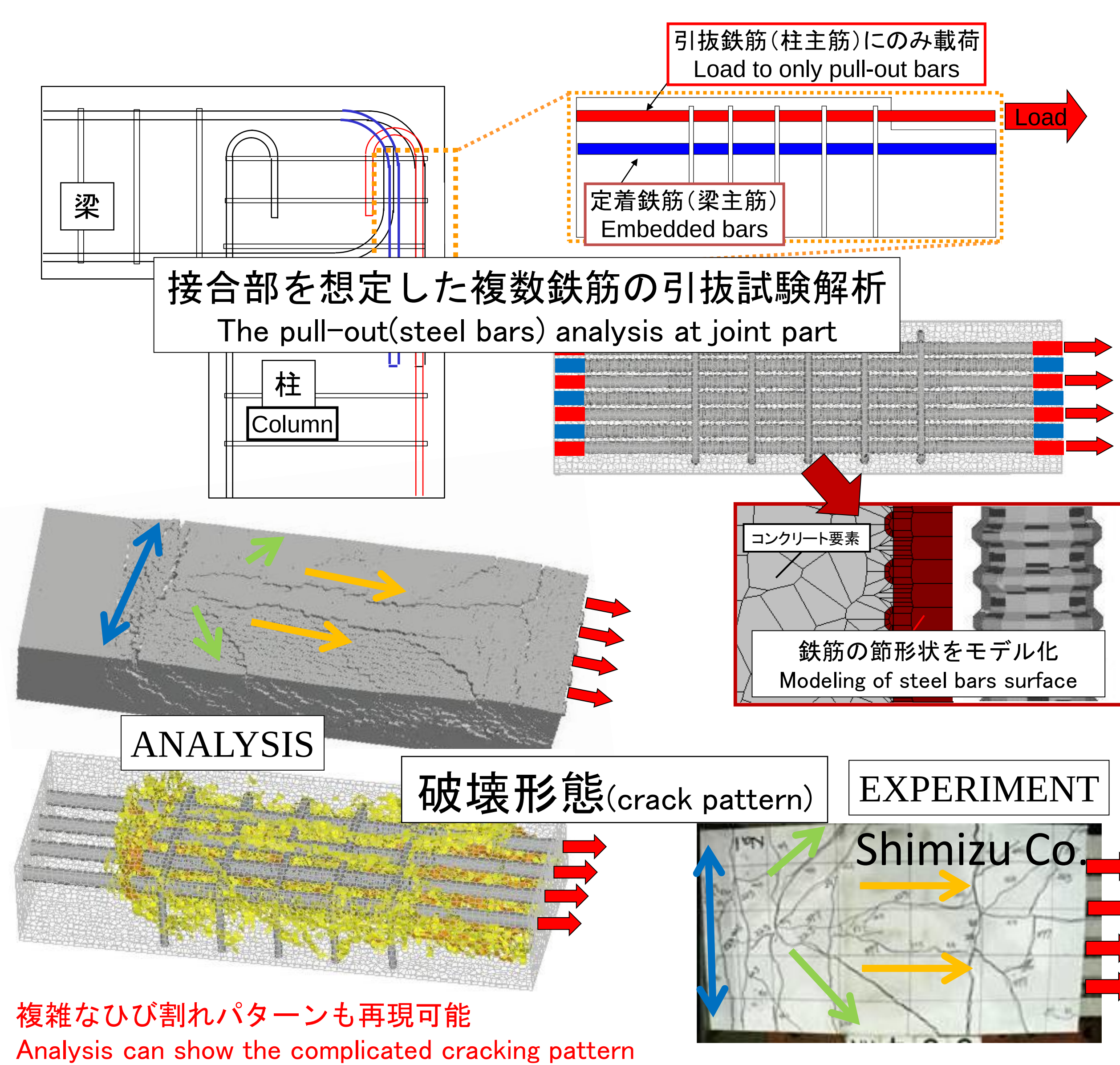
鉄筋の組み上げ時間の増加

コンクリート未充填による施工不良の危険性

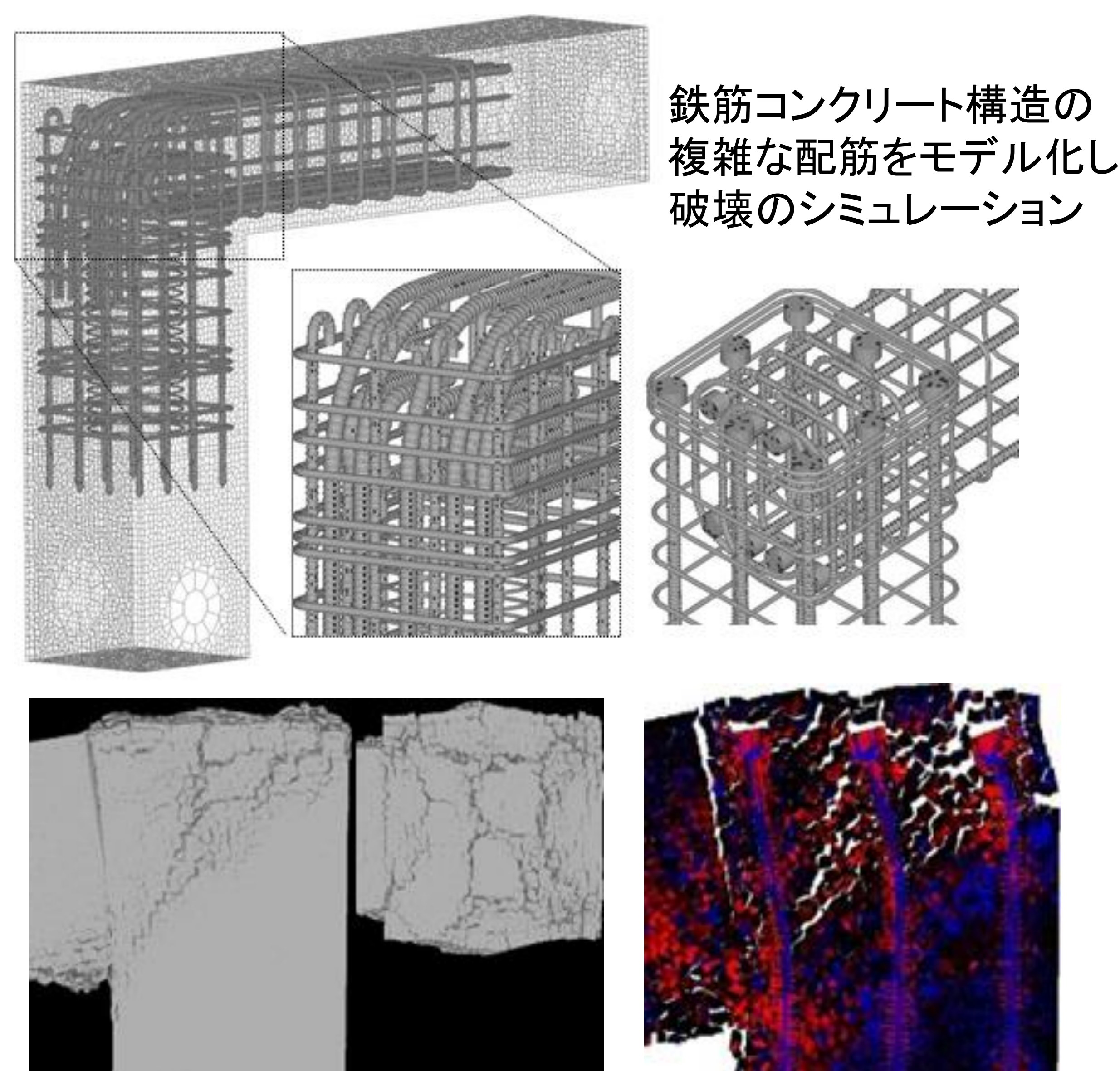
複雑に鉄筋が配置された領域での応力状態は不明

➡ 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拔挙動

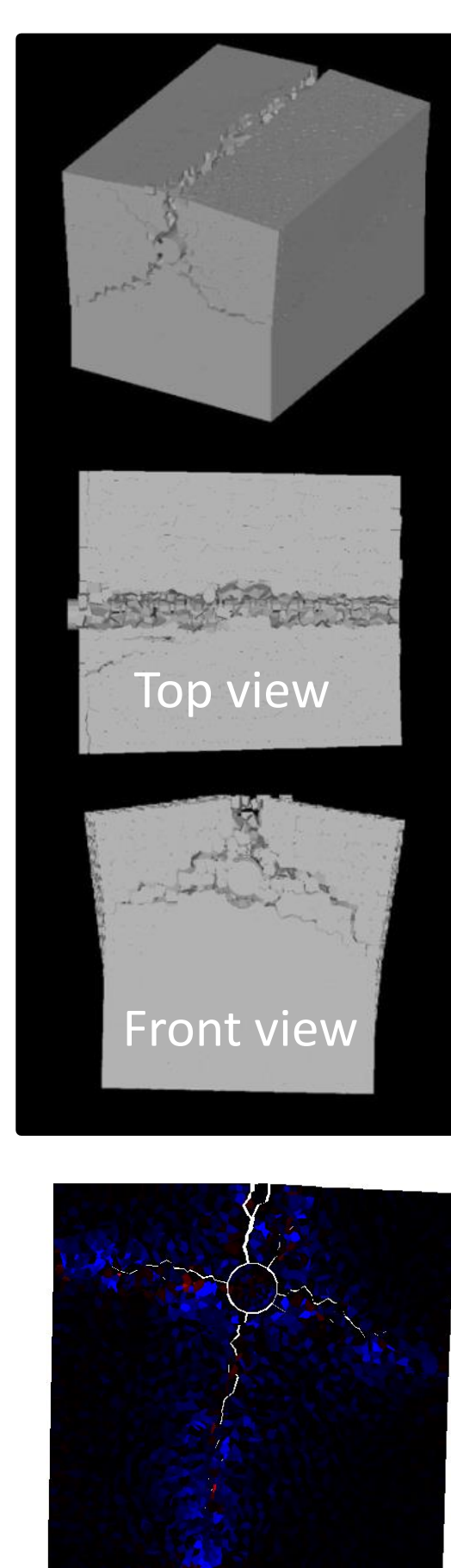
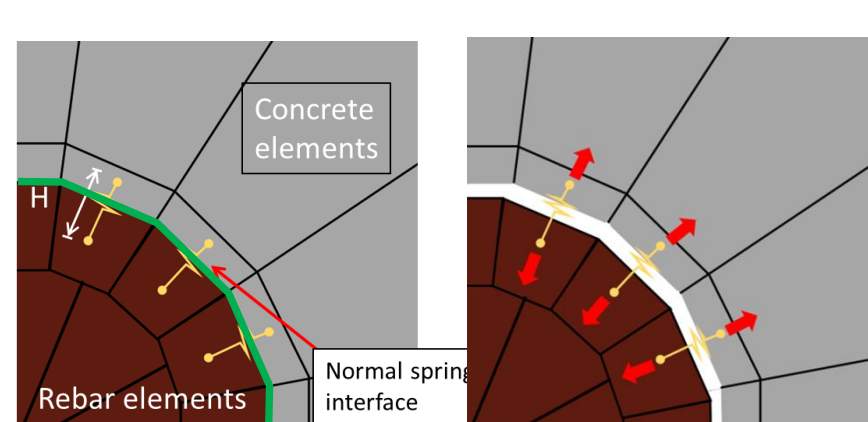


柱梁接合部の破壊シミュレーション

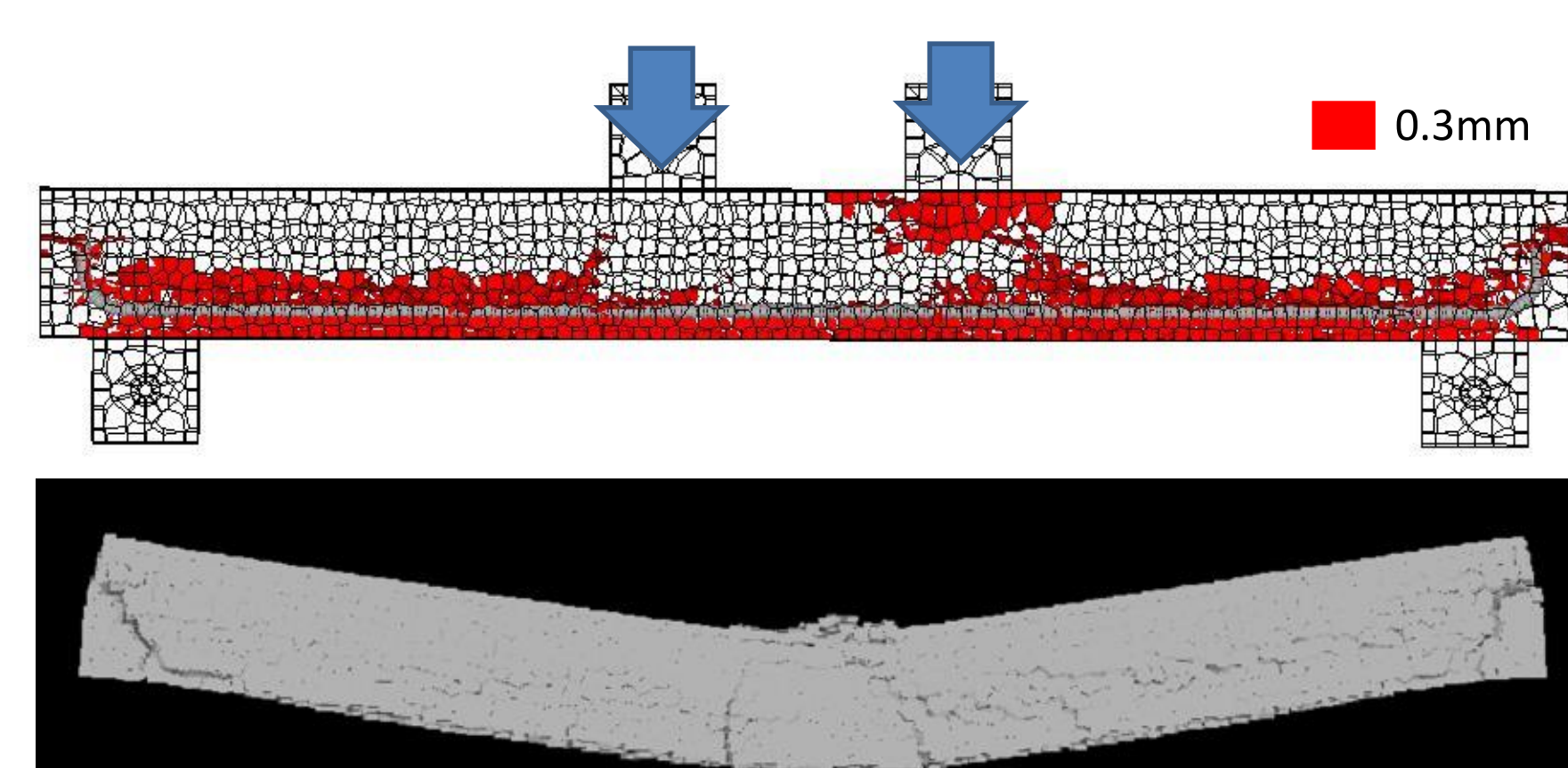
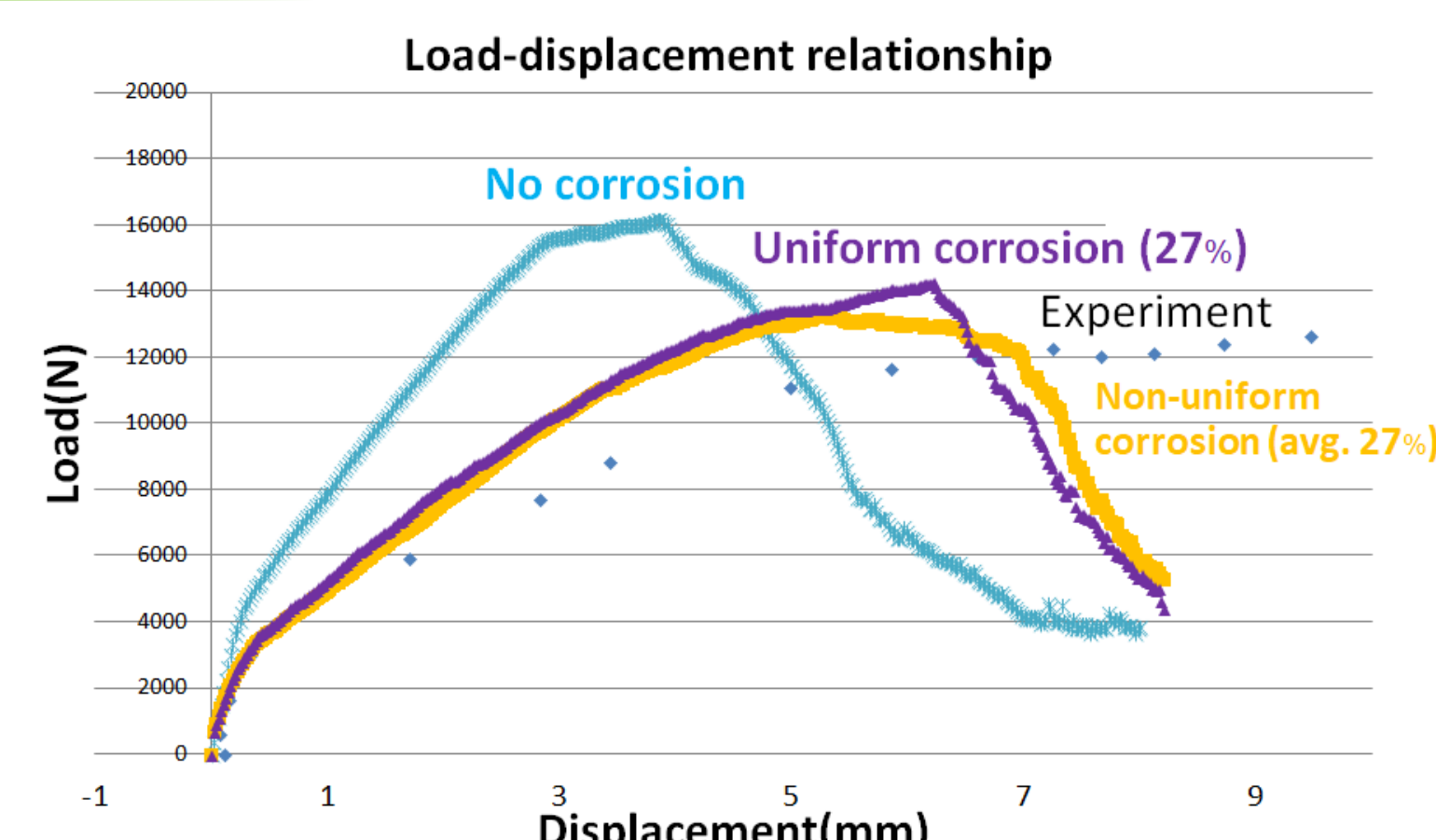
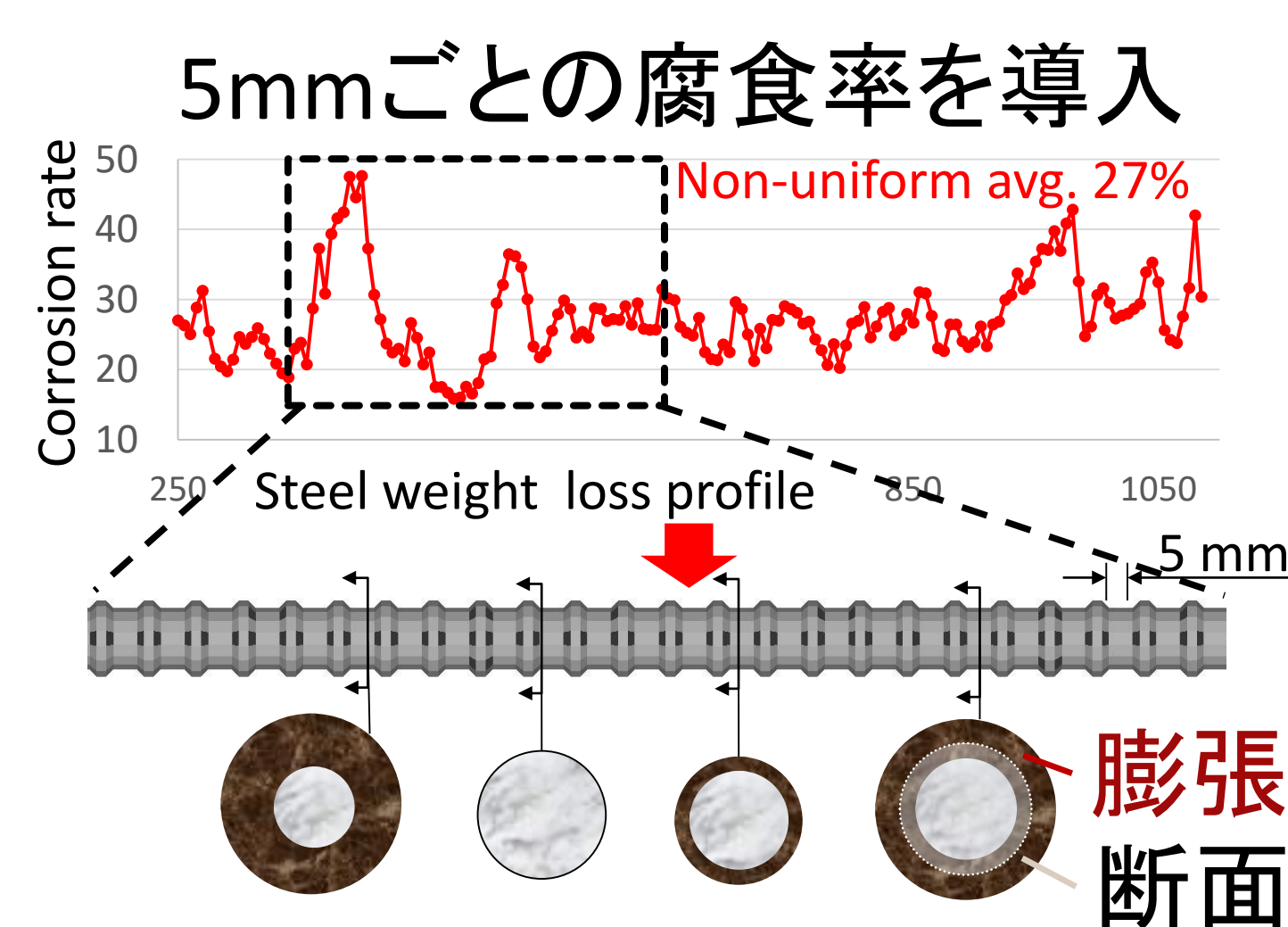
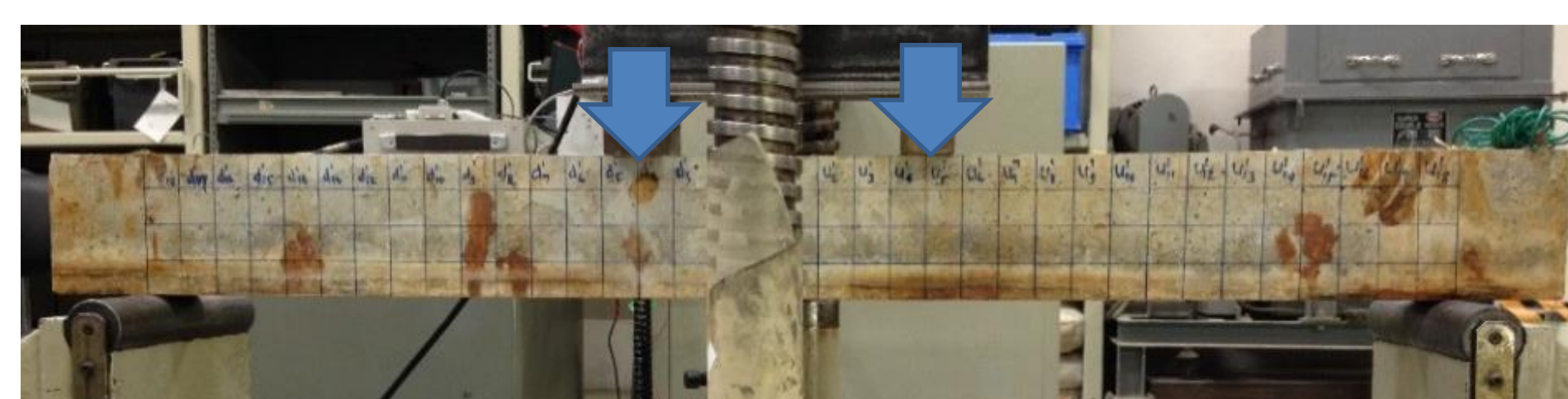


劣化した鉄筋コンクリートの残存構造性能評価

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載荷試験 (Y. Akiyama)



腐食による損傷導入後の載荷

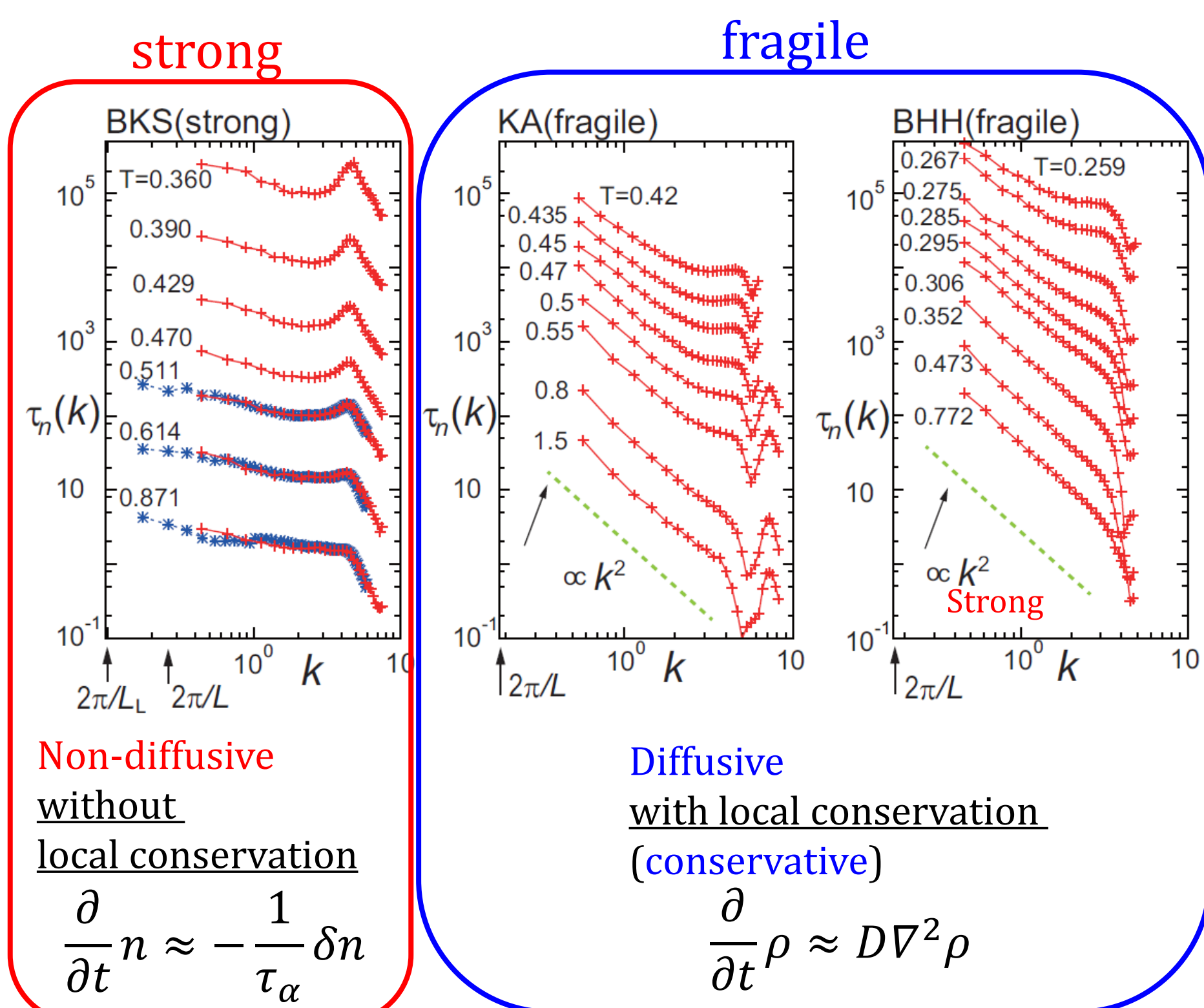
複雑流体の非線形・非平衡現象

- ガラス・アモルファス物質のスローダイナミクス、非ニュートンレオロジー
- コロイド、粉体、バクテリア懸濁液における流体力学的相互作用の役割

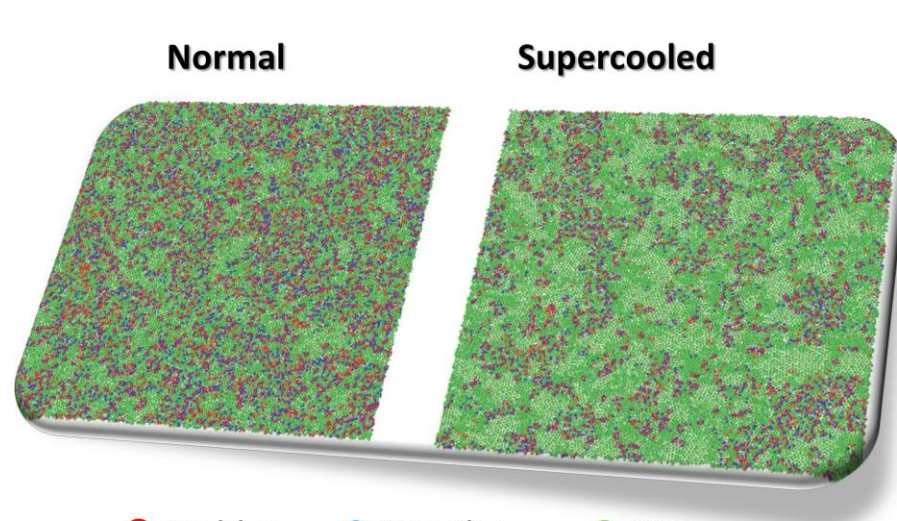
ガラス・アモルファス物質のスローダイナミクス、非ニュートンレオロジー

過冷却液体の密度緩和時間の波数依存性:

ガラス形成液体は“strong”と“fragile”の異なる動的クラスに大別されるが、密度揺らぎの緩和ダイナミクスには、これらの動的クラスに本質的な差異が現れる。



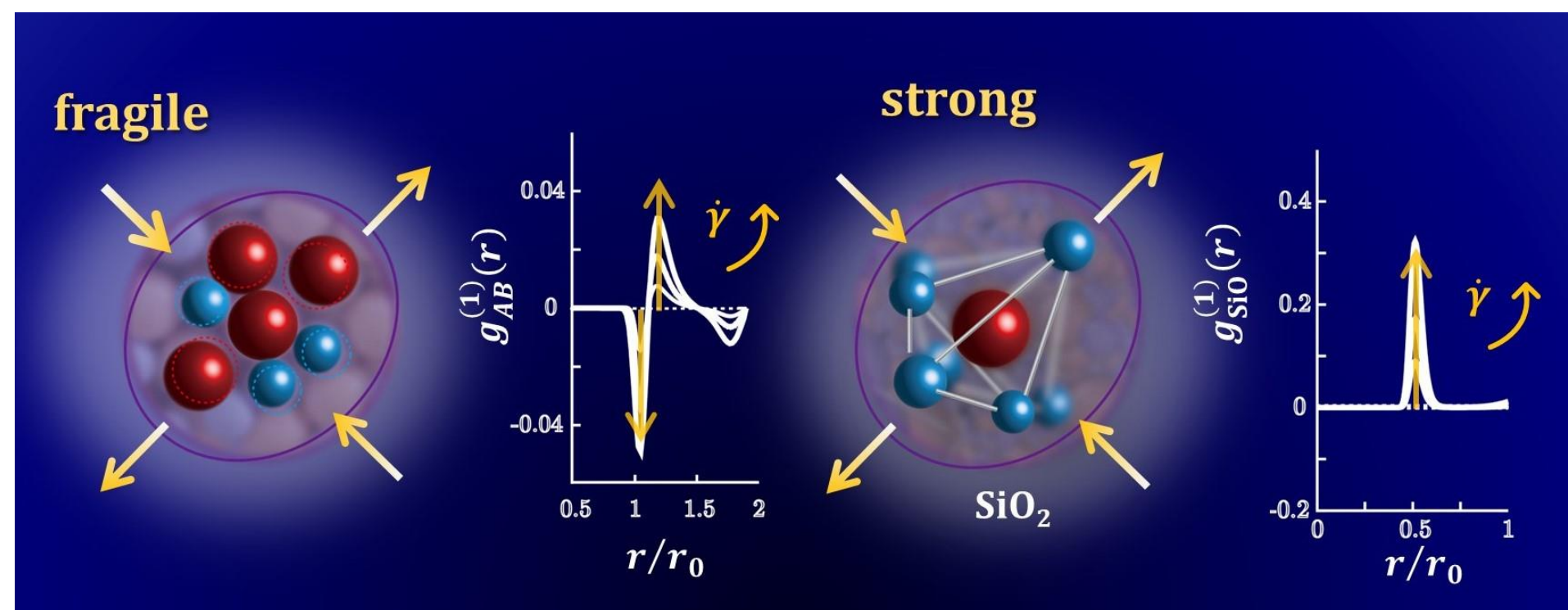
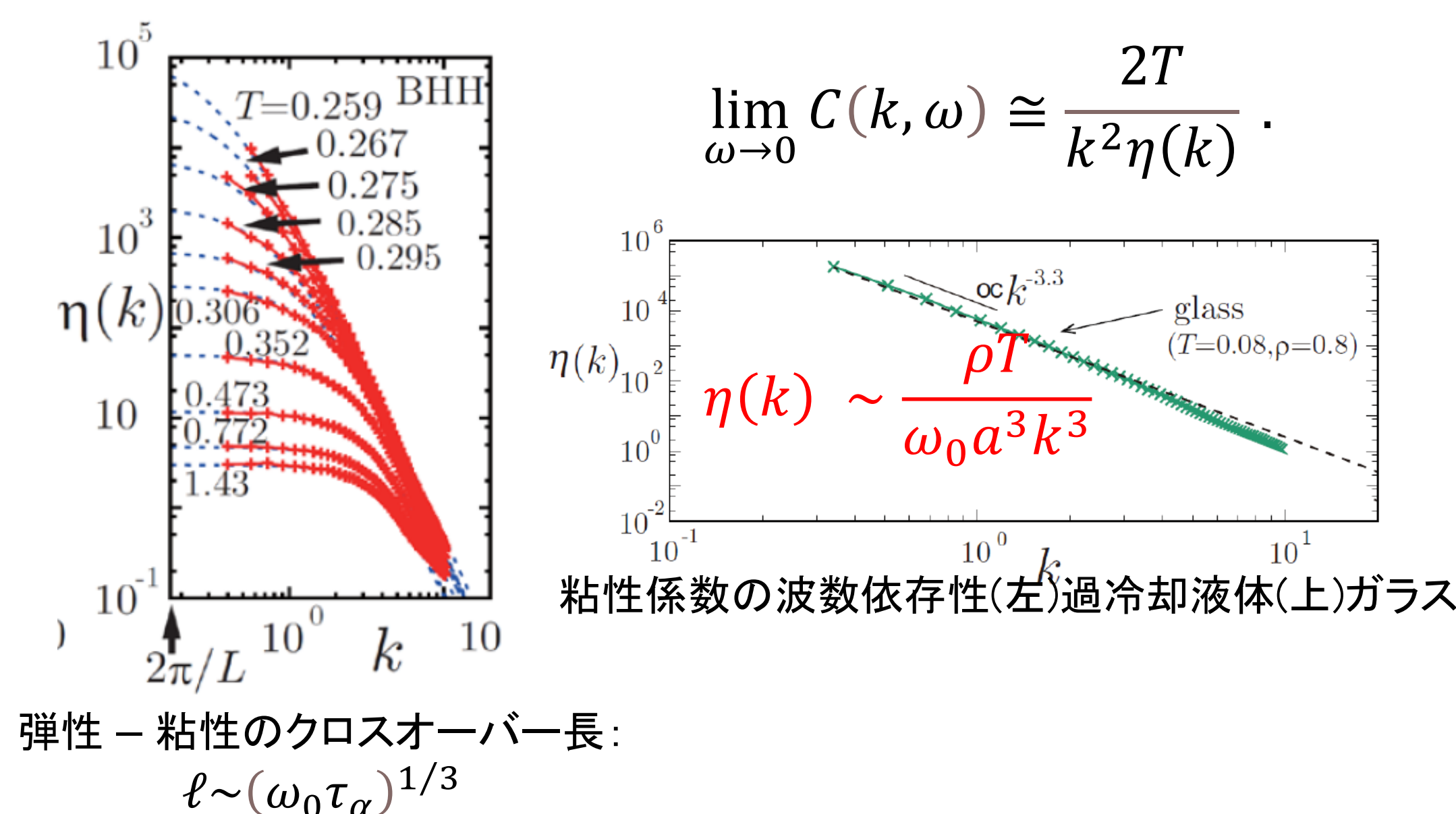
fragile液体では、協同的な密度交換を観測する。



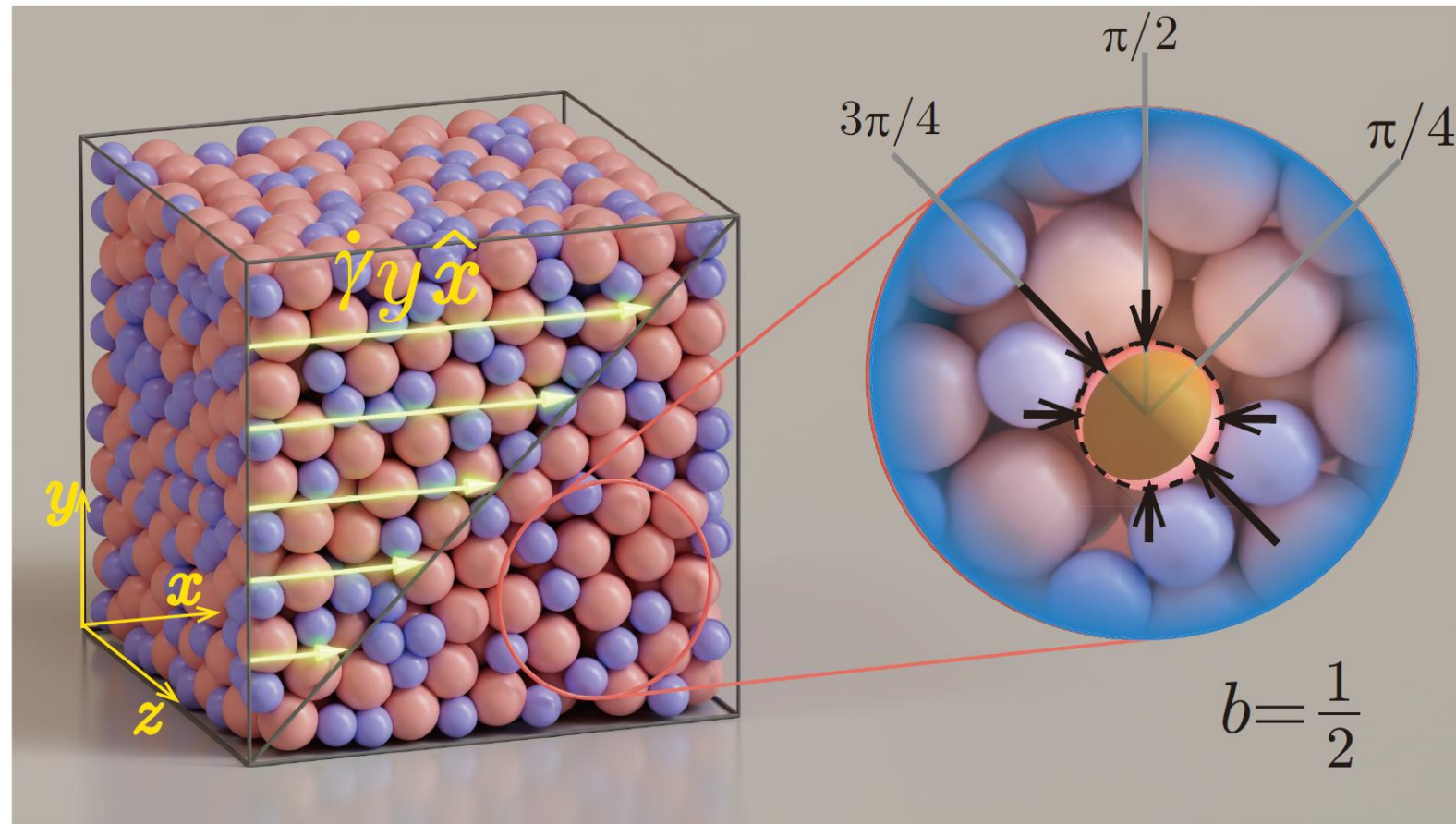
密度交換イベントの協同性 (左)ノーマルな液体(右)過冷却液体

過冷却液体、ガラス粘性の波数依存性:

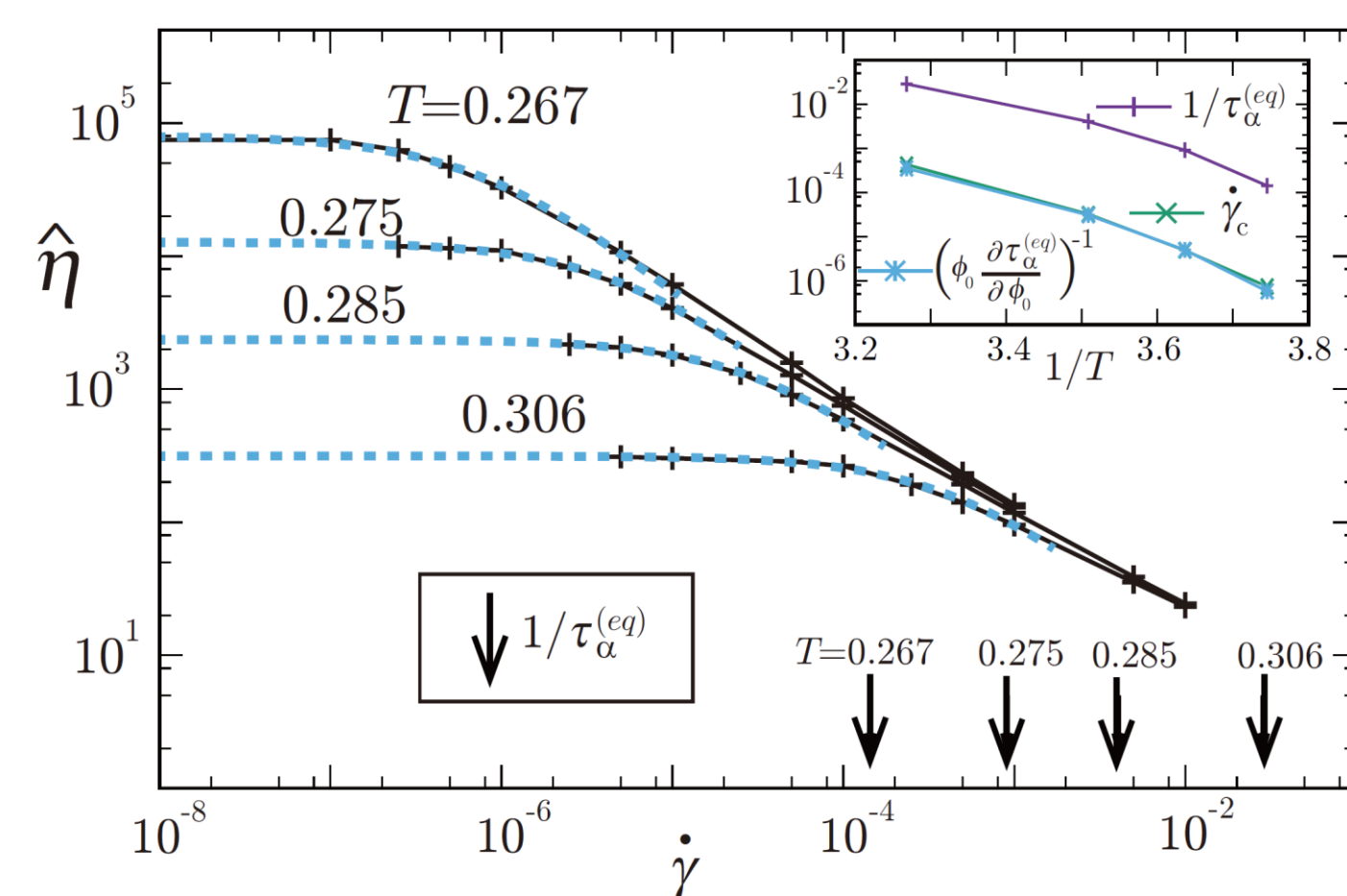
深く過冷却された液体やガラスでは、緩和時間より短い時間スケールにおいて大きな物質の流れは起こらない。このような場合、運動量場の微小なランダム対流に起因する(横方向)粘性散逸メカニズムが支配的となる。



単純剪断流れ下の粒子配置: フラジイル液体(左)、ストロング液体(右)。構造緩和における密度の役割の違いに起因して、粒子配置のレオロジー応答は定性的に異なる



剪断流れ下のフラジイル液体における有効体積 (概念図)

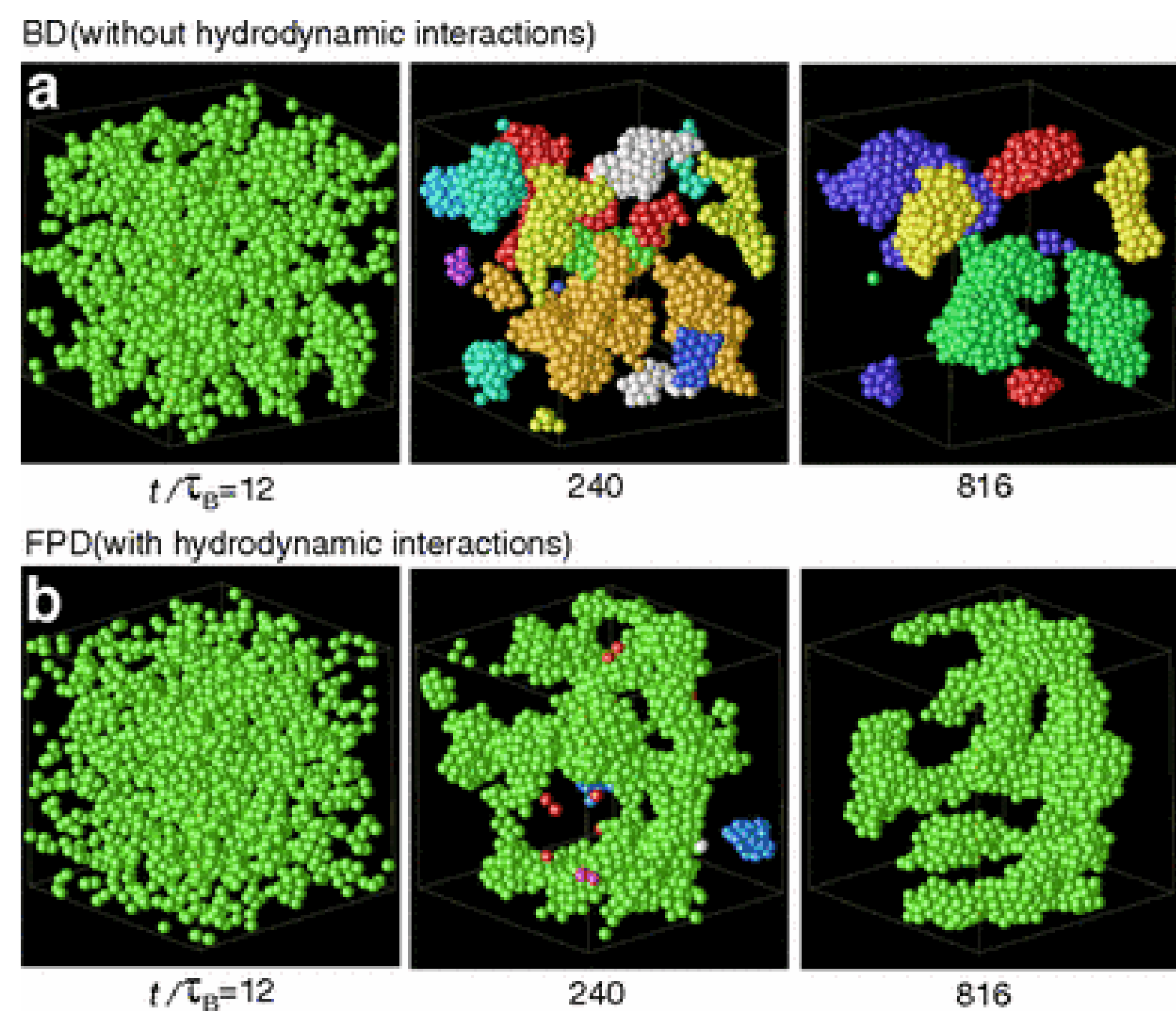


シミュレーションにより得られたレオロジー曲線(上): ほとんどすべてのガラス形成液体において、非ニュートン性のオンセットにおいて、 $Pe \ll 1$ である。フラジイル液体の場合、このようなレオロジー曲線は、以下の理論式と定量的に一致する。

$$\hat{\tau}_\alpha(n, T, \dot{\gamma}) = \tau_\alpha^{(eq)}(n(1 - c_g \dot{\gamma} \hat{\tau}_\alpha), T)$$

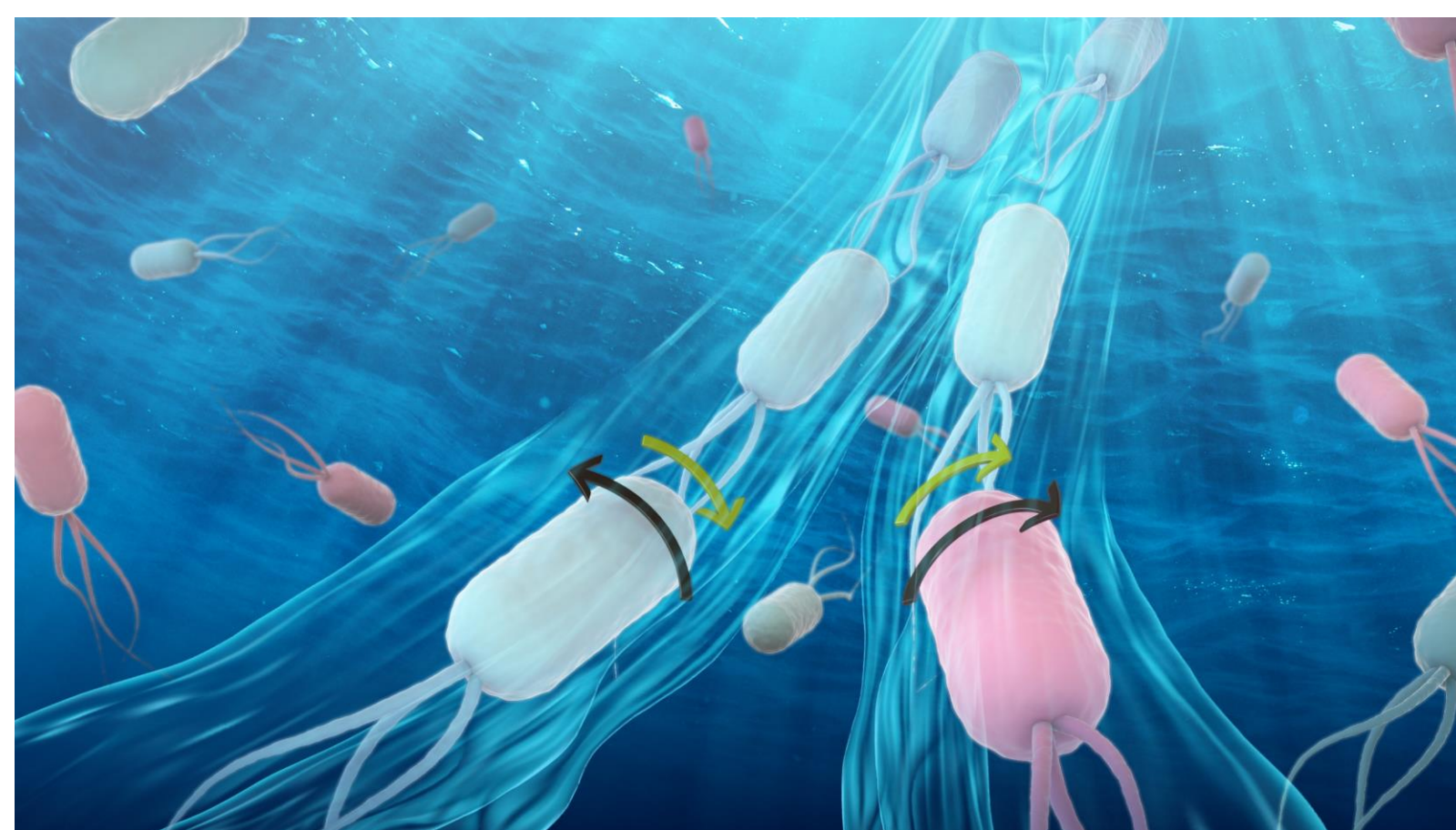
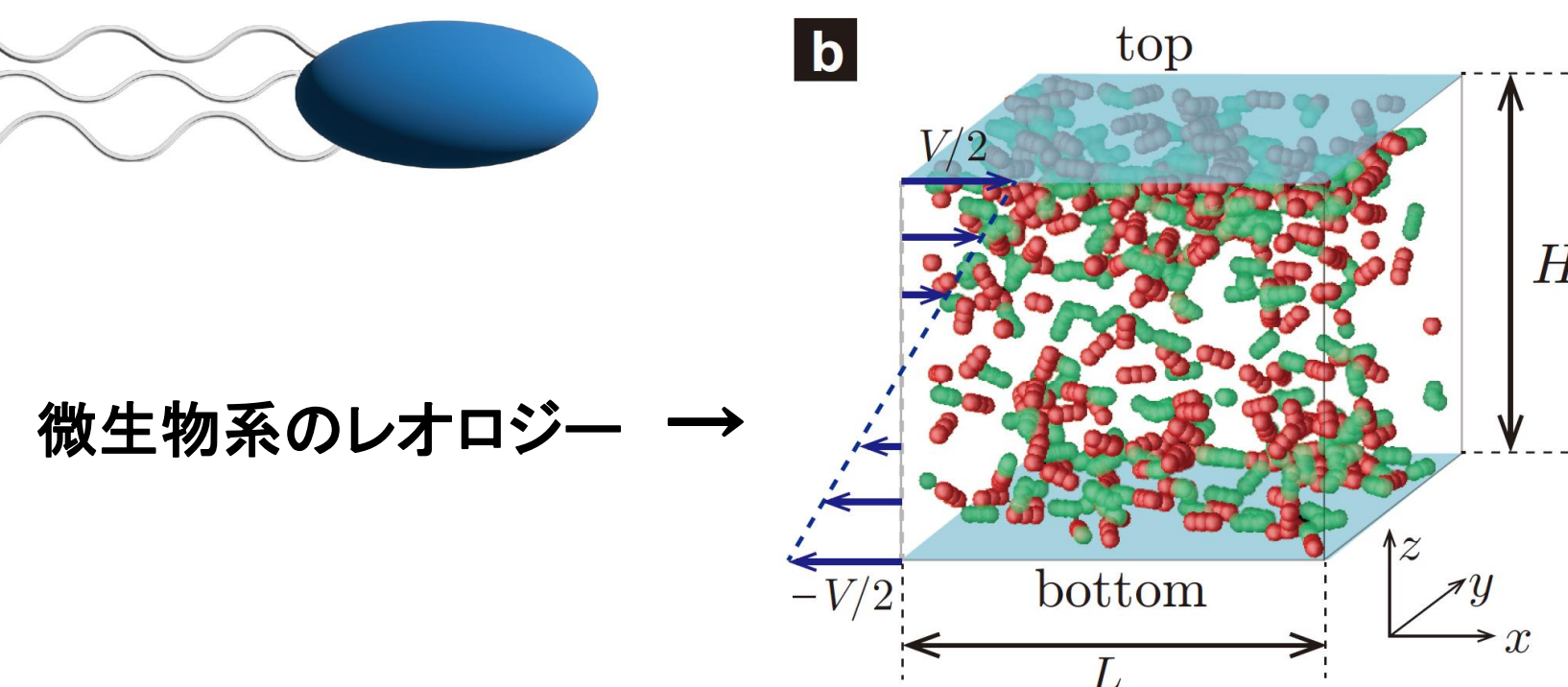
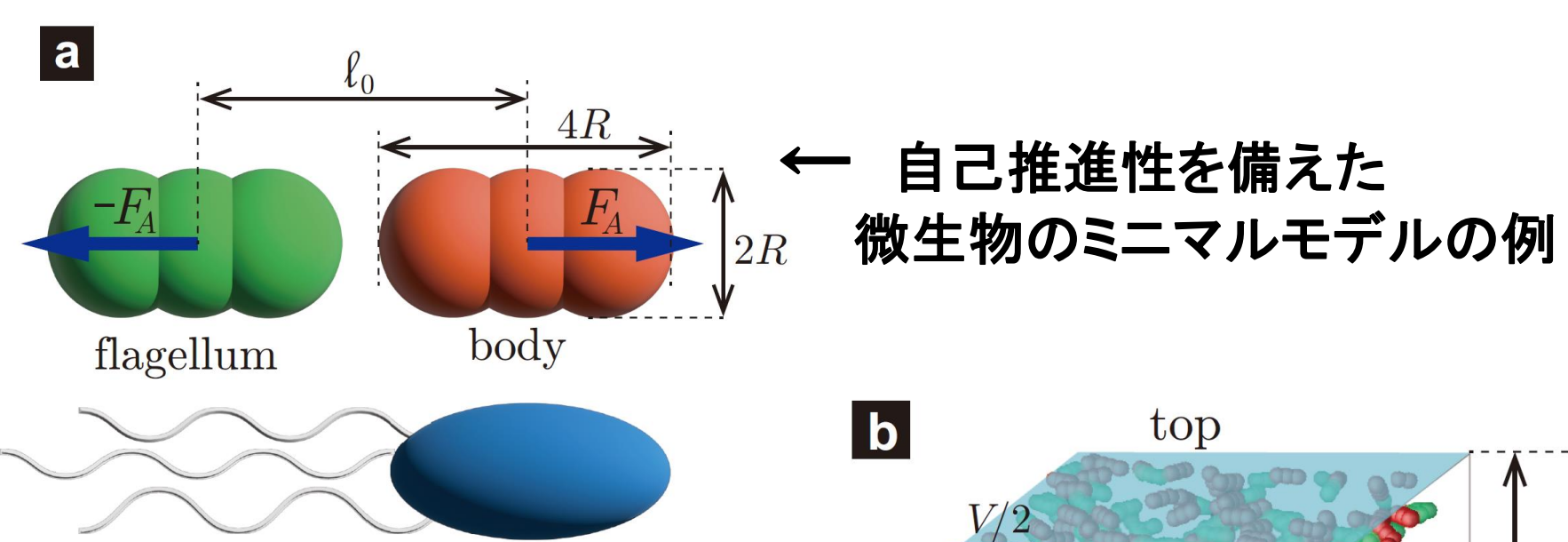
コロイド、粉体、バクテリア懸濁液における流体力学的相互作用の役割

流体中に分散して存在するコロイド、粉体、バクテリア系では、流体力学的相互作用が輸送やレオロジー特性を理解する鍵となると考えられている。この流体力学的相互作用の役割にフォーカスし、複雑な非平衡現象のメカニズム解明を目指している。



コロイド懸濁液のゲル化における流体力学的相互作用の役割: 流体力学的相互作用なし(上)と流体力学的相互作用(下)

粉体懸濁液における溶媒散逸の空間相関: 面積分率 $\phi=0.27$ (上), 0.64 (下) 高濃度、低剪断率ほど長距離の空間相関が出現する



流体力学的相互作用による泳動状態の決定(概念図): 流体力学的相互作用を介して、バクテリアの泳動方向が決定される。これにより、懸濁液の粘性は減少する。