



東京大学生産技術研究所
革新的シミュレーション研究センター

平成 25 年度
活動報告

Vol. 6

はじめに

計算科学シミュレーションは、21 世紀において最も発展が期待される分野の一つであり、2013 年 4 月にはスーパーコンピュータ「京」の 100 倍の能力を持つエクサスケールの計算機の研究開発に関する議論が本格化しました。しかし、エクサスケールの計算機環境に対応する、先端的でかつ実用的なシミュレーションソフトウェアを研究開発することには多大な困難が伴うことが予想されています。全く新規の発想に基づくソフトウェアの開発が必要になる分野も多くあるものと思われますし、非常に大規模な解析結果をどのようにハンドリングするかということもこれまで以上に重要な課題となることが予想されています。

2013 年 4 月に改組した革新的シミュレーション研究センター(CISS)では、これまでに開発してきたシミュレーションソフトウェアの普及活動を積極的に展開するとともに、次世代の計算機環境で必須となる革新的な計算アルゴリズムやそれを実装した実用的シミュレーションソフトウェアの研究開発を推進していきます。また High Performance Computing (HPC)環境を利用したシミュレーションとものづくり設計との間にある距離を少しでも縮めるための新たな設計論の展開も図っていく所存です。

スーパーコンピューティングを中核に据えた本センターの研究および教育活動は、我が国の産業競争力の抜本的強化に貢献するものと確信しております。

新 CISS につきましても、引き続き皆様からのご支援とご協力を賜りたく、お願い申し上げます。

平成 26 年 6 月 1 日

東京大学教授 生産技術研究所
革新的シミュレーション研究センター長
加藤 千幸

革新的シミュレーション研究センター

平成 25 年度 活動報告

Vol.6

目 次

1. 革新的シミュレーション研究センターの概要	1
2. 構成メンバー	3
3. センターの活動実績	7
(1) 大型プロジェクトの推進	
1) 高性能汎用計算機高度利用事業	
「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくり（平成 21～27 年度）	
(2) 他研究機関との連携	
(3) 教育活動	
1) 大学院講義「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」	
2) HPC 産業利用スクール	
(4) 広報活動	
1) シンポジウム・セミナー等の開催・共催・後援	
2) 国内および海外への研究成果の展開	
3) ニュースレターの発行	
4) 新聞・マスコミ報道	
4. 各研究室の活動実績	37

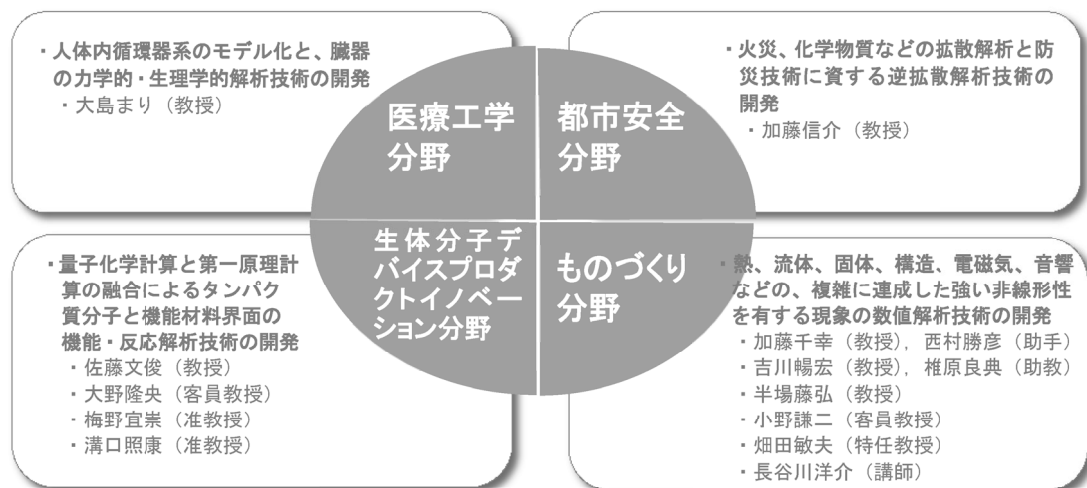
1. 革新的シミュレーション研究センターの概要

革新的シミュレーション研究センター(Center for Research on Innovative Simulation Software, 略称 CISS)は, 2002 年 1 月に設置された「計算科学技術連携研究センター」の研究成果を引き継ぐ形で, 2008 年 1 月に生産技術研究所附属の教育・研究施設として設置され, 2013 年 4 月に改組されました.

第1期 CISS は, ①世界をリードする先端的シミュレーションソフトウェアの研究開発, ②研究開発成果の社会への普及, ③シミュレーションソフトウェアを開発・利活用する人材育成のための教育・研究基盤を強化することを目標に, 2008 年 10 月から 2013 年 3 月に掛けては主に文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発「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」プロジェクトを, 2010 年からはスーパーコンピュータ「京」の研究開発に同期して実施されている文部科学省「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくりプロジェクトも併せて実施してきました. これらのプロジェクトにおいては, High Performance Computing(HPC)環境におけるシミュレーションソフトウェアの研究開発と実証研究を強力な産学官連携体制により推進するとともに, 産業界と連携してその普及に努めて来ました.

新 CISS では, 先端的シミュレーションソフトウェアの開発・利活用を担う研究者・技術者の育成を行ってきた実績を踏まえて, 我が国が保有する世界最速のスパコン「京」および将来のエクサフロップスクラスの超高速スパコンまでを視野に入れ, バイオテクノロジー, ナノテクノロジーおよび環境・防災を含めた広義のものづくりの方法論を根本的に変革するソフトウェアを研究開発していきます. さらに, その利活用の促進を図ることにより我が国産業界の国際的リーダーシップの発揮・競争力の抜本的強化に貢献することを目指しています.

具体的には, 引き続き文部科学省「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくりのプロジェクトを推進するとともに, ①量子化学計算と第 1 原理計算の融合によるタンパク質分子と機能材料界面の機能・反応解析技術の開発, ②熱, 流体, 固体, 構造, 電磁気, 音響などの, 複雑に連成した強い非線形性を有する現象の数値解析技術の開発, ③人体内循環器系のモデル化と臓器の力学的・生理学的解析技術の開発, ④火災, 化学物質などの拡散解析と防災技術に資する逆拡散解析技術の開発, の四つの研究テーマを設定して研究開発を推進しています.



研究開発分野

2. 構成メンバー



加藤 千幸 センター長・教授

Chisachi KATO, Center Director, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 熱流体システム制御工学

Fluid Flow and Thermal Energy Systems Control



加藤 信介 教授

Shinsuke KATO, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 都市・建築環境調整工学

Environmental Control Engineering



大島 まり 教授

Marie OSHIMA, Professor

所属 東京大学大学院情報学環・生産技術研究所

Interfaculty Initiative in Information Studies, The University of Tokyo

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 バイオ・マイクロ流体工学

Bio-microfluidics



吉川 暢宏 教授

Nobuhiro YOSHIKAWA, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 マルチスケール固体力学

Multi-scale Solid Mechanics



佐藤 文俊 教授

Fumitoshi SATO, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 計算生体分子科学

Computational Biomolecular Science



半場 藤弘 教授

Fujihiko HAMBA, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 流体物理学

Fluid Physics



大野 隆央 客員教授

Takahisa OHNO, Visiting Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 計算材料科学

Computational Surface Science and Functional Design



畑田 敏夫 特任教授

Toshio HATADA, Project Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 プロジェクトマネジメント/知識ベースデジタルエンジニアリング

Knowledge-based Engineering./Project Management



梅野 宜崇 准教授

Yoshitaka UMENO, Associate Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 ナノ構造強度物性学

Nanostructured Materials Strength and Science



溝口 照康 准教授

Teruyasu MIZOGUCHI, Associate Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 ナノ物質設計工学

Nano-Materials Design



長谷川 洋介 講師

Yosuke HASEGAWA, Lecturer

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 界面輸送工学

Interfacial Transport Engineering



椎原 良典 助教

Yoshinori SHIIHARA, Assistant Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 ナノスケール計算力学

Computational Nanomechanics



西村 勝彦 助手

Katsuhiko NISHIMURA, Research associate

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 熱エネルギー変換工学

Thermal Energy Conversion Engineering

3. センターの活動実績

(1) 大型プロジェクトの推進

1) 高性能汎用計算機高度利用事業

「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくり

(平成 21～27 年度) 研究代表者: 加藤千幸(東京大学生産技術研究所)

[概 要]

文部科学省 HPCI 戦略プログラム「分野 4 次世代ものづくり」は、ものづくりプロセスの質的・時間的なブレークスルーと革新的製品の早期創出を実現すること、さらに多階層の利用者を対象とする人材育成・普及施策等の実施を通して HPC(High Performance Computing)利用者層の拡大を図るための計算科学技術推進体制を構築することによって、21 世紀における我が国ものづくりの国際的リーダーシップの飛躍的な強化に貢献することを目的に実施している。

平成 25 年度は、平成 24 年度において実施した特定高速電子計算機施設(以下「京」)を利用した第一段階の各課題対応解析・評価ならびにニーズに応じた HPCI 利用・支援施策の実施状況等を踏まえ、本格研究期間の 3 年目として、研究開発については、「京」を利用した目標最大ノード規模での各課題対応解析・評価を実施し、計算科学技術推進体制構築については、ニーズの高度化に応じた HPCI 利用・支援施策の実施と課題成果の普及展開に向けた基盤整備等を実施した。また、それらの業務を効率的に遂行するためのプロジェクトの総合的推進施策を実施した。以下に具体的な内容について記す。

[詳 細]

(i) 研究開発

本分野における研究課題は、特に産業界との連携が実現でき、「京」で始めて達成できることを主たる条件として、以下に記す 3 つのカテゴリーに分類される課題を設定している。以下それぞれの本年度における主要実施内容について記す。

[I] 社会基盤・民生機器の抜本的高効率化・小型化・静音化を実現する革新技術創出支援システムの研究開発—「プロダクトイノベーション」対応

製品そのものの革新を図るための技術の創出に向けて取り組む代表 2 課題に対して、「京」を利用した目標最大ノード規模での流体制御メカニズム等の解明と評価を実施した。

(研究協力機関: 独立行政法人宇宙航空研究開発機構, 独立行政法人物質・材料研究機構)

[II] 未来社会へ向けた価値の創造・製品化プロセスを抜本的に加速する次世代設計システムの研究開発—「プロセスイノベーション」対応

製品開発・設計プロセスの革新を図るためのシステム開発に向けて取り組む代表 2 課題に対して、「京」を利用した目標最大ノード規模での自動車空力特性、ターボ機械流力特性等の解析と評価を実施した。

(研究協力機関: 国立大学法人京都大学, 国立大学法人北海道大学, 東京都市大学, 国立大学法人豊橋技術科学大学, 国立大学法人広島大学, 独立行政法人宇宙航空研究開発機構, 国立大学法人東北大学)

[III] 大規模プラントの信頼性を抜本的に向上させる次世代安全性・健全性評価システムの研究開発—「安心・安全社会の構築」対応

安心・安全社会の構築に影響の大きい大規模プラントの高精度評価システムの開発に向けて、「京」を利用した目標最大ノード規模での複数の大規模施設を対象とする耐震特性等の解析と評価を実施した。

(独立行政法人日本原子力研究開発機構, 国立大学法人東京大学)

(ii) 計算科学技術推進体制構築

a) 計算機資源の効率的マネージメント

「京」を中核とする HPCI を研究課題等に応じて効率的に活用するために設けた支援体制を基に、先導的課題、ならびに産業界等の多様な課題に対し、ニーズの高度化に応じた効果的マネージメントを実施した。

(協力機関: 一般社団法人 HPCI コンソーシアム)

b) 研究成果の普及

ものづくり(特に開発設計プロセス)の基盤となるアプリケーションと、それを効率的・効果的に使いこなすためのデータベースから成る HPC/PF について、主要な機能・コンテンツの実装を一通り終了させた。また、特に民間企業を中心としたHPC利用層の拡大を図るため、ニーズの高度化に応じた効果的施策を実施した。

(協力機関: 独立行政法人宇宙航空研究開発機構, 独立行政法人日本原子力研究開発機構, 国立大学法人神戸大学)

c) 人材育成

先端的ソフトウェア開発者教育としては、東京大学の夏期(4~7月)大学院教育カリキュラムとして推進した。また、先端的ソフトウェア利活用人材の育成については、ニーズの高度化に応じた「HPC 産業利用スクール」のコース設定を検討・実施した。

d) 人的ネットワークの形成

「京」を中核とする HPCI を活用したものづくりへの貢献について議論する場として、第4回「次世代ものづくりシンポジウム」等を開催した。

e) 分野を越えた取組の推進

成果普及のための基盤となる HPC/PF は計算科学研究成果の情報発信やアウトリーチのための共通情報基盤にもなり得るので、他分野ならびに計算科学研究機構と連携した取り組みを強化した。

(iii) プロジェクトの総合的推進

ネットワーク型組織の代表機関として、独立行政法人日本原子力研究開発機構, 独立行政法人宇宙航空研究開発機構との協力体制のもとに、参画機関を含めたプロジェクト全体の連携を密としつつ効率的に運営していくための総合的な施策を推進した。平成 25 年度は、前年度(本格研究 2 年目)後半に開始された「京」の本格運用における利用状況を踏まえながら、先端成果創出計画の確実な遂行とその広範な産業分野への応用展開に有効な諸施策の推進を強力に支援した。

(協力機関: 一般社団法人 HPCI コンソーシアム)

(iv) 計算科学技術推進体制の構築の強化

計算科学技術による画期的な科学的成果並びに社会的課題の解決に資する成果の早期創出への要請に応じて、特定高速電子計算機施設の性能をより一層活用できるように、HPCI 戦略プログラム 分野 4 の基盤整備を図るため、以下の項目を追加して実施した。

- a) 広範にわたるものづくりの革新を加速するための主要ソフトウェア機能を強化した。
- b) SPring-8 によるタンパク質の電子密度分布ならびに構造データと「京」による解析結果とを比較検討しデータの解像度と信頼性の飛躍的向上を図った。



「分野 4 次世代ものづくり」の概要

(2) 他研究機関との連携

1) 独立行政法人海洋研究開発機構

[概要]

スーパーコンピュータ「京」への予備的な評価も含めて、地球シミュレータの産業利用向けに実用的なシミュレーションソフトウェアの整備及び高度化を本センターと、国内有数の超並列計算機と計算機科学に関する高度な知識を有する独立行政法人海洋研究開発機構 地球シミュレータセンターが互いに協力して実施した。本年度は二つの分野(量子バノオ関連, ナノデバイス関連)について地球シミュレータを用いた計算科学シミュレーションソフトウェアの高度化の研究を実施した。平成 25 年度における研究成果を以下に述べる。

[詳細]

(i) 量子バイオ関連分野

a) 無機表面とイオン・タンパク質相互作用のモデリング

平成 25 度は、課題タイトルとは異なるが FMO 計算の中で利用頻度の高い 2 次摂動(MP2)レベルでの計算の高速化について、スカラ並列機や京などもクロスチェックに使いつつ検討を行った。基本の技

術は、テンソルの近似的低ランク化の一種である 2 電子積分のコレスキー分解[1]である。私達は CDAM[2]と読んでいるが、単に CD と書かれることも多い。以下に先ず、ABINIT-MP プログラムにおける CDAM を概説しておく。

CDAM[2]では四つの基底関数の添字を持つ(pq,rs)を三つの添字のテンソルで

$$(pq,rs) \approx \sum_I L_{I,pq} L_{I,rs}$$

のように分解する。ここで I は、コレスキー分解の場合は基底関数の積からなる展開用のメモリ上のアドホックな基底である。恒等分解では専用の展開基底を用いる。 I の長さを十分に長くすれば分解無の精度が保たれるが、実際にはコスト低減とのトレードオフになる。また、並列実行時には I は分散して持つため all-reduce の操作が要るが、1 プロセス当たりのメモリ負担は少なく済む。MP2 計算の前に先ず、分子軌道を最適化するために Hartree-Fock(HF)計算では自己無撞着場(SCF)条件が満たされるまで Fock 行列の構築(と対格化)が繰り返される。CDAM による Fock 行列のクーロン項と交換項は

<i>Coulomb matrix (J)</i> $\tilde{J}_{pq} = 0$ Loop over I # Parallelized $Q_I = \sum_{rs} L_{I,rs} P_{rs} \quad \# \text{DDOT}$ $\tilde{J}_{pq} = \tilde{J}_{pq} + L_{I,pq} Q_I \quad \# \text{DAXPY}$ End of loop over I ALLREDUCE ($\tilde{J}_{pq}$)	<i>Exchange matrix (K)</i> $\tilde{K}_{pq} = 0$ Loop over I # Parallelized $X_{I,qi} = \sum_s L_{I,qs} C_{si} \quad \# \text{DGEMM}$ $\tilde{K}_{pq} = \tilde{K}_{pq} + \sum_i X_{I,pi} X_{I,qi} \quad \# \text{DGEMM}$ End of loop over I ALLREDUCE ($\tilde{K}_{pq}$)
---	---

Coulomb and Exchange terms in Fock elements computed by CDAM

のように BLAS ライブラリを使って計算される。 P_{rs} は密度行列。MP2 も同様に軌道展開係数から

MP2 correlation energy (E^{MP2})

Loop over I # Parallelized

$$X_{I,pi} = \sum_r L_{I,pr} C_{ri} \quad \# \text{DGEMM}$$

$$B_{I,ia} = \sum_q X_{I,qi} C_{qa} \quad \# \text{DGEMM}$$

End of loop over I

$$E^{\text{MP2}} = 0$$

Loop over ij # Canonical ij pair

$$(ia,jb)' = \sum_I B_{I,ia} B_{I,jb} \quad \# \text{DGEMM (partial sum of 1)}$$

ALLREDUCE ($(ia,jb)'$)

$$E^{\text{MP2}} = E^{\text{MP2}} + \frac{(2 - \delta_{ij})[(ia,jb) - (ib,ja)](ia,jb)}{\epsilon_i - \epsilon_a + \epsilon_j - \epsilon_b}$$

End of loop over ij

MP2 energy computed by CDAM

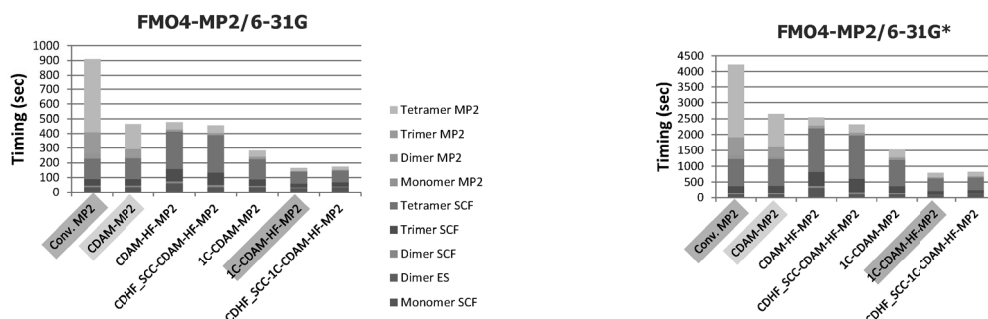
のように計算される。MP2 相関エネルギーの評価では、軌道エネルギーから成る分母で除される分子側で HF と違って積分の 2 乗をつくるために、all-reduce の仕方が HF とは違っていること、HF の交換項が繰り返し計算されるのに対して一度だけで済むことにも注意して欲しい。

通常の HF-SCF 計算では (pq,rs) 積分は閾値篩いによって数値的に有効なものだけが扱われるために、形式的に基底数 N に対して N^4 オーダーの演算コストのところ実効的に N^3 程度以下に低減されている。

他方, CDAM では I が本質的に N^2 のオーダーとなることから形式的は N^5 の演算となるため, DGEMM による加速が有効となるか, I に関する近似を進める以外には却ってコストが増してしまう. そのために, PC クラスター系では HF-SCF は通常の 2 電子積分の計算で行い, 元々 N^5 オーダーのコスト[3]を持つ MP2 のみを CDAM で計算することが多かった.

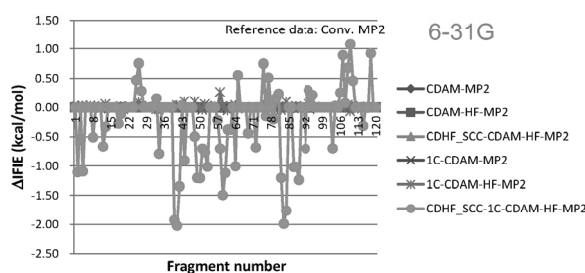
ここで 2012 年度に報告した, 常用ベンチマーク系である HIV-1 プロテアーゼ(198 残基)とロピナビル の複合体の 4 体 FMO 計算(FMO4-MP2)[4]の ES2 の 128 ノード(1024 プロセッサ)でのタイミングについて振り返っておく. このテストは, フラグメント分割では残基の主鎖と側鎖を分離し, ロピナビルも四つの機能単位に分けているため, フラグメント総数は 363 での計算であった. 6-31G 基底では通常 2 電子積分では 1.2 時間に対して MP2 を CDAM 処理した場合には 1.1 時間に減じた程度で, 6-31G*基底でも 4.5 時間が 4.3 時間となる程度の効果しか見られなかった. これは, 通常 MP2 計算も DGEMM で処理されているために極めて高速であるためである. 次に計算の内訳を見ると, MP2 ではなく HF の計算コストが特に 4 体フラグメントで 8 割以上で大きな割合を占めている. HF では SCF 手続きのために, 2 電子積分の処理が繰り返されることが原因であるが, なんらかの高速化のための方策が必要であることが示唆される結果と言える.

そこで精度の検証を前提として, アドホックなコレスキー展開基底に対して「二つの基底が同じ原子中心のみの積に限る」という 1 中心化条件(IC)を課してみた[1]. 計算時間のテストは ES2 ではなく PC クラスター(2.2GHz, E5-2660, 128 コア)を使って, 10 残基の小型タンパク質であるシニョリン(chignolin)を FMO4-MP2 レベルで行った. 主鎖と側鎖の分離を課したためにフラグメントの総数は 16 である.



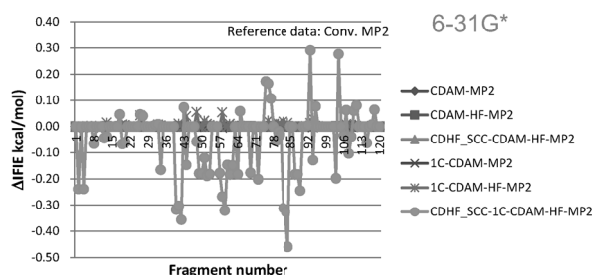
Benchmark timing of Chignolin

ここでラベルに CDAM の前に HF がある場合, HF 段階でも CDAM を適用したことを示す. また, 最左のタイプはフラグメントモノマーの HF 計算だけは通常 2 電子積分とした“変則的な扱い”である. 基底関数が 6-31G の場合, MP2 のみの CDAM 化で時間はほぼ 1/2 になるが, 1C 化してさらに HF も CDAM で行うと 1/4 以下の時間で済む. 特に, 4 体フラグメントの部分加速されているのはポイントである. 6-31G*の場合も 1C-CDAM による加速の効果は大きい. “変則的な扱い”では計算時間の短縮は顕著ではない上, 相互作用エネルギー(IFIE)にも誤差が増加する問題がある. 下に 6-31G の場合の IFIE の (CDAM 不使用に対する)誤差のプロットを示す. 横軸はフラグメント対の番号に取った. 1kcal/mol を超える誤差が生じていることが分かる.



Errors in IFIE of Chignolin with 6-31G basis

この大きな誤差は、1 体フラグメント(モノマー)全体での SCF 的電荷(SCC)条件によって決まる環境静電ポテンシャルの精度のバランスが崩れてしまったためと考えられる。一方、1C-CD の HF と MP2 での誤差は 0.3kcal/mol 程度で収まっており化学的な議論にも使えるレベルである。

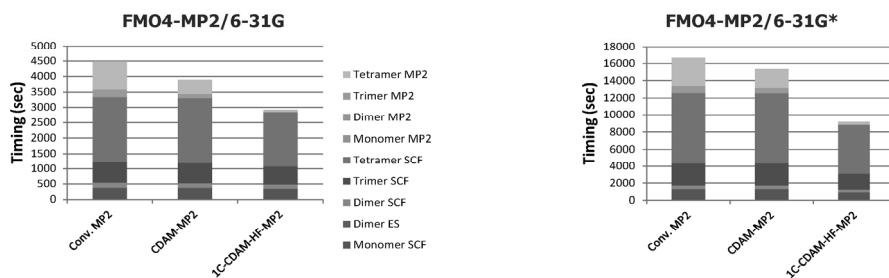


Errors in IFIE of Chignolin with 6-31G* basis

基底を 6-31G*とすると、d 分極関数が加わって関数としての柔軟性が増す分だけ 1C の制約の影響が減るのか。上図のように全体的に誤差が減る。ただ、“変則的な扱い”はやはり使わない方がよい。全エネルギーについては、残念ながら 6-31G*でも hartree 単位で小数 4 桁程度の誤差があるために、全エネルギーの差をとっての結合エネルギーの評価の場合には注意が要る。

1C-CDAM-HF-MP2 計算では、コストが低減されるために以前よりも 6-31G*を使うのが容易になると考えられる。ここでは図示は割愛するが、6-31G*よりもさらに質の高い cc-pVDZ でのテスト計算もしており、計算コストの低減と精度保持の両方から好ましい結果が得られていることを記しておく。PC クラスタではシニョリンの他、女性ホルモン受容体(ER)の 50 残基モデル、それに HIV-1 プロテアーゼでもテストを行って加速効果と精度の劣化についてチェックして有効性を確かめている。

ここまでの準備を踏まえて、ES2 の上で再度ベンチマーク計算を行った。結果を下図に示す。



Benchmark timing of HIV-1 protease

両基底とも、1C で HF と MP2 を CDAM 化処理を行った場合、これまでの MP2 単体の CDAM よりも高速化されていることが分かる。とりわけ 6-31G*では半分近くの 2.2 時間まで低減されており、中でも 4 体フラグメントでそれが顕著である。ただし、HF-SCF の全体でも重みが大いことはやはり今後の課題であり、2013 年度に 2 次収束のモジュールも開発・実装しているが、微小反復でのコストが増すために大きな改善は得にくいことが分かってきており、更なる検討が必要である。ともあれ、既述のように 6-31G よりも高い数値的信頼性が期待出来る 6-31G*を使うためのコスト的なバリエーションが下げられたことは強調してもよいと思われる。また、cc-pVDZ 基底では、1C の場合のみ ESC 設定の制限時間内の 4.2 時間で完走したことを付記したい。

なお、ES2 でのその他のテストとしては、インフルエンザウィルスのノイラミニダーゼ(NA)とタミフルの複合系、それにシリカクラスター系の計算も行っているが、ここでは省略させていただく。

【参考文献】

- [1] Y. Mochizuki, K. Yamashita, T. Nakano, Y. Okiyama, K. Fukuzawa, N. Taguchi, S. Tanaka, “Higher-order correlated calculations based on fragment molecular orbital scheme”, *Theor. Chem. Acc.* 130 (2011) 515-530.
- [2] T. Nakano, Y. Mochizuki, K. Yamashita, C. Watanabe, K. Fukuzawa, K. Segawa, Y. Okiyama, T. Tsukamoto, S. Tanaka, “Development of the four-body corrected fragment molecular orbital (FMO4) method”, *Chem. Phys. Lett.* 523 (2012) 128-133.
- [3] Y. Mochizuki, K. Yamashita, T. Murase, T. Nakano, K. Fukuzawa, K. Takematsu, H. Watanabe, S. Tanaka, “Large scale FMO-MP2 calculations on a massively parallel-vector computer”, *Chem. Phys. Lett.* 457 (2008) 396-403.
- [4] Y. Okiyama, T. Nakano, K. Yamashita, Y. Mochizuki, N. Taguchi, S. Tanaka, “Acceleration of fragment molecular orbital calculations with Cholesky decomposition approach”, *Chem. Phys. Lett.* 490 (2010) 84-89.
- [5] 山崎隆浩, 加藤弘一, 宇田毅, 大野隆央, 第60回応用物理学会春季学術講演会 28p-G8-1.
- [6] 山崎隆浩, 加藤弘一, 宇田毅, 大野隆央, 日本物理学会 2013 年秋季大会 26pJB-8.

b) 産業応用

平成 25 年度は ES2 での作業よりも「京」への ABINIT-MP の OpenMP/MPI 混成並列に基づく移植関係の作業に多くの時間を費やすこととなったが、幸い其方でも CDAM による加速が極めて有効であることが確認出来ているが、メモリが少ないために FMO4-MP2 の計算は HIV-1 でも 6-31G 基底がやっとという状況であり、普通の 2 体 FMO 計算に特化した用途になると考えられる。ES2 の利用は FMO4 計算で 6-31G*基底を使うような場合にはアドバンテージがあるとも言える。

(ii) ナノデバイス分野

a) 半導体ナノ構造

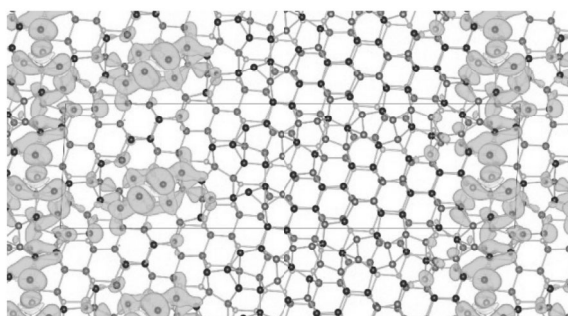
Si, Ge, SiC などの VI 族半導体表面は、表面科学の課題としてだけでなく産業応用上も非常に重要であるが、いまでも多くの未解明な問題が残されている。CMOS デバイスの主役である Si の表面構造に関して言えば、(001)および(111)表面はいずれも原子スケールの構造モデルが確立しておりこれらの表面に形成される酸化膜構造などもよく調べられているのに対し、(110)表面はそうではない。これは、産業上の重要性が低かったということだけではなく、実験が示す再構成表面が複雑でこれまでに提案されてきたいくつかのモデル構造の可否を検証するにも高精度な大規模計算を必要とし、モデル構造をつくるのに適当な指針がなかったという理由がある。CMOS デバイスの微細化の進展に伴い、高い正孔移

動度が得られるSi(110)表面が使われることが増え、この最後に残されたSi低指数面の表面構造解明の重要性が増している。この表面構造の解明は、Siとの酸化膜界面形成の制御方法を確立するのにも寄与するであろう。

清浄なSi(110)表面は1200℃で加熱後16×2と記される再構成表面構造をつくることが知られている。Si(110)-(16×2)表面単位格子は、 $\vec{a} = 1/2[110]$, $\vec{b} = [110]$ を使って、 $(11\vec{a} - 5\vec{b}, 2\vec{a} + 2\vec{b})$ で表わされる。清浄表面には単位格子あたり64個のSi原子が露出している。この表面は1原子層分の段差の凹凸があり、表面単位格子には下段のテラスと上段のテラスが一对含まれる。それぞれのテラスは列状に表面単位格子の短辺方向($2\vec{a} + 2\vec{b}$)方向)に走っている。STM実験では上下のテラスそれぞれにジグザグな鎖状の構造がテラス列方向に並ぶのが見える。鎖状列は五員環の対を構成要素としている。Ge(110)表面も類似の五員環列からなる構造をつくるが、平坦である。われわれは探索的に数百種類におよぶSi(110)構造模型をつくり構造緩和と電子状態計算を行い、実験をよく再現するステップ構造を見つけた[5,6]。しかし、同時にほぼエネルギー的に縮退したほかの9種の表面構造も発見した。これらの表面構造は、Si表面にSTM像が示す位置にSi原子を付加するのではなく、清浄Si表面から64原子あたり4～6個のSi原子抜き出してダングリングボンド数を最小化するように結合手をつなぎかえることで作ることができる。この表面モデル作成指針に従えば、他にGe(110)で観測される平坦な表面構造モデルを作ることできる。

Si(110)-16x2の全部で10種の表面構造の安定性を調べるために、これまでよりも精度の高い計算を行った。10層のSiスラブと真空層を交互に周期的に重ねた計算モデルを採用した。用いた擬ポテンシャルはノルム保存型であり、交換相関相互作用には一般化密度勾配近似を使った(PBE)。計算精度の低いものをモデル1、次によいものをモデル2、最も精度の高いものをモデル3とする。モデル1と2は、真空層の厚さがSi6層分で、Siスラブの裏面2層を理想結晶位置に固定している。波動関数の切断エネルギーは9 Rydbergである。モデル1は Γ 点のみ、モデル2はk点を2個採っている。モデル3は真空層の厚さがSi10層分、Siスラブの裏面Siを水素で終端し、水素と裏面Si2層を固定している。切断エネルギーは16 Rydbergでk点はモデル2と同じく2点採っている。計算プログラムは、MPI並列とスレッド並列をハイブリッド化したPHASEコードであり、地球シミュレータのノードを2～16使用して行った。計算の結果、10種の表面構造エネルギーの差は計算精度に依るが表面単位格子あたり0.14～0.41 eVであり縮退しているとみなしてよい程度の差であること、またSTM像を最もよく再現する構造が最安定となっているわけではないことが分かった。さらに精度のよい計算としては、動的効果を取り入れたより大きな表面単位格子を用いた計算、スピン分極の効果を入れた計算などが考えられるが、ここではスピン分極の効果を入れた電子状態計算を行った。STM像を最もよく再現するステップ構造が対象とした。モデル3と同じ単位格子で裏面ダングリングボンドのH終端処理を行った物理モデルを使い、 Γ 点、切断エネルギー9 Rydbergの精度で計算を行い、下図に示すスピン分極構造を得た。下側テラス側はスピン分極が発生しているが、上側テラスには発生していない。また、ステップ端の一方にもスピン分極が発生している。この分極の発生機構やエネルギー安定化効果はまだ不明確であるが、新しく実装した修正Kosugi法などのソルバーや波動関数予測機能などがスピン分極を入れた計算の収束安定性を向上するのに寄与していることを確認した。今後、PHASEの計算効率の向上を試みつつ、Si表面のスピン分極の発

生機構, その効果などを解明してゆく予定である.



A top view of a stable structure on the Si(110) stepped surface and the spin density distribution. Green, blue, and red balls are 1st, 2nd, and 3rd layer Si atoms, respectively. Isosurfaces are subtracted (down from up) charge densities. Blue (yellow) crowds are positive (negative) value regions.

b) 産業応用

Si, Ge, SiC など VI 族半導体表面は, CMOS デバイスやパワーデバイスなどの産業応用上非常に重要であるが, いまも多くの未解明な問題が残されている. Si(110)表面に関しては, 表面回折像や STM 像, 酸化過程の観測など多くの実験があるにもかかわらず, 表面超格子構造の周期が大きく実験観測と相補的役割を果たすべき第一原理計算の負荷が重く, また探索するモデル構造が多数存在することから解明が遅れていた. 表面構造モデルをつくる指導原理を得たこと, およびスピン分極のある1,000原子規模の系に対しても第一原理計算を収束安定性よく実行することが可能になったため, 今後 Si(110)清浄表面の完全な解明に達し, その表面への絶縁膜形成過程のシミュレーションを通じて, トランジスタの信頼性向上のためのプロセス開発が加速されることが期待できる. 同様のことがパワーデバイス基板の SiC 表面に関しても期待できる.

信頼性向上のため, 2次電池や燃料電池の正極/負極間にあるイオンが伝導する電解質に固体電解質を使う試みが精力的になされており, 様々な結晶・組成の候補材料に対してイオン原子の拡散機能を解析・予測することが必要とされている. 第一原理計算プログラムを用いた高精度な動的計算により, イオン伝導を直接的に観察し, 空孔の果たす役割が大きいことが分かった. 添加物効果, 温度による発現する現象の違いなども同様の手法を用いて解明できる. 今後の固体電解質開発の加速が期待できる.

2) 独立行政法人理化学研究所・一般財団法人高度情報科学技術研究機構

平成 24 年 9 月に本格運用が開始されたスーパーコンピュータ「京」は 8 万以上の CPU, 64 万以上の計算コアから構成される超並列計算機である. ソフトウェアの高速化・超並列化に関して, 「京」についての専門技術を擁している独立行政法人理化学研究所の計算科学研究機構(AICS)および一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)の協力を得て, 平成 25 年度は, フラグメント分子軌道法プログラム ABINIT-MP, および第一原理分子動力学法プログラム PHASE について以下のとおり実施した.

< ABINIT-MP >

平成 25 年度は, 一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)の神戸センターとの共同作業で

FMO 法プログラム ABINIT-MP の「京」への移植作業を進めた。幸い、最も利用需要のある 2 次摂動 (MP2) 計算においては、実タンパク質で 10% を超える実行効率を確保出来たので、年度末の 3 月に「京」のライブラリプログラムとして AICS に提供した。また、関連のハンズオンセミナーも共催した。

<PHASE>

平成 25 年度は FFT の回数削減、配列に貯めた波動関数の FFT データを固有値の変化に合わせて MPI 転送する機能を実装した。ただし効果は限定的であった。また、非局所ポテンシャルと波動関数の積を実空間で行えるようにした。真空領域がある場合には特に演算数削減効果が大きいことがわかった。

(3) 教育活動

1) 大学院講義「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」

平成 25 年度は、シミュレーションソフトウェアに適したソフトウェア工学・計算機工学の講義・演習をさらに更新し、チーム制によるシミュレーションソフトウェアの設計・プログラミングによる一貫実習を行う上で、より実践的な下層演習に重点を移して講義を展開した。本講義の特色である、産業界の講師陣による講義・演習ならびに東大情報基盤センター最新機の FX10 の利用も行った。受講者数は昨年度同様であったが、様々な専攻から受講があった。最終的に、1 本の流体シミュレーションソフトウェアと 3 本の分子動力学シミュレーションソフトウェアをチームで作成することに成功した。

なお、これまで構築してきた本講義・演習を、シミュレーションソフトウェア工学として上梓することとなった。来年度発行予定である。全国的な展開への足掛かりとなることを期待している。

科 目 名 : 実践的シミュレーションソフトウェア開発演習

担当教員 : 加藤千幸, 佐藤文俊, 居駒幹夫(非常勤講師), 高橋英男(非常勤講師), 他

講義項目 :

1. 講義紹介; 講義の目的, 概要, スケジュール, 評価方法
2. 実践的なシミュレーションソフトウェア開発におけるソフトウェア工学
3. 高速シミュレーションソフトウェアを開発するための計算機工学
4. 基礎演習
 - 4-1. 演習課題のための講義
 - 4-2. 基礎ソフトウェア開発演習
 - 4-3. プロジェクト計画, 進捗管理, 設計工程, コーディング工程, テスト工程, 最適化など
5. 応用実習; 班分け(流体・分子シミュレーショングループ)
 - 5-1. 応用実習で使用する科学理論の講義
 - 5-2. 4-2, 4-3 の演習を踏襲した応用ソフトウェア開発演習
6. 成果発表

2)HPC 産業利用スクール

a) HPC 産業応用オータムスクール

HPC 技術の将来に深くかかわる産学官の有識者を講師に迎え、現在から将来にわたる HPC 技術の企業利活用に関して重要となる視点の提示をした。さらに、企業にてシミュレーション技術を活用し社内イノベーションを推進する実務を担っている方の経験談も加え、多様な業種からなる受講者による車座議論により、HPC 利活用とイノベーションをより深く考えるヒントを得られるように企画した。

開催日：平成 25 年 10 月 18 日(金)～19 日(土)

場 所：多摩永山情報教育センター

主 催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

共 催：東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター
計算物質科学イニシアティブ

b) HPC 産業利用スクール「京」特別コース

「京」に特化した入門教育コースとし、企業における担当者並びに関心を持っている方の疑問に答える形式で進め、「京」の「ものづくり」への効用と、「京」を取り巻く環境 HPCI の展開等についてグループ単位での討議をおこなった。

開催日：平成 26 年 1 月 15 日(水)

場 所：東京大学生産技術研究所 As 棟 3 階 中セミナー室 5

主 催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

共 催：東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター
一般財団法人高度情報科学技術研究機構

c) HPC 産業利用スクール 実践コース(反応流体)

企業ニーズの高い反応流体(特に燃焼)シミュレーションに関し、FOCUS スパコンを用いた大規模計算に取り組んだ。

開催日：平成 26 年 3 月 25 日(火)

場 所：東京大学生産技術研究所 An 棟 4 階 小セミナー室 1

主 催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

共 催：東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター
公益財団法人計算科学振興財団

(4)広報活動

1)シンポジウム・セミナー等の開催・共催・後援

a) シンポジウム

文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発

「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」プロジェクト最終成果報告会

平成 20 年 10 月にスタートし平成 24 年 3 月で終了した「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」プロジェクトの 4 年半にわたる研究開発成果の報告を行うとともに、今後のさらなるステップアップに向けての取り組み計画を紹介した。また、産業界のユーザーの方々からは実際にソフトウェアを使っていた結果を報告していただき、このプロジェクトの成果を今後はどのように利用できるかという方向性を提案していただいた。

開催日：平成 25 年 6 月 6 日(木)、6 月 7 日(金)

場所：東京大学生産技術研究所 コンベンションホール

主催：東京大学生産技術研究所

参加者数：1 日目 210 名, 2 日目 289 名

資料作成：予稿集 210 頁 / 講演集 262 頁

○プログラム

【平成 25 年 6 月 6 日(木) 10:00～17:45】

司会

吉川 暢宏

東京大学生産技術研究所 教授

挨拶

10:00－10:20 「主催者挨拶」

中埜 良昭

東京大学生産技術研究所 所長

「文部科学省挨拶」

下間 康行

文部科学省研究振興局 情報課長

「プログラムオフィサー挨拶」

天野 吉和

富士通株式会社 常勤監査役

「スーパーコンピューティング技術産業応用協議会挨拶」

小林 敏雄

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

運営委員会委員

一般財団法人日本自動車研究所

代表理事 研究所長

講演

10:20－10:50 「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プロジェクトの総括」

加藤 千幸

東京大学生産技術研究所 教授 研究代表

ナノデバイス分野の成果報告

10:50－11:35 「PHASE の成果報告と今後の展開」

大野 隆央

独立行政法人物質・材料研究機構

理論計算科学ユニット ユニット長

11:35－13:00 — 休憩 —

司会
大野 隆央
独立行政法人物質・材料研究機構

量子・バイオ分野の成果報告

13:00－13:45 「ProteinDF の成果報告と今後の展開」

佐藤 文俊
東京大学生産技術研究所 教授

13:45－14:30 「ABINIT-MP の成果報告と今後の展開」

望月 祐志
立教大学理学部 教授

— 休憩 — (14:30－14:45)

次世代ものづくり分野の成果報告

14:45－15:30 「FrontCOMP の成果報告と今後の展開」

吉川 暢宏
東京大学生産技術研究所 教授

15:30－16:15 「FrontFlow/blue・FrontWorkBench の成果報告と今後の展開」

加藤 千幸
東京大学生産技術研究所 教授

16:15－17:00 「FrontISTR の成果報告と今後の展開」

奥田 洋司
東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授

17:00－17:45 「REVOCAP システムの成果報告と今後の展開」

吉村 忍
東京大学大学院工学系研究科 教授

【平成 25 年 6 月 7 日(金)10:00～17:30】

司会
佐藤文俊
東京大学生産技術研究所 教授

10:00－10:05 「プロジェクト代表挨拶」

加藤 千幸
東京大学生産技術研究所 教授
革新的シミュレーション研究センター センター長

ナノデバイス分野 ユーザー利用報告

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
座長
小林 金也
株式会社日立製作所 日立研究所 主管研究員

10:05－10:55 PHASE の事例報告

「第一原理計算とナノデバイスにおける界面エンジニアリング」

石原 貴光
株式会社東芝 研究開発センター
LSI 基盤技術ラボラトリー 主任研究員

「Conducting-Bridge Resistive Random Access Memory (CB-RAM) におけるスイッチング機構の解明－第一原理計算シミュレーションソフトPHASEを用いたアプローチ」

木下 健太郎
鳥取大学大学院 工学研究科 准教授

質疑応答

量子・バイオ分野 ユーザー利用報告

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
座長
小沢 知永
キッセイ薬品工業株式会社 創薬研究部
創薬設計研究所 主任研究員

10:55－11:45 ProteinDF の事例報告

「ProteinDF のヘムタンパク質への適用」

千葉 貢治
株式会社菱化システム 科学技術システム事業部
計算科学部 グループマネージャ

「量子生体分子化学計算から学んだこと」

直島 好伸
岡山理科大学自然科学研究所
大学院総合情報研究科 教授

質疑応答

11:45－12:35 ABINIT-MP の事例報告

「セリンプロテアーゼ阻害剤におけるFMO計算による阻害メカニズムの考察」

上村 みどり
帝人ファーマ株式会社 生物医学総合研究所 課長

「キナーゼ選択性の考察におけるFMOの摘要」

井上 篤
エーザイ株式会社
ネクストジェネレーションシステムズ機能ユニット
統括課長

質疑応答

12:35－13:40 — 休憩 —

司会
畑田敏夫
東京大学生産技術研究所 特任教授

次世代ものづくり分野 ユーザー利用報告

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
座長
笠 俊司
株式会社 IHI 技術開発本部管理部 部長

13:40－14:30 FrontFlow/blue, FrontWorkBench の事例報告

「FrontFlow/blueを用いた船体まわり流れ解析」

西川 達雄
一般財団法人日本造船技術センター
技術開発部 設計システム開発課長

「ファンの大規模流体計算と空力騒音の計算」

岩瀬 拓
株式会社日立製作所 日立研究所
機械研究センタ 主任研究員

質疑応答

14:30－15:20 FrontISTR の事例報告

「アスファルト表面遮水壁型ダムにおける遮水壁の地震時挙動解析」

土居 賢彦
東京電力株式会社 技術開発研究所
主任研究員

「FrontISTR を用いた不均質地下構造の地殻変動と地震動解析」

董 勤喜
株式会社エデュリイエンス総合研究所
代表取締役

柴山 恭
株式会社計算力学研究センター技術営業部

「FX-10 を利用した FrontISTR によるプリント基板熱反り解析について」

坂入 慎
富士通アドバンストテクノロジー株式会社
HPC 適用推進統括部

質疑応答

15:20－15:35 — 休憩 —

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
座長

富松 重行
株式会社電業社機械製作所 生産本部
技術研究所 主幹技師

15:35－16:25 REVOCAP の事例報告

「自動車車室内振動騒音解析」

飯田 桂一郎
スズキ株式会社 四輪プラットフォーム設計部

「REVOCAP システムによる風車翼の流体－構造双方向連成解析」

鵜飼 修
株式会社先端力学シミュレーション研究所
常務取締役

「水中渦の影響を受けるポンプ羽根車の流体－構造連成解析」

佐藤 利行
株式会社日立製作所インフラシステム社
機械システム事業本部 業務改革部 主任技師

質疑応答

16:25－17:15 FrontCOMP の事例報告

「水素ステーション用大型 CFRP 蓄圧器の開発」

中川 幸次郎
JX 日鉱日石エネルギー株式会社
中央技術研究所 水素・FC 研究所

シニアスタッフ

「メゾスケールモデルによる CFRP の損傷解析」

福重 進也
株式会社 IHI 航空宇宙事業本部
技術開発センター エンジン技術部 研究員

質疑応答

- 17:15－17:25 「スーパーコンピューティング技術産業応用協議会の新しい展開」
笠 俊司
株式会社 IHI 技術開発本部 管理部 部長
- 17:25－17:30 閉会の挨拶
加藤 千幸
東京大学生産技術研究所 教授
研究代表

「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくり 第 4 回 シンポジウム

第 4 回となる今回のシンポジウムは、本格運用が開始された「京」を利用した実際の解析事例の紹介と、見えてきた「京」利用の効果についての情報交換を主眼として開催した。

- 開催日：平成 25 年 12 月 6 日(金)10:15～17:20
- 場 所：独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構 1F セミナー室
- 主 催：東京大学生産技術研究所
- 共 催：独立行政法人日本原子力研究開発機構,
独立行政法人宇宙航空研究開発機構
- 後 援：独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構,
財団法人計算科学振興財団,
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
- 協 賛：化学工学会, 可視化情報学会, 空気調和・衛生工学会, 自動車技術会,
情報処理学会, ターボ機械協会, 土木学会, 日本応用数理学会,
日本ガスタービン学会, 日本機械学会, 日本気象学会, 日本計算工学会,
日本建築学会, 日本原子力学会, 日本航空宇宙学会, 日本混相流学会,
日本シミュレーション学会, 日本船舶海洋工学会, 日本鋳造工学会,
日本燃焼学会, 日本物理学会, 日本流体力学会(50 音順)
- 参加者数：140 名
- 資料作成：予稿集 128 頁 / 講演集 128 頁

○プログラム

- 司会
畑田 敏夫
東京大学生産技術研究所 特任教授
- 挨拶
10:15－10:35 「主催者挨拶」
加藤 千幸
東京大学生産技術研究所 教授
革新的シミュレーション研究センター長
- 「文部科学省挨拶」
川口 悦生
文部科学省研究振興局参事官(情報担当)付
計算科学技術推進室 室長

「来賓挨拶」

平尾 公彦
独立行政法人理化学研究所
計算科学研究機構 機構長

「分野マネージャ挨拶」

小林 敏雄
一般財団法人日本自動車研究所 顧問

講演

10:35－10:55 「分野 4 次世代ものづくりのトピックスから」

加藤 千幸
分野 4 統括責任者
東京大学生産技術研究所 教授

招待講演

10:55－11:35 「自動車業界における「京」を活用した設計の革新」

荒木 敏弘
日産自動車株式会社 統合 CAE 部 部長

11:35－12:15 「大規模プラントにおける「京」を活用した設計の革新に向けて」

松川 圭輔
千代田化工建設株式会社 技術本部
土木建築設計ユニット 主席技師長

12:15－13:45 昼食休憩 — 「京」見学会・ポスター展示 —

司会
黒瀬 良一
京都大学大学院工学研究科 准教授

戦略目標の達成に向けた研究開発成果

13:45－14:05 「次世代自動車空力シミュレーション」

坪倉 誠
北海道大学大学院工学研究院 准教授

14:05－14:25 「大型プラントにおける耐震シミュレーション」

中島 憲宏
独立行政法人日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター 次長

14:25－14:45 「LES を用いたロケット射点形状の多目的空力音響設計探査」

大山 聖
独立行政法人宇宙航空研究開発機構
宇宙科学研究所 准教授

14:45－15:45 ユーザーからの「京」を利用した最新成果の紹介

「自動車車室内の騒音予測」

飯田 桂一郎
スズキ株式会社 四輪プラットフォーム設計部

「320 億格子を利用した数値曳航水槽の構築」

西川 達雄
一般財団法人日本造船技術センター
技術開発部 設計システム開発課長

「HPC を用いたファンの性能と騒音予測技術」

岩瀬 拓
株式会社日立製作所 日立研究所
機械研究センタ 主任研究員

15:45－16:05 コーヒーブレイク (ポスター展示)

研究成果公開・普及の強化に向けて

16:05－16:15 「分野 4 における体制構築の特徴と成果普及活動の状況」

畑田 敏夫
東京大学生産技術研究所 特任教授

16:15－16:35 「HPC/PF の開発とアウトリーチ活動への展開」

小野 謙二
独立行政法人理化学研究所
計算科学研究機構 チームリーダー
神戸大学大学院システム情報学研究科
客員教授

16:35－17:15 アプリケーションラインナップの整備状況(流体関連)
「圧縮性流体解析プログラム UPACS のターボ機械開発への適用」

高木 亮治
独立行政法人宇宙航空研究開発機構
宇宙科学研究所 准教授

「ペタスケール流体計算を支える基盤技術開発」

井戸村 泰宏
独立行政法人日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター 研究主幹

17:15－17:20 閉会の挨拶

加藤 千幸
東京大学生産技術研究所 教授
革新的シミュレーション研究センター長

第 29 回生研 TSFD シンポジウム

乱流数値シミュレーション研究者の意見交換の場として、様々な研究分野から参加を得てきた「生研 TSFD シンポジウム」(旧「生研 NST シンポジウム」)は 29 回を迎え、今回も基礎から応用まで理工学の広い分野から 13 件の講演を行い、乱流の数値シミュレーション研究とその応用に関する研究を報告した。

開催日：平成 26 年 3 月 5 日(水)

場所：東京大学生産技術研究所 大会議室(An301・302)

主催：東京大学生産技術研究所 TSFD グループ

参加者数：37 名

○プログラム

9:30－9:40 開会のあいさつ

加藤千幸（東京大学）

9:40－11:40 セッション 1 乱流構造・モデリング・制御

司会 加藤千幸（東京大学）

「臨界域における円柱まわりの非対称流れに関する LES 解析」

小野佳之（大林組）

田村哲郎（東京工業大学）

「多孔質壁がチャネル乱流の乱流構造に及ぼす影響と抵抗増減効果の関連性」

中本真義 高木洋平（大阪大学）

「スパン方向振動壁面における縦渦構造の位相変化から見る抵抗低減機構」

焼野藍子（宇宙航空研究開発機構）

長谷川洋介（東京大学）

「乱流の座標変換共変性と平均 Lagrange 型統計理論」

有木健人 半場藤弘（東京大学）

11:40－13:00 昼食休憩

13:00－15:00 セッション 2 連成問題・流体音

司会：大島まり（東京大学）

「血流と血管壁のマルチスケール流体構造連成解析」

石上雄太 大島まり（東京大学）

「平板列から発生する共鳴音への平板間隔の影響」

横山博史 山本博樹 北宮克哉 飯田明由
（豊橋技術科学大学）

「Applications of Aero-acoustical Computation to Turbomachinery and Automobiles」

Guo, Yang 加藤千幸（東京大学）

山出伸一（みずほ情報総研）

「京による大規模連成 LES 解析の最新成果」

加藤千幸（東京大学）

15:00－15:20 休憩

15:20～17:50 セッション 3 大気乱流・気象

司会：大岡龍三（東京大学）

「乱流中を相互作用しながら運動する微小液滴の成長速度に対する直接数値計算」

大西領 高橋桂子（地球シミュレーションセンター）

「2次元丘を通過する成層乱流境界層の乱流構造解析」

服部博文 吉川翔太 保浦知也 田川正人
(名古屋工業大学)

「都市境界層における運動量及び熱の輸送メカニズムに関する LES」

中島慶悟 大岡龍三 菊本英紀 (東京大学)

「スカラー変動を考慮した LES のためのコレスキー分解に基づく人工的な流入変動風の生成」

大風翼 持田灯 (東北大学)

「生簀の抵抗を考慮した複合養殖場の物質循環の数値シミュレーション」

北澤大輔 張俊波 (東京大学)

b) ワークショップ

「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくり 第 1 回 統合ワークショップ

「京」の本格利用開始から今年度末までの研究成果について, ①「流体・伝熱・燃焼」, ②「材料・構造・信頼性」, ③「先端アプリ・共通基盤・PF」の三つの部門に分けて, より専門的で技術的な事例を紹介するワークショップを開催した.

開催日 : 平成 26 年 3 月 6 日(木) 「流体・伝熱・燃焼」部門, 「材料・構造・信頼性」部門

3 月 13 日(木) 「先端アプリ・共通基盤・PF」部門

場所 : 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 1 (An401・402),
大会議室 (An301・302)

主催 : 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター
独立行政法人日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター
独立行政法人宇宙航空研究開発機構

参加者数 :	「流体・伝熱・燃焼」部門	110 名
	「材料・構造・信頼性」部門	51 名
	「先端アプリ・共通基盤・PF」部門	64 名
資料作成 :	「流体・伝熱・燃焼」部門	予稿集 88 頁
	「材料・構造・信頼性」部門	予稿集 60 頁
	「先端アプリ・共通基盤・PF」部門	予稿集 84 頁

○プログラム

「流体・伝熱・燃焼」部門

司会
高木 亮治
独立行政法人宇宙航空研究開発機構
宇宙科学研究所 准教授

13:30～13:35 開会の挨拶

加藤 千幸
分野 4 次世代ものづくり 統括責任者

13:35～13:40 世話人からの趣旨説明

高木 亮治
独立行政法人宇宙航空研究開発機構
宇宙科学研究所 准教授

高速流

13:40～14:05 「マイクロデバイスを用いた輸送機器・流体機器の
流体制御に関する Large-eddy simulation」

佐藤 允
独立行政法人宇宙航空研究開発機構
宇宙科学研究所 招聘研究員

ターボ機械

14:05～15:00 「ターボ機械 HPC プロジェクトの概要」

加藤 千幸
東京大学生産技術研究所 教授

「HPC を用いたファンの性能と騒音予測技術」

岩瀬 拓
株式会社日立製作所 日立研究所
機械研究センタ 主任研究員

「遷音速遠心圧縮機のサージ点近傍における非定常流れ場の DES 解析」

古川 雅人
九州大学大学院工学研究院 教授

燃焼

15:00～15:55 「次世代燃焼・ガス化装置設計システムの研究開発の概要」

黒瀬 良一
京都大学大学院工学研究科 准教授

「マルチバーナ試験炉内微粉炭乱流燃焼場の Large-eddy simulation」

渡邊 裕章
一般財団法人電力中央研究所
エネルギー技術研究所 上席研究員

「航空機用アニュラー型燃焼器内部乱流噴霧燃焼場の Large-eddy simulation」

西家 隆行
株式会社数値フローデザイン 研究員

船舶

15:55～16:15 「320 億格子を利用した数値曳航水槽の構築」

西川 達雄
一般財団法人日本造船技術センター
技術開発部 設計システム開発課 課長

16:15～16:30 — ブレイク —

司会
黒瀬 良一
京都大学大学院工学研究科 准教授

自動車

16:30～17:20 「自動車用次世代空力・熱設計システムの研究開発の概要」

坪倉 誠
北海道大学大学院工学研究院 准教授

「高速蛇行する自動車周り流れの LES 解析」

岡田 義浩
マツダ株式会社 車両実研部 空力実研グループ
アシスタントマネージャー

「自動車車室内の振動騒音解析」

飯田 桂一郎
スズキ株式会社 四輪プラットフォーム設計部

パネルディスカッション

17:20～18:05 「産業界からの期待およびニーズ」

司会 加藤 千幸
東京大学生産技術研究所 教授

パネリスト

岩瀬 拓 株式会社日立製作所 日立研究所
機械研究センタ 主任研究員

小野 謙二 独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構
可視化技術研究チーム チームリーダー
神戸大学大学院システム情報学研究科
客員教授

西川 達雄 一般財団法人日本造船技術センター
技術開発部 設計システム開発課 課長

橋爪 祥光 スズキ株式会社 四輪プラットフォーム設計部
風洞解析課 課長

森合 秀樹 三菱重工業株式会社 誘導・推進事業部
エンジン・機器技術部 主席技師

18:05～18:10 閉会の挨拶

加藤 千幸
東京大学生産技術研究所
革新的シミュレーション研究センター長

「材料・構造・信頼性」部門

司会
吉川 暢宏
東京大学生産技術研究所 教授

13:30～13:40 開会の挨拶

畑田 敏夫
東京大学生産技術研究所 特任教授

セッション1 ― 次世代電子材料特性 ―

13:40～14:10 「PHASE の開発と現状」

山崎 隆浩
独立行政法人物質・材料研究機構
理論計算科学ユニット 特別研究員

14:10～14:40 「カーボン系材料の大規模解析」

小山 洋
独立行政法人物質・材料研究機構
理論計算科学ユニット 特別研究員

セッション2 ― 先進複合材料特性 ―

司会
山崎 隆浩
独立行政法人物質・材料研究機構
理論計算科学ユニット 特別研究員

14:40～15:10 「FrontCOMP による高圧水素容器設計の高度化」

青野 昌弘
株式会社先端力学シミュレーション研究所
技術開発部 エキスパート

15:10～15:40 「FrontCOMP による耐衝撃設計の高度化」

吉川 暢宏
東京大学生産技術研究所 教授

15:40～16:00 — ブレイク —

セッション3 — 大型構造物の健全性 —

司会
橋本 学
東京大学大学院新領域創成科学研究科 助教

16:00～16:30 「東北地方太平洋沖地震における高温工学試験研究炉 (HTTR) の
地震応答解析」

飯垣 和彦
独立行政法人日本原子力研究開発機構
大洗研究開発センター 高温工学試験
研究炉部 主査

16:30～17:00 「東北地方太平洋沖地震における HTTR 建屋の
3 次元地震観測シミュレーション事例」

西田 明美
独立行政法人日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター 研究主幹

セッション4 — 大規模製品の構造強度 —

司会
西田 明美
独立行政法人日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター 研究主幹

17:00～17:30 「オープンソース並列有限要素法プログラムによる
大規模構造解析の現状と課題」

橋本 学
東京大学大学院 新領域創成科学研究科 助教

17:30～18:00 「持続可能な社会へ向けたタイヤ開発のための
大規模数値解析技術に関する研究」

門脇 弘
株式会社ブリヂストン タイヤ研究部 フェロー

18:00～18:10 閉会の挨拶

畑田 敏夫
東京大学生産技術研究所 特任教授

「先端アプリ・共通基盤・PF」部門

司会
高木 亮治
独立行政法人宇宙航空研究開発機構
宇宙科学研究所 准教授

13:00～13:10 閉会の挨拶

畑田 敏夫
東京大学生産技術研究所 特任教授

セッション1 ― 共通基盤・PF ―

【HPC 統合利用環境】

13:10～13:50 「HPC/PF 開発と設計システムについて」

小野 謙二
独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構
可視化技術研究チーム チームリーダー
神戸大学大学院システム情報学研究科 客員教授

13:50～14:20 「アウトリーチサイトの活用と HPC/PF 連携」

川鍋 友宏
東京大学生産技術研究所 特任研究員

【HPC コア技術】

14:20～14:50 「階層型直交格子ソルバーの開発」

大西 順也
東京大学生産技術研究所 特任研究員

14:50～15:10 ― ブレイク ―

セッション2 ― 先端ものづくりアプリケーション ―

司会
大西 順也
東京大学生産技術研究所 特任研究員

【大規模高速多目的最適化アプリケーション】

15:10～15:40 「多数の目的関数を持つ設計最適化問題の効率的解法」

大山 聖
独立行政法人宇宙航空研究開発機構
宇宙科学研究所 准教授

【流体解析基盤アプリケーション】

15:40～16:10 「京における大規模流体計算の開発と核融合プラズマ解析への応用」

井戸村 泰宏
独立行政法人日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター 研究主幹

16:10～16:40 「高速流体解析プログラム UPACS の高度化と普及展開」

高木 亮治
独立行政法人宇宙航空研究開発機構
宇宙科学研究所 准教授

セッション3 ― 先端バイオアプリケーション ―

司会
小野 謙二
独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構
可視化技術研究チーム チームリーダー

【量子化学解析基盤アプリケーション】

16:40～17:10 「ProteinDF の高度化と普及展開」

佐藤 文俊
東京大学生産技術研究所 教授

17:10～17:40 「フラグメント分子軌道法プログラム ABINIT-MP の京への導入」

望月 祐志
立教大学理学部 教授

17:40～17:45 閉会の挨拶

畑田 敏夫
東京大学生産技術研究所 特任教授

c) 研究会

LES 研究会

さまざまな分野の研究者が集まり LES のモデルや計算法などの情報交換を行う場として、2008 年 9 月に LES 研究会が発足いたしました。現在 2 ヶ月に 1 回、東大生研にて研究会を開いています。

第 25 回 LES 研究会

日時：2013 年 5 月 14 日(火) 14:00-17:00

場所：東京大学生産技術研究所 An 棟 4 階 中セミナー室 1 (An401)

「横風を受ける鉄道車両周りの流れの LES」 中出孝次(鉄道総合技術研究所)

「コヒーレント構造スマゴリンスキーモデルを用いた格子ボルツマン法による大規模乱流計算」

小野寺直幸(東京工業大学)

第 26 回 LES 研究会

日時：2013 年 7 月 12 日(金) 14:00-17:00

場所：東京大学生産技術研究所 An 棟 4 階 中セミナー室 1 (An401)

「オープンソース CFD の現状と乱流解析ベンチマーク」 北風慎吾(アライドエンジニアリング)

「コヒーレント構造モデルの概要とその応用例」 小林宏充(慶応義塾大学)

第 27 回 LES 研究会

日時：2013 年 9 月 17 日(火) 14:00-17:00

場所：東京大学生産技術研究所 As 棟 3 階 中セミナー室 4 (As311)

「気象モデルの Terra Incognita のための乱流パラメタリゼーションの開発とテスト」

伊藤純至(東京大学)

「LES による建築物の風荷重評価 ―三次元角柱側面に発生するピーク負圧について―」

小野佳之(大林組)

第 28 回 LES 研究会

日時：2013 年 11 月 8 日(金) 14:00-17:00

場所：東京大学生産技術研究所 As 棟 3 階 中セミナー室 4 (As311)

「植生を有する流れ場の LES モデルの検討」 平岡久司(京都大学)

「噴霧燃焼場の large-eddy simulation」 渡邊裕章(電力中央研究所)

第 29 回 LES 研究会

日時：2014 年 1 月 14 日(火) 14:00-17:00

場所：東京大学生産技術研究所 An 棟 4 階 中セミナー室 1 (An401)

「圧縮性乱流に対する DNS と SGS モデル開発」 岡本正芳(静岡大学)

「LES による煙突からの排ガス上昇過程の再現」 瀧本浩史(電力中央研究所)

d) セミナー・講習会

第 4 回クラウドコンピューティング環境に対応した FrontFlow/blue の設計実務セミナー

「クラウドコンピューティング環境に対応した FrontFlow/blue の設計実務セミナー」シリーズは、研究開

発・設計現場でのクラウドコンピューティング環境を利用した FrontFlow/blue (FFB) の実行を想定している。今回のセミナーでは FOCUS スパコンシステムと会場内 PC をリモートで接続して一般企業の利用環境と同様のネットワーク環境を設定し、「車体モデル周り空力の LES 解析」を題材に CFD 設計実務の一連の作業を体験できるようにした。

開催日：平成 25 年 12 月 10 日(火)

場所：東京大学生産技術研究所 中セミナー室 4(As311・312)

主催：東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター

参加者数：22 名

第 1 回神戸ハンズオン:ABINIT-MP 講習会

2014 年度から「京」の上でのアプリケーションソフトの一つとして公開される予定の ABINIT-MP による FMO 計算を体験していただく講習会を開催しました。

開催日：平成 26 年 3 月 11 日(火)

場所：高度計算科学研究支援センター(計算科学センタービル) 2 階 実習室

主催：東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター

参加者数：10 名

第 5 回クラウドコンピューティング環境に対応した FrontFlow/blue の設計実務セミナー

「クラウドコンピューティング環境に対応した FrontFlow/blue の設計実務セミナー」シリーズは、研究開発・設計現場でのクラウドコンピューティング環境を利用した FrontFlow/blue (FFB) の実行を想定している。今回のセミナーでは FOCUS スパコンシステムと会場内 PC をリモートで接続して一般企業の利用環境と同様のネットワーク環境を設定し、プリズムテトラメッシュ作成を用いた車体空力を扱った FFB での非定常流れ場解析や大規模解析可視化など CFD 設計実務の一連の作業を体験できるようにした。

開催日：平成 26 年 3 月 28 日(金)

場所：高度計算科学研究支援センター(計算科学センタービル) 2 階 セミナー室

主催：東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター

参加者数：13 名

e) 共催・後援・その他

京コンピュータ・シンポジウム 2013

開催日：平成 25 年 5 月 13 日(月)

場所：イイノカンファレンスセンター 4 階 Room A

主催：独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構,
一般財団法人高度情報科学技術研究機構

RIKEN AICS HPC Summer School 2013

開 催 日 : 平成 25 年 8 月 5 日(月)～9 日(金)
場 所 : 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構 6 階講堂
主 催 : 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構,
東京大学情報基盤センター, 神戸大学大学院システム情報学研究科

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2013

開 催 日 : 平成 25 年 9 月 2 日(月)
場 所 : 学術総合センター 2F 中会議場
主 催 : 独立行政法人物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット

第 1 回 HPC ものづくりワークショップ

開 催 日 : 平成 25 年 11 月 29 日(金)
場 所 : 東京大学生産技術研究所 3 階 大会議室
主 催 : スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

第 4 回 AICS 国際シンポジウム

開 催 日 : 平成 25 年 12 月 2 日(月)～3 日(火)
場 所 : 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構
主 催 : 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構

第 6 回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム

開 催 日 : 平成 25 年 12 月 18 日(水)
場 所 : 日本科学未来館 7 階 みらい CAN ホール
主 催 : スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

第 6 回トップセミナー

開 催 日 : 平成 26 年 2 月 13 日(木)
場 所 : グランフロント大阪 北館 タワーC 8 階 カンファレンスルーム
主 催 : 公益財団法人計算科学振興財団

RIKEN AICS HPC Spring School 2013

開 催 日 : 平成 26 年 3 月 5 日(水)～7 日(金)
場 所 : 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構 6 階講堂
主 催 : 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構,
東京大学情報基盤センター, 神戸大学大学院システム情報学研究科

2) 国内および海外への研究成果の展開

a) 国際フロンティア産業メッセ 2013

本センターで研究開発を推進しているシミュレーションソフトウェアの紹介をするため、ブースの出展を行い、電子パネルの展示ならびにパンフレットの配布を行った。

開催日：2013年9月5日(木)・6日(金)

場 所：神戸国際展示場2号館 ポートアイランド

b) 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構(AICS)一般公開

HPCI 戦略プログラム「分野4 次世代ものづくり」のプロジェクトを推進する代表機関として「科学の広場」でブースを出展し、主に分野4 次世代ものづくりでの研究成果を紹介するために、流体に関するミニ実験や電子パネル展示、ならびにパンフレットの配布を行った。

開催日：2013年10月19日(土)

場 所：独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構 6階講堂

c) SC13

本センターで研究開発したソフトウェアの紹介を行うため、ブースの出展を行い、MR による計算成果の展示の他、電子パネルや動画、ポスターでも研究成果の展示を行った。

開催日：2013年11月17日(日)～22日(金)

場 所：コロラドコンベンションセンター (米国 デンバー)

3) ニュースレターの発行

本センターの成果を広く公開し、最新の取組みを紹介する目的で、CISS NES を発行している。今年度はNo.17号、No.18号を発行した。

(1) No.17号

発 行 日：平成25年6月

発行部数：2,000部

内容：1面

－巻頭言 エクサフロップス時代を見据えた国産アプリの普及に向けて

2面

－新センター紹介

3面～7面

－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プロジェクトの成果

8面

－HPC 基盤ソフトウェアの維持・強化に向けて、イベント案内

(2) No.18号

発 行 日：平成25年12月

発行部数：500部

内容：1面

－巻頭言 国プロ開発アプリの普及促進拠点の立ち上げ

2面

－計算工学ナビ紹介, ABINIT-MP 紹介

3面

－SC13 の報告

4面

－活動報告およびイベント開催案内

4)新聞・マスコミ報道

a) 新聞・WEB 新聞

- (1) 「立教大, みずほ情報, 東大生産研, 半導体の表面に結合するペプチドをシミュレート」 2013 年 5 月 1 日 日経バイオテク アカデミック版
- (2) 「東大生産研など, FMO 計算法を強化してナノバイオ複合系に適用」 2013 年 5 月 7 日 マイナビニュース
- (3) 「計算科学振興財団 東大生産研と連携協定締結 「京」の産業利用増へ」2013 年 5 月 8 日 神戸新聞
- (4) 「次世代スパコン 効率活用できる設計に 消費電力削減がカギ 中小向け解析サービス期待」 2013 年 5 月 24 日 日刊工業新聞
- (5) 「東大など, 光増幅器用ファイバー中のレアアース・エルビウムを直接観察することに成功」 2013 年 5 月 30 日 日経オンライン
- (6) 「東大発表: 光ファイバーの中のレアアースが観えた! 光ファイバ中のエルビウムの観察 に成功」 2013 年 5 月 31 日 OPTRONICS (Pick up ニュースとして掲載)
- (7) 「希土類の分布可視化 光ファイバー通信増幅に」 2013 年 6 月 4 日 日経産業新聞
- (8) 「東大生研, 光増幅器用光ファイバー内の「エルビウム」の直接観察に成功」 2013 年 6 月 4 日 マイナビニュース
- (9) 「Glimpsing rare earths in optical fibers」 2013, June 17th, Nikkei weekly
- (10) 「光ファイバーの中のレアアースが観えた!」 2013 年 6 月 18 日 Nanotech Japan
- (11) 「スパコン性能 中国が 1 位に 「京」4 位気にしない 関係者「実用度世界トップ」」 2013 年 6 月 18 日 神戸新聞
- (12) 「スパコン「京」 4 位でも「最先端なんです」」2013 年 6 月 21 日 東京新聞
- (13) 「光ファイバー中のエルビウムの観察に成功」 2013 年 9 月号 セラミックス誌 トピックスに紹介
- (14) 「スパコン「京」で開発費減 東大は車燃費向上で成果」 2013 年 9 月 24 日 日本経済新聞
- (15) 「セラコンデンサー材料 高温でも高い電気特性」 2013 年 10 月 23 日 化学工業日報
- (16) 「コンデンサー向けガラス素材」 2013 年 10 月 24 日 日刊工業新聞
- (17) 「セ氏 470℃でも蓄電できる材料」 2013 年 10 月 25 日 日経産業新聞
- (18) 「サーチャイト 製造業に広がるシミュレーション 日本発製品「京」から育てる」 2013 年 11 月 25 日 日経産業新聞
- (19) 「スパコン「京」活用へ ものづくりの実践例を発表」 2013 年 12 月 7 日 神戸新聞
- (20) 「液体ナノ分析法開発」 2013 年 12 月 25 日 日刊工業新聞
- (21) 「スパコン「京」ものづくり変革 開発コストを圧縮」 2014 年 1 月 9 日 日本経済新聞
- (22) 「スパコン新時代 空気の力予測...効率的に新車開発」 2014 年 2 月 3 日 産経新聞
- (23) 「車や船「京」で設計 理研, ソフト開発 企業の利用促す」 2014 年 3 月 11 日 日本経済新聞

b) マスコミ報道

- (1) スパコン開発に関するインタビュー, NHK おはよう日本, 2013 年 5 月 9 日

加藤千幸研究室 熱流体システム制御工学

加藤千幸研究室では、大規模な非定常流れ解析や風洞実験などを用いて、流れの非定常現象の解明や流れの変動に起因して発生する空力騒音の予測や低減を主な目的にして、基礎研究ならびにその応用研究を行っている。

(1) CFD によるキャビテーション流れ予測手法の高度化

流れの圧力が低下することにより発生するキャビテーションは、ターボ機械の性能を低下させるだけでなく、機械の破損や損傷の原因となることもあるが、未解決な課題も多く残されている。本研究では、従来のキャビテーション流れの数値解析に多用されている気液二相均質媒体モデルを対象として、その予測限界を調査するとともに、モデルの問題点を明らかにした。さらに、この問題点を解決するための新たなキャビテーションモデルを提案し、その効果を実証した。

(2) ポンプ水車の旋回失速の数値解析

太陽光発電や風力発電などの再生可能エネルギーの導入量を増やすためには、電力の需要と供給のバランスを取ることが必須であり、単体で水車運転とポンプ運転が可能なポンプ水車が改めて注目されている。特に、ポンプ運転をする場合に機械の中で大規模な旋回失速が発生することにより、ポンプの運転条件が制限されてしまうという問題がある。本研究では、スイス連邦ローザンヌ工科大学との共同研究により、大規模な流体数値解析を駆使してポンプ運転において旋回失速が発生する詳細なメカニズムを解明することに成功した。

(3) マグナス風車の研究開発

マグナス風車は回転円柱にスパイラルフィンを取り付けると揚抗比が改善されるという現象を応用した新しいタイプの風車である。昨年度は、回転するロータの中でスパイラルフィン付きシリンダーが自転する場合の風車まると解析を実現したが、今年度はさらに格子解像度を向上させた計算を実施し、流れの構造と風車性能との関係を調査している。

(4) 乱れの中に置かれた翼、および風車から発生する騒音に関する研究

周辺環境を維持する観点から、風車から発生する騒音の予測や低減は重要な技術課題であるが、風車は乱れを伴った風の中で稼働する場合が多いため、このような状況における騒音予測モデルの高度化が望まれていた。本研究では風洞試験や大規模な流体数値解析を駆使することにより、乱れの中に置かれた翼から発生する騒音の基本的な特性を解明し、得られた知見に基づき、風車騒音の予測モデルの高度化に関する提案を行った。

その他、民間企業等の共同研究として、曳航水槽試験を完全に数値解析により置き換えることを狙った乱流の直接数値シミュレーション、車体周りの乱流渦の挙動を詳細に把握し、それを制御することにより車両の空力性能の向上させることを目的とした研究、ファンから発生する流体騒音の予測手法に関する研究なども行っている。

(1)研究成果一覧

欧文論文:

- 1) Dulini Yasara Mudunkotuwa Mudunkotuwe Hitiwadi Vidanelage, Chisachi Kato: Large Eddy Simulations of 2D and Open-Tip Airfoils Using Voxel Meshes, May 2013, Procedia Engineering Vol.61 (2013), pp. 32-39

和文論文:

- 1) 吉村忍, 徳永健一, 杉本振一郎, 奥田洋司, 末光啓二, 加藤千幸, 山出吉伸, 吉村英人: 並列モデル細分化による大規模有限要素解析の効率化, 2013 年 5 月, 日本計算工学会論文集 No.20130012
- 2) 忠津雅也, 山村淳, 田中博, 安木剛, 高山務, 山出吉伸, 鈴木康方, 加藤千幸: 2 Box 車の空気抵抗低減に関する研究-後流と表面圧力の検証及び車両後流渦と空気抵抗との関係-, 2013 年 9 月, 自動車技術会論文集 Vol.44, No.5, pp.1287-1294
- 3) 鈴木貴之, 加藤千幸: 均質媒体モデルを用いたキャビテーション解析の問題, 2013 年 12 月, 日本機械学会論文集(B 編), 79 巻, 808 号, pp.2743-2758

国際会議予稿集:

- 1) Taku Iwase, Hideshi Obara, Hiroyasu Yoneyama, Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato: Calculation of Aerodynamic Noise for Centrifugal Fan of Air-conditioner, July 2013, ASME2013 Fluids Engineering Division Summer Meeting

国際会議アブストラクト:

- 1) Chisachi Kato: Industrial applications of very-large-scale LES by using FrontFlow/blue, December 2013, Japan-Korea CFD Workshop 2013

著書・訳書:

- 1) 加藤千幸, 他 28 名: ナノ・マイクロスケール機械工学, 2014 年 3 月, 東京大学出版会

学会講演論文:

- 1) 加藤由博, 白田雅幸, 土肥義彦, 加藤裕之, 伊藤健, 塩原辰郎, 畔柳洋, 飯田明由, 加藤千幸: スパイラルフィン付マグナス風車の性能計測, 2013 年 6 月, 日本機械学会第 18 回動力・エネルギー技術シンポジウム, 講演論文集
- 2) 小林典彰, 山本勝幸, 西村慶太, 鈴木康方, 西村勝彦, 鈴木常夫, 加藤千幸: 風洞流入の乱れ強度と渦スケールを変化させた場合の翼騒音の計測, 2013 年 9 月, 日本機械学会 2013 年度年次大会講演論文集 CD-ROM
- 3) 鈴木康方, 杉江正峻, 水谷翔太, 加藤千幸, 伊藤慎一郎, 金野祥久: ステレオ PIV による翼端渦流れの三次元渦構造の計測, 2013 年 11 月, 第 91 期日本機械学会流体工学部門講演会, 講演論文集
- 4) 小林典彰, 山本勝幸, 西村慶太, 鈴木康方, 西村勝彦, 鈴木常夫, 加藤千幸: 主流の乱れ強度

と渦スケールが翼の非定常空力特性と騒音特性に与える影響, 2013 年 11 年, 第 91 期日本機械学会流体工学部門講演会, 講演論文集

- 5) 萩谷功, 加藤千幸, 山出吉伸, 長原孝英, 深谷征史: LES 解析を用いた斜流ポンプの不安定特性発生メカニズムの解明, 2013 年 11 年, 第 91 期日本機械学会流体工学部門講演会, 講演論文集
- 6) 郭陽, 加藤千幸, 山出吉伸, 太田有, 岩瀬拓, 高山糧: 遠心ファン騒音の数値予測, 2013 年 12 月, 第 27 回数値流体力学シンポジウム講演論文集
- 7) 飯田明由, 加藤千幸, 吉村忍, 飯田桂一郎, 橋爪祥光, 山出吉伸, 秋葉博, 恩田邦藏: 空力・構造振動・音響連成解析による自動車車室内騒音の予測, 2013 年 12 月, 第 27 回数値流体力学シンポジウム講演論文集

総説・解説:

- 1) 加藤千幸: 第 26 回数値流体力学シンポジウム, 計算工学, Vol.18, No.2, pp.30-31
- 2) 加藤千幸: 京の産業利用を加速するために, 一般社団法人高度情報科学技術研究機構 RIST NEWS, No.55 (2013), pp.1-2

(2) 研究プロジェクト

民間等との共同研究:

- 1) 「高フィデリティー流体解析技術の開発」
- 2) 「境界層および剥離せん断層内の乱流構造に着目した空気抵抗低減技術の開発」
- 3) 「CFD による船舶性能推定精度向上に関する研究」
- 4) 「乱流流入風騒音モデル開発」

加藤信介研究室 都市・建築環境調整工学

加藤信介研究室では、都市環境から室内環境までの数値シミュレーション・風洞実験・実測等による空気環境に関する研究を行っている。本年度は、都市や建築のリスク評価に利用するシミュレーション技術の開発や、都市や室内といった種々の環境下における物質拡散現象の調査・解明の一環として、リバースシミュレーションによる健康危険物質の放出量推定手法の開発を行った。また、健康危険物質の大気中の拡散に関する研究だけではなく、それらが地面に沈着し表土が汚染されたときを想定し、長期間にわたる再飛散現象を考慮した長期的な影響についての検討を進めている。

(1) リバースシミュレーション(逆解析)を用いた放出量推定手法の開発

福島第一原子力発電所事故のような場合、放射性物質の放出量は時間変動が大きかつ、爆発的な瞬間放出量は推定困難である。従来の定常放出を前提とした放出量推定手法では、推定精度および時間分解能に限界がある。この限界を解決する手段として、当研究室では粒子拡散モデルの特徴である粒子情報(放出経過時間と放出強度)を活用して、任意の時間変化に対応可能な非定常放出量推定手法を開発した。また、従来の放出量推定手法は固定観測データ主体であったため、移動観測データを利用する作業に多大な日数を必要とした。当研究室で開発する手法は、時空間の4次元移動観測データを被ばく予測計算結果と自動的に比較、補正するシステムであり、暫定放出量を数時間後、詳細値を数日後に推定可能とすることを目標としている。放出量推定を高度化することにより敏速な避難計画の立案になることが期待できる。

(2) 再飛散を考慮し長期被ばく線量の評価手法の開発

福島原子力爆発事故で放射性物質は風により輸送・拡散され地面に沈着し表土を汚染したり、また再飛散現象が起こり、人体に悪影響を与える可能性が高いため長期的な影響評価が必要である。当研究室では再飛散現象を考慮した長期被ばく評価手法として、チェルノブイリ事故後、EU が開発された European Model for Inhabited areas(以下: ERMIN)を用いて長期被ばく線量の評価を行っている。特に ERMIN モデルが福島原子力爆発事故の場合でも適応可能であるかその有効性を把握するために日本版土地利用データベースのインストール、福島地域放射能観測データベースのインストールを行った上に、長期被ばく線量の計算を行い観測データとの比較も行った。さらに福島観測データの解析により、ERMIN モデルの長期被ばく線量評価計算時に大きく影響する沈着速度 $0.011.0(\text{cm/sec})$ 及び再飛散係数 $10^{-8}(\text{m}^{-1})$ が福島事故の場合でも適応可能であることを確認した。今後は除染後のデータを集め除染計算を入れたときの比較を行う予定であり、この研究により汚染地域の安全評価および除染効果の推定に寄与できる。

(1)研究成果一覧

欧文論文:

- 1) Weirong Zhang, Kyosuke Hiyama, Shinsuke Kato, Yoshihiro Ishida: Building energy simulation considering spatial temperature distribution for nonuniform indoor environment, Building and Environment, Volume 63, 2013, pp.89-96

和文論文:

- 1) 樋山恭助, 窪田真和, 加藤信介: 環境系シミュレーションのためのデフォルト設定値導出手法の開発 BIM データの再利用による最適建築設計支援手法の提案, 2013 年 4 月, 日本建築学会環境系論文集, Vol.78, No.686, pp.367-374
- 2) 何佳, 加藤信介, 李時桓, 張偉榮: トラックキャビンに対するダブルスキン技術の適用 第 1 報—炎天下駐車時に通気層を用いた二重天井システムの温熱環境改善効果の数値的検討, 2013 年 5 月, 空気調和・衛生工学会論文集, 第 194 号, pp.11-21
- 3) 姜允敬, 加藤信介, 柳宇: マイクロ波照射による実大模型の気化式加湿器エレメントの殺菌効果 空調用気化式加湿器のマイクロ波殺菌に関する研究(その 3), 2013 年 6 月, 日本建築学会環境系論文集, No.688, pp.507-512
- 4) 達晃一, 星野邦広, 岩崎貴普, 曾根 孝, 何佳, 神野透人, 加藤信介: プレート吸着による SVOCS 評価法の基礎検討 —DHEP の評価方法—, 2013 年 8 月, 空気調和・衛生工学会論文集, 第 197 号, pp.19-26
- 5) 姜允敬, 加藤信介, 柳宇: 電界シミュレーションによる気化式加湿器エレメントのマイクロ波吸収量分布に関する基礎検討 空調用気化式加湿器のマイクロ波殺菌に関する研究(その 4), 2013 年 11 月, 日本建築学会環境系論文集, No.693, pp.865

国際会議アブストラクト:

- 1) Xuan CHENG, Kyosuke HIYAMA, Shinsuke KATO, Sihwan LEE: Sensitivity Analysis of Heat Transfer Coefficient to Onsite U-Value Measurement Method, June 2013, CLIMA 2013
- 2) Daisuke Kawahara, Shinsuke Kato, Kyosuke Hiyama, Sihwan Lee: Evaluation of Thermal Insulation Performance of Window Frame Applied Dynamic Insulation System Using Experimental Model House, June 2013, CLIMA 2013
- 3) Beungyong Park, Shinsuke Kato, Sihwan Lee: An Experimental Investigation of Optimization Thermal Cycle Time for Enhancing the Performance of Desiccant Based Heat Recovery Air Condition System, June 2013, CLIMA 2013
- 4) Jingjing Wang, Alan Hedge, Tiffany A. Koszalka, Atsuo Ishikawa, Shinsuke Kato, Jianshun Zhang: Effects of Ventilation on Perceived Indoor Environmental Quality and Performance on Creativity and Productivity Tasks, June 2013, CLIMA 2013
- 5) Yucel M, S. Kato: Implementation of the WRF-urban canopy model to Turkey, September 2013, INTERNATIONAL WORKSHOP ON PHYSICAL MODELLING OF FLOW AND DISPERSION

PHENOMENA, PHYSMOD 2013

- 6) Shinsuke KATO, Ryohji Ohba, Minsik KIM, Masamichi Oura, Ryohji Ohba, Jiro Yoneda, Masayuki Takigawa, Paul Bieringer, Bent Lauritzen: A Radiation Estimation Method for use in the Initial and Intermediate Stages of a Nuclear Accident, January 2014, AMS2014

学会講演論文:

- 1) 金敏植, 加藤信介, 樋山恭助: 広域の表土汚染地域における人体汚染物質摂取に関する研究, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-1, pp.867-868
- 2) 程ケン, 加藤信介, 樋山恭助: 既存住宅の断熱性能診断に関する技術検証(その 9) 熱画像法における総合熱伝達率センサーの精度に関する検討, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.105-106
- 3) 二川智吏, 加藤信介, 李時桓, 樋山恭助, 河原大輔, 手塚純一: 既存住宅の断熱性能診断に関する技術検証(その 10) 実住宅の改修前・後の断熱診断手法と診断ツールの構築, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.107-108
- 4) 河原大輔, 加藤信介, 樋山恭助, 八重樫彩, 大浦豊, 手塚純一: 住宅開口部へのダイナミックインシュレーションの適用(その 14) 窓部にダイナミック・インシュレーションを適用した改修住宅の詳細と性能評価試験の概要, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.137-138
- 5) 八重樫彩, 加藤信介, 樋山恭助, 河原大輔, 大浦豊, 手塚純一: 住宅開口部へのダイナミックインシュレーションの適用(その 15) 窓部にダイナミック・インシュレーションを適用した改修住宅の性能評価試験結果, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.139-140
- 6) 朝岡幸康, 加藤信介, 樋山恭助, 河原大輔, 大浦豊, 野村吉和, 森勝彦: 住宅開口部へのダイナミックインシュレーションの適用(その 16) 実住宅へ設置時の換気量制御に関する検討, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.141-142
- 7) 牧野由佳, 趙旺熙, 岩本静男, 河野仁志, 加藤信介: 空調方式の違いによる結露リスク評価に関する研究 第 1 報 事務所ビルにおける室内結露評価, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.241-242
- 8) 牧野由佳, 趙旺熙, 岩本静男, 河野仁志, 加藤信介: 空調方式の違いによる結露リスク評価に関する研究 第 1 報 事務所ビルにおける室内結露評価, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.241-242
- 9) 吉富透悟, 加藤信介, 林侃, 樋山恭助, 手塚純一: シミュレーションによる壁体内通気住宅の性能評価(その 1) 通気量に対する各部開口面積の感度分析, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.433-444
- 10) 林侃, 加藤信介, 吉富透悟, 樋山恭助, 手塚純一: シミュレーションによる壁体内通気住宅の性能評価(その 2) 自然室温低下及び冷房負荷削減効果について, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.435-436
- 11) 陳石, 加藤信介, 姜允敬, 中尾圭佑: 人の動きによる室内汚染物質の拡散の評価に関する CFD 解析, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.673-674

- 12) 趙旺熙, 金政一, 川本光一, 河野仁志, 加藤信介, 大岡龍三, 小金井真, 岩本静男: 非結露型次世代空調システムに関する研究(その 23) デシカントローターの熱パージによる冬季の加湿性能, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.925-926
- 13) 小林遼一, 加藤信介, 樋山恭助, 手塚純一, 二川智吏: 住宅用バッチ式デシカント空調システムの実装と性能評価(その 3) 数値解析モデルを用いた感度分析, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.1031-1032
- 14) 関根賢太郎, 加藤信介, 黄孝根, 吉富透悟, 斎藤祐二, 佐藤大樹: 業務用ビルの内部負荷に関する調査研究(その 1) 実稼働状態での負荷特性の把握, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.1041-1042
- 15) 黄孝根, 吉富透悟, 張偉栄, 加藤信介, 樋山恭助, 関根賢太郎: 業務用ビルの内部負荷に関して調査研究(その 2) 恒温室でのオフィス機器の発熱性状の把握, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.1043-1044
- 16) 金政一, 加藤信介: 家庭用燃料電池の排熱を利用した住宅における省エネかつ快適な冷暖房方式に関する研究(その 3) 排熱の冷房利用を考慮したデシカント空調機を用いた蒸発冷却実験, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.1081-1082
- 17) 藤間久秀, 加藤信介, 樋山恭助, 高橋祐樹, 石川敦雄: 国際生活機能分類 ICF の創造性評価への適用, 2013 年 8 月, 日本建築学会大会学術講演梗概集, D-2, pp.1025-1260
- 18) 松縄堅, 加藤信介, 湯澤秀樹, 近藤武士, 杉原義文, 林立也, 森川泰成, 関根賢太郎, 河野仁志, 岩本静男, 小金井真, 樋山恭助: 業務用ビルを対象とする液冷空調システムの開発(第 1 報) 液冷空調システム導入の必要性および開発課題, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.17-20
- 19) 湯澤秀樹, 杉原義文, 近藤武士, 林立也, 関根賢太郎, 河野仁志, 加藤信介: 業務用ビルを対象とする液冷空調システムの開発(第 2 報) モデル建物とモデル空調システムの検討, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.21-24
- 20) 関根賢太郎, 佐藤大樹, 黄孝根, 吉富透悟, 松縄堅, 加藤信介: 業務用ビルを対象とする液冷空調システムの開発(第 3 報) 内部負荷液冷システムの概要と内部発熱機器の実稼働状態での負荷特性把握, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.25-28
- 21) 吉富透悟, 黄孝根, 樋山恭助, 関根賢太郎, 松縄堅, 加藤信介: 業務用ビルを対象とする液冷空調システムの開発(第 4 報) 機器単体の発熱性状把握のためのチャンバー測定実験, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.29-32
- 22) 黄孝根, 吉富透悟, 関根賢太郎, 樋山恭助, 松縄堅, 加藤信介: 業務用ビルを対象とする液冷空調システムの開発(第 5 報) 機器単体からの対流・放射放熱に関するシミュレーション解析, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.33-36
- 23) 佐藤大樹, 関根賢太郎, 森川泰成, 松縄堅, 加藤信介: 業務用ビルを対象とする液冷空調システムの開発(第 6 報) 内部負荷液冷システム仕様検討のための執務室内の対流・放射連成解析, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.37-40

- 24) 村上栄造, 河野仁志, 岩本静男, 趙旺熙, 小金井真, 松縄堅, 加藤信介: 業務用ビルを対象とする液冷空調システムの開発(第 7 報)ヒートポンプ熱源を利用するデシカント空調システムにおける COP の検討, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.41-44
- 25) 牧野由佳, 趙旺熙, 岩本静男, 河野仁志, 加藤信介, 松縄堅: 業務用ビルを対象とする液冷空調システムの開発(第 8 報)結露リスク評価手法の構築, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.45-48
- 26) 河野仁志, 正田睦生, 大久保豊晴, 松縄堅, 加藤信介: 業務用ビルを対象とする液冷空調システムの開発(第 9 報)液冷配水システムにおける搬送動力低減に関する検討, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.49-52
- 27) 杉原義文, 湯澤秀樹, 近藤武士, 林立也, 松縄堅, 加藤信介: 業務用ビルを対象とする液冷空調システムの開発(第 10 報)ZEB エネルギー管理システムの検討, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.53-56
- 28) 朴炳龍, 加藤信介: コージェネレーション対応型潜熱・顕熱分離空調システムの開発(その 6)吸着剤が塗布された熱交換器における熱・水蒸気移動の数値解析, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.297-300
- 29) 永野秀明, 津上貴光, 尾関義一, 郡逸平, 加藤信介: 非等温車室内の熱伝達性状の把握(第 2 報)空調モードと温度条件の差異の検討, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 3 巻, pp.385-388
- 30) 小林美子, 加藤信介, 吉富透悟, 樋山恭助, 手塚純一: シミュレーションによる壁体内通気住宅の性能評価(その 1)各部通気性状の検討と各部開口面積の感度分析, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 4 巻, pp.165-168
- 31) 八重樫彩, 樋山恭助, 加藤信介, 手塚純一, 二川智吏: 木造軸組構法へのダイナミックインシュレーションの適用と実環境下における断熱性能評価, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 5 巻, pp.73-76
- 32) 中川友貴, 大森敏明, 金政一, 張偉榮, 加藤信介: シミュレーションによるスマートハウスの温熱環境とエネルギーの予測(その 1)標準的な住宅の評価モデルの構築, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 5 巻, pp.197-200
- 33) 陳石, 加藤信介: 人の直線移動による部屋間の気流の影響に関する CFD 解析(その 2)移動による汚染物質の輸送性状の検討, 2013 年 9 月, 日本空気調和・衛生工学会大会学術講演梗概集, 第 7 巻, pp.121-124
- 34) 加藤信介: 病院の省エネルギー最新動向, 2013 年 10 月, 第 42 回日本医療福祉設備学会, p.28
- 35) 金敏植, 加藤信介, 大場良二, 大浦理路: 福島第一原子力発電所事故後の長期被ばく評価に関する研究(その 1), 2014 年 3 月, 日本原子力学会「2014 年春の年会」, B30
- 36) 大浦理路, 加藤信介, 大場良二, 金敏植: 原子力発電所事故時の放出量推定手法高度化に関する研究(その 1), 2014 年 3 月, 日本原子力学会「2014 年春の年会」, B24

総説・解説:

- 1) 金敏植, 加藤信介, 大場良二, 大浦理路: 福島第一原子力発電所事故後の長期被ばく評価に関する研究, 2014 年 1 月, 生産研究 66 巻 1 号, pp.43-45
- 2) 黄孝根, 吉富透悟, 加藤信介: 機器単体からの対流・放射放熱に関するシミュレーション解析, 2014 年 1 月, 生産研究 66 巻 1 号, pp.47-51

(2) 研究プロジェクト

受託研究:

①公的資金

- 1) 文部科学省原子力基礎基盤戦略研究イニシアティブ(平成 24～26 年度)
「原子力発電所事故時の放出量及び再飛散量推定手法の高度化に関する研究」

大島まり研究室 バイオ・マイクロ流体力学

大島研究室は、シミュレーションを用いて脳梗塞などの循環器系疾患の原因となる血管病変のメカニズムを解明するとともに、その知見に基づき治療・診断のための支援システムの開発を行っている。

MRI あるいは CT などの画像診断装置は著しい発展を示している。しかし、血流の血管壁に与える影響を把握するために必要な空間・時間解像度を現行の装置で得ることは難しい。そこで、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、患者個別に対応可能であり、かつ速度およびそれに関連した力学的情報を得ることが可能となる。本研究では、脳血管系を中心に、脳循環および脳動脈瘤、総頸動脈の動脈硬化症などの循環器系疾患を取り上げ、医用画像に基づくマルチスケール・フィジックスシミュレーションの開発を行っている。今年度の研究成果としての具体的な内容を以下にまとめる。

(1) 血液循環器系の血流解析と 1 次元—0 次元全身解析の統合

動脈硬化症や脳動脈瘤などの血管病変において、速度分布や壁面せん断応力などの血行力学的な動態を把握することは重要である。このような速度場の情報は流入あるいは流出境界条件の影響を受けやすい。そこで、流量分配および壁面せん断応力分布をより正確に把握できるために、全身循環系の影響をモデル化した 1 次元—0 次元のマルチスケール流出境界条件を開発し、医用画像から構築した患者個別の総頸動脈および中大脳動脈の 3 次元血流解析に本研究で開発したマルチスケール境界条件を適用した。3 次元および 1 次元—0 次元解析の融合部分での数値不安定性は見られず、安定的にマルチスケールシミュレーションを行うことが確認され、また本手法の有効性の検証を行った。

(2) 流体構造連成解析における境界条件の検討と計算安定化に向けたプログラム開発

3 次元の流体構造解析と 1 次元—0 次元のマルチスケール流出境界条件をカップリングした際に、3 次元と 1 次元の境界接合部での数値不安定性の問題が生じた。また、このことにより、3 次元の流体構造連成解析の収束性が悪くなるという問題も生じたため、プログラムの効率化のためにプログラム構成も含めて全面的に見直し、大幅な変更を行った。全て変更が終了し、3 次元流体構造解析と 1 次元—0 次元の末梢血管モデルの融合部で見られた数値不安定性も見られず、問題なく収束することが確認された。また、流体部および構造部の力学的パラメータ、OSI(Oscillatory Index)、主応力や主ひずみなどのポスト部分も整え、形状あるいは境界条件の違いがどのような影響を与えているのかを検証した。

(3) 1 次元—0 次元全身循環血流解析による術後予測

血管狭さく部に対してステント留置手術を行うことにより、血行動態の改善が図られる。しかし、患者によっては急激な血流の変化により、過灌流状態となり脳内出血を起こす場合がある。そこで、術前の患者の形状および流速データを用いてステント手術を想定した血流解析を行い、血行動態に関する情報を得る。さらに、それらの結果を術後のデータと比較することにより、本手法の妥当性を評価した。システムティックなパラメータ調整などの課題はあるが、解析結果と術後のデータとは良好な一致を示した。

(1)研究成果一覧

欧文論文:

- 1) Shigeki Yamada, Kenji Hashimoto, Hideki Ogata, Yoshihiko Watanabe, Marie Oshima, Hidenori Miyake: Calcification at orifices of aortic arch branches is a reliable and significant marker of stenosis at carotid bifurcation and intracranial arteries, February 2014, European Journal of Radiology, Vol.83, issue 2, pp.384-390

和文論文:

- 1) 大島まり, 小林匡治: 予測診断を目指した医用画像に基づく血流シミュレーション, 2013年6月, 日本画像学会誌, 第52巻, 第3号: 212-218 (2013)

国際会議予稿集:

- 1) Ryota Abe, Kiyomi Niki, Shiori Yauch, Marie Oshima, Kei Fujisawa, Shu Takagi, Fuyou Liang, Motoaki Sugawara: Simulation of ascending aortic flow using a computational model of the entire cardiovascular system: evaluation by wave intensity, September 2013, Proceedings of u-Healthcare 2013

国際会議アブストラクト:

- 1) F.Y. Liang, M. Oshima, and S. Takagi: A computational study on cerebral hemodynamic changes associated with carotid arterial surgery, December 2013, APCOM & ISCM 2013 (5th Asia Pacific congress on computational mechanics & 4th international symposium on computational mechanics)
- 2) Masaharu Kobayashi, Marie Oshima: Development of an Image-based Modeling System to Investigate Evolution of the Morphological Changes of an Abdominal Aortic Aneurysm, December 2013, APCOM & ISCM 2013 (5th Asia Pacific congress on computational mechanics & 4th international symposium on computational mechanics)
- 3) Marie Oshima, Masaharu Kobayashi : Numerical Investigation of the Effects of the Cerebrovascular & Neck Circulations on multi-Scale Simulation, December 2013, The 3rd International Conference on Computational & Mathematical Biomedical Engineering
- 4) Marie Oshima, Yuta Ishigami : FSI simulation of a cerebral aneurysm with peripheral network of cerebrovascular circular system, March 2014, Advances in Computational Fluid Structure Interaction and Flow Simulation (AFSI 2014)

著書・訳書:

- 1) 日本評論社編集部 大島まり 一部執筆: 物理学ガイドンス, 2014 年 2 月, 日本評論社

学会講演論文:

- 1) 矢島康治, 岩井俊憲, 本田康二, 山下陽介, 村田彰吾, 藤田紘一, 渋谷直樹, 島崎一夫, 大村進, 大島まり, 藤内祝: 咽頭における CFD を用いた流体力学解析時の流入境界条件による影響, 2013 年 9 月, 第 12 回日本睡眠歯科学会総会

- 2) 矢島康治, 岩井俊憲, 本田康二, 山下陽介, 村田彰吾, 藤田紘一, 渋谷直樹, 島崎一夫, 大村進, 大島まり, 藤内祝: 下顎後方移動術前後における咽頭部圧力損失の変化—CFD による流体力学解析—, 2013 年 9 月, 第 12 回日本睡眠歯科学会総会
- 3) 松浦佑樹, 大石正道, 向井信彦, 大島まり, 張英夏: 混相流断層画像を基にした液滴の 3 次元形状の再構築, 2013 年 11 月, 映像表現&コンピュータグラフィックス研究会, 映像情報メディア学会技術報告
- 4) 竹内浩明, 山本創太, 保科克行, 赤井隆文, 大島まり: 腹部大動脈瘤診断のための形態評価指標の基礎的検討, 2013 年 11 月, 日本機械学会, 第 26 回計算力学講演会(CMD2013) JSME 26th Computational Mechanics Division Conference
- 5) 石上雄太, 山本創太, 大島まり: 血流の流体構造連成解析における材料特性が及ぼす影響, 2013 年 12 月, 第 27 回数値流体力学シンポジウム
- 6) 北島大朗, 大島まり, 岩井俊憲, 大原良仁, 矢島康治, 光藤健司, 藤内祝: 流体解析を用いた外頸動脈の抗癌剤分配シミュレーション, 2014 年 1 月, 第 26 回バイオエンジニアリング講演会, 第 26 回バイオエンジニアリング講演会講演論文集, p217
- 7) 石上雄太, 大島まり: 3 次元流体構造連成解析と 1 次元 0 次元末梢欠陥モデルのカップリングを目指した血流シミュレーション, 2014 年 1 月, 第 26 回バイオエンジニアリング講演会, 第 26 回バイオエンジニアリング講演会講演論文集, pp.225-226
- 8) 北島大朗, 大島まり, 岩井俊憲, 大原良仁, 矢島康治, 光藤健司, 藤内祝: 流体解析を用いた外頸動脈の抗癌剤分配シミュレーション, 2014 年 1 月, 第 26 回バイオエンジニアリング講演会, 第 26 回バイオエンジニアリング講演会講演論文集, pp.217-218
- 9) 矢島康治, 岩井俊憲, 喜田壮馬, 北島大朗, 大原良仁, 大村進, 小野卓史, 大島まり, 藤内祝: 上気道狭窄が咽頭での吸気に及ぼす影響, 2014 年 1 月, 第 26 回バイオエンジニアリング講演会, 第 26 回バイオエンジニアリング講演会講演論文集, pp.521-522
- 10) 石上雄太, 大島まり: 血流と血管壁のマルチスケール流体構造連成解析, 2014 年 3 月, 第 29 回生研 TSFD シンポジウム講演論文集, pp.19-23
- 11) 長谷川智也, 伊藤嵩格, 山本創太, 大島まり, 保科克行, 赤井隆文: ステントグラフトの力学特性および腹部大動脈瘤内留置時挙動の生体力学的評価, 2014 年 3 月, 日本機械学会 関東支部 第 20 期総会・講演会

総説・解説:

- 1) 藤澤慶, Fuyou Liang, 小林匡治, 山田茂樹, 高木周, 大島まり: 全身循環を考慮した脳血流シミュレーションと可視化, 2013 年 5 月, 生産研究, 65 巻, 3 号, pp281-284

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(B)「血管内治療のための In vivo 流体構造連成解析システムの開発」
- 2) 挑戦的萌芽研究「色収差を利用した3次元共焦点マイクロPIVシステムの開発」

民間等との共同研究

- 1) 「共焦点マイクロ PIV による流体内部流動の可視化」

受託研究

①公的資金以外

- 1) 「血管内治療のための in vivo シミュレーションシステムの開発研究」

吉川暢宏研究室 マルチスケール固体力学

連続体力学の枠組みでの応力解析法としての有限要素法は、均質・等方性材料とみなせる金属材料からなる機械・構造物の強度評価に多大な貢献をしてきた。応力規準による強度モデルを実験的に構築し得たことがその主因であったが、炭素繊維強化プラスチック(Carbon Fiber Reinforced Plastic, CFRP)に代表される、非均質性が顕在化する複合材料に対しては、実験的に強度モデルを構築する方法論が確立されなかったため、有限要素法の価値が過小評価されていた。材料の非均質性により生じる複雑な力学場が、既往の実験的強度評価法の適用を阻む主因となっていると捉えれば、炭素繊維あるいは炭素繊維束と樹脂を明確に区分し詳細に有限要素モデル化することで、実験的方法論を超える新たな展開が拓けるものと考えられる。その見地から下記の研究課題を設定している。

(1) 複合材料強度信頼性評価シミュレーターの開発

繊維束の形状と配置を正確に表現し、樹脂部分を明確に区分する、メゾスケール有限要素モデルを機軸とした確度の高い強度信頼性解析を行うためのシミュレーションソフトウェアを開発し、1) 賦型プロセス、2) 硬化プロセス、3) 損傷発展について、メゾスケールパラメータを直接的にハンドリングしながら、強度に関わる力学場を評価可能とした。

(2) 超高压水素容器の開発

燃料電池自動車用高压水素スタンドの主要部品である 100 MPa 級複合容器の開発を支援するため、メゾスケールシミュレーションを援用した炭素繊維強化複合材料の強度発現機構の解明に取り組んでいる。繊維束の配置や断面寸法、硬化スケジュールや樹脂の特性など、メゾスケールパラメータの違いが容器破裂強度に与える影響を定量的に評価する手法を開発し、最適設計への展開を図っている。

(3) ジェットエンジンファンブレードの開発

軽量で耐衝撃性の高い炭素繊維強化プラスチック製ジェットエンジンファンブレード開発のため、メゾスケール有限要素法により衝撃破壊メカニズムを明らかにし、材料設計指針を得るための方法論を検討している。「京」を利用した超大規模並列計算の実施をにらみ、動的強度評価手法の開発を行っている。

また連続体力学においては、空孔や表面といったいわゆる境界形状が力学場を支配する。計測技術を駆使し非均質構造の幾何学性状を正確に捕捉し、詳細な有限要素モデルを作成することにより、材料の変形特性と強度を的確に評価可能である。その観点より次の課題を設定している。

(4) シミュレーション統合材料試験に基づくポーラスアルミ材料の特性評価

軽量性と衝撃吸収性を両立する材料として期待が高まっているポーラスアルミ材料の実用化を促進するため、X 線 CT により取得した内部空隙画像から有限要素モデルを構築し、シミュレーションと実験を併用した材料特性の評価方法を開発している。ポロシティを徐々に変化させた傾斜材料の特質を明らかにすることで、実用化への指針を得ている。

(1)研究成果一覧

欧文論文:

- 1) Yoshihiko Hangai, Ryo Yamaguchi, Shunya Takahashi, Takao Utsunomiya, Osamu Kuwazuru, and Nobuhiro Yoshikawa: Deformation Behavior Estimation of Aluminum Foam by X-ray CT Image-based Finite Element Analysis, April 2013, Metallurgical and Materials Transactions A, Vol. 44, No. 4, pp.1880-1886
- 2) Yoshihiko Hangai, Hiroaki Yoshida, Ryo Yamaguchi, Osamu Kuwazuru, Nobuhiro Yoshikawa: Relationship between Amount of Residual NaCl and Compressive Properties of Porous Al/NaCl Composites Fabricated by Sintering and Dissolution Process, June 2013, Materials Transactions, Vol. 54, No. 5, pp. 850-853
- 3) Yoshihiko Hangai, Hiroaki Yoshida, Osamu Kuwazuru, Nobuhiro Yoshikawa: Effect of Die Material on Compressive Properties of Open-Cell Porous Aluminum Fabricated by Friction Powder Compaction Process, June 2013, Materials Transactions, Vol. 54, No. 6, pp. 1057-1059
- 4) Yoshihiko Hangai, Hiroto Kamada, Takao Utsunomiya, Soichiro Kitahara, Osamu Kuwazuru, Nobuhiro Yoshikawa: Compression Properties of Three-Layered Functionally Graded ADC12 Aluminum Foam Fabricated by Friction Stir Welding, August 2013, Materials Transactions, Vol. 54, No. 8, pp. 1268 -1273
- 5) Yoshihiko Hangai, Kousuke Zushida, Hidetoshi Fujii, Rintaro Ueji, Osamu Kuwazuru, Nobuhiro Yoshikawa: Friction powder compaction process for fabricating open-celled Cu foam by sintering-dissolution process route using NaCl space holder, August 2013, Materials Science & Engineering A, 585, pp.468-474
- 6) Y. Morita, T. Kageyama, M. Akoshima, S. Torizuka, M. Tsukamoto, S. Yamashita, N. Yoshikawa: Numerical analysis and experiment to identify origin of buckling in rapid cycling synchrotron core, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, November 2013, Vol. 728, pp.23-30
- 7) Yoshihiko Hangai, Hiroto Kamada, Takao Utsunomiya, Soichiro Kitahara, Osamu Kuwazuru and Nobuhiro Yoshikawa: Tensile Properties and Fracture Behavior of Aluminum Alloy Foam Fabricated from Die Castings without Using Blowing Agent by Friction Stir Processing Route, Materials, March 2014, 7(3), pp. 2382-2394

和文論文:

- 1) 吉川暢宏, 小笠原朋隆, 李浩源, 中川幸次郎, 岡崎順二, 東條千太: 超高压水素蓄圧器の硬化プロセス過昇温評価, 2013 年 5 月, 日本複合材料学会誌, Vol. 39, No. 5, pp.193-198
- 2) 齋藤雅樹, 半谷禎彦, 藤井英俊, 孫 玉峰, 森貞好昭, 北原総一郎, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦圧接によるポーラスアルミニウム / 薄肉パイプ複合部材の創製, 2013 年 8 月, 日本機械学会論文集(A 編), 79 巻 804 号, ノート No.2013-JAN-0054, p.1066

- 3) 田島敏宣, 半谷禎彦, 齋藤雅樹, 小山真司, 藤井英俊, 孫玉峰, 森貞好昭, 桑水流理, 吉川暢宏: その場生成した CuAl₂ を分散させたポーラス Al コア充填パイプ複合部材の創製, 2013 年 8 月, 日本機械学会論文集(A 編), 79 巻 804 号, ノート No.2013-JAN-0055, p.1071
- 4) 久保田直之, 齋藤公佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 石間経章, 川島久宜, 桑水流理, 吉川暢宏: A1050-ADC12 傾斜機能ポーラスアルミニウムの衝撃試験による破壊挙動の観察, 2013 年 8 月, 日本機械学会論文集(A 編), 79 巻 804 号, ノート No.2013-JAN-0068, p.1076
- 5) 圖子田幸佑, 半谷禎彦, 吉田浩亮, 藤井英俊, 孫玉峰, 森貞好昭, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦圧粉法を用いた均一気孔径を有するポーラス Cu の作製, 2013 年 8 月, 日本機械学会論文集(A 編), 79 巻 804 号, ノート No.2013-JAN-0052, p.1079
- 6) 山口亮, 吉田浩亮, 半谷禎彦, 桑水流理, 吉川暢宏: X 線 CT イメージベース FEM によるポーラスアルミニウムの傾斜機能化の有効性評価, 2013 年 8 月, 日本機械学会論文集(A 編), 79 巻 804 号, ノート No.2013-JAN-0975, p.1083
- 7) 齋藤公佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏, 北原総一郎: 異種合金による三層傾斜機能ポーラスアルミニウムの創製, 2013 年 8 月, 日本機械学会論文集(A 編), 79 巻 804 号, ノート No.2013-JAN-1008, p.1088
- 8) 齋藤公佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: Al/Al-Mg-Si/Al-Si-Cu 合金からなる 3 層傾斜機能ポーラスアルミニウムの機械的特性, 日本金属学会誌, 第 77 巻, 第 10 号, 2013, pp. 430-434
- 9) 吉川暢宏, 針谷耕太, 吉田剛, 佐藤克哉, 石本裕保, 秋山浩司, 竹花立美: TypeⅢ複合容器の圧力サイクル寿命予測, 2013 年 11 月, 圧力技術, Vol.51, No.6, pp.2-6

学会講演論文:

- 1) 宇都宮登雄, 鎌田裕仁, 半谷禎彦, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: 気功形態の組合せによる ADC12 機能性ポーラスアルミニウムの圧縮特性変化, 2013 年 5 月, 日本鋳造工学会第 162 回全国講演大会, p.72
- 2) 鎌田裕仁, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 北原総一郎, 桑水流理, 吉川暢宏: ADC12 ダイカストを用いた 3 層傾斜機能ポーラス Al の気孔形態と発泡剤添加個所の関係, 2013 年 5 月, 日本鋳造工学会第 162 回全国講演大会, p.71
- 3) 齋藤公佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏: ADC12 ダイカストを用いた傾斜機能ポーラスアルミニウムの圧縮特性と組織観察, 日本鋳造工学会第 162 回全国講演大会, 2013 年 5 月, p.73
- 4) 齋藤雅樹, 半谷禎彦, 北原総一郎, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦圧接による ADC12 ポーラスアルミニウム/SUS304 パイプ複合部材の作製と接合界面の観察, 日本鋳造工学会第 162 回全国講演大会, 2013 年 5 月, p.74
- 5) 久保田直之, 齋藤公佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏: 衝撃圧縮試験における A1050-ADC12 傾斜機能ポーラス Al の圧縮特性評価, 日本鋳造工学会第 162 回全国講演大会, 2013 年 5 月, p.75

- 6) 圖子田幸佑, 半谷禎彦, 藤井英俊, 孫玉峰, 森貞好昭, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦圧粉法を用いて作製したポーラス金属の気孔形態の観察, 日本機械学会 2013 年度年次大会, 2013 年 9 月 (S041014)
- 7) 齋藤雅樹, 半谷禎彦, 北原総一郎, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦圧接により作製したポーラスアルミニウムコア薄肉パイプ複合部材の圧縮変形挙動観察, 日本機械学会 2013 年度年次大会, 岡山, 2013 年 9 月(J045041)
- 8) 久保田直之, 齋藤公佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 石間経章, 川島久宜, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: 衝撃圧縮試験における異種合金による傾斜機能ポーラス Al の圧縮特性の評価, 日本機械学会 2013 年度年次大会, 岡山, 2013 年 9 月 (J045042)
- 9) 鎌田裕仁, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 北原総一郎, 桑水流理, 吉川暢宏: Al 合金ダイカストを用いたポーラス Al コアサンドイッチパネルの作製, 日本機械学会 2013 年度年次大会, 岡山, 2013 年 9 月(J045043)
- 10) 齋藤公佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: 3 層傾斜機能ポーラスアルミニウムの圧縮変形挙動調査, 日本機械学会 2013 年度年次大会, 岡山, 2013 年 9 月(J045044)
- 11) 鎌田裕仁, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 北原総一郎, 桑水流理, 吉川暢宏: ADC12 ポーラス Al/緻密 ADC6 板からなるサンドイッチパネルの作製, 日本機械学会 M&M2013 材料力学カンファレンス, 岐阜, 2013 年 10 月(GS03)
- 12) 圖子田幸佑, 半谷禎彦, 藤井英俊, 上路林太郎, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦圧粉法を用いたポーラス Ti の作製, 日本機械学会 M&M2013 材料力学カンファレンス, 岐阜, 2013 年 10 月(GS14)
- 13) 久保田直之, 齋藤公佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 石間経章, 川島久宜, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: A1050 と ADC12 を用いた複合ポーラス Al の作製 及び圧縮特性の評価, 日本機械学会 M&M2013 材料力学カンファレンス, 岐阜, 2013 年 10 月(GS35)
- 14) 圖子田幸佑, 半谷禎彦, 藤井英俊, 上路林太郎, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦発熱現象を利用したポーラス Al の作製およびツール走査による大型化の検討, 第 64 回塑性加工連合講演会, 大阪, 2013 年 11 月, pp. 361-362
- 15) 鎌田裕仁, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 北原総一郎, 桑水流理, 吉川暢宏: ADC12 ポーラス Al/緻密 ADC6 板サンドイッチパネルの気孔率と引張強度の関係, 第 64 回塑性加工連合講演会, 大阪, 2013 年 11 月, pp. 365-366
- 16) 齋藤雅樹, 半谷禎彦, 北原総一郎, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦圧接によるポーラスアルミニウムコア薄肉パイプ複合部材の作製と圧縮特性評価, 軽金属学会第 125 回秋期大会, 横浜, 2013 年 11 月, pp. 175-176
- 17) 久保田直之, 齋藤公佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 石間経章, 川島久宜, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: A1050 ポーラス Al との複合化が ADC12 ポーラス Al の圧縮変形挙動に及ぼす影響, 軽金属学会第 125 回秋期大会, 横浜, 2013 年 11 月, pp. 177-178
- 18) 田口裕規, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: ADC12 ポーラスアルミニウムの気孔形態に及ぼす Al₂O₃ 添加量の影響, 日本機械学会 M&P2013, 東京, 2013 年 11 月,

No. 702

- 19) 中野ゆき子, 齋藤雅樹, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: 摩擦圧接による ADC12 ポーラスアルミニウム/A1050 パイプ複合部材の作製, 日本機械学会 M&P2013, 東京, 2013 年 11 月, No. 703
- 20) 石原綾乃, 圖子田幸佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: 摩擦圧粉法により作製したポーラスアルミニウムの気孔率と圧縮特性の関係, 日本機械学会 M&P2013, 東京, 2013 年 11 月, No. 705
- 21) 齋藤公佑, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏: FSP 法により作製したポーラスアルミニウムの曲げ特性, 日本機械学会 M&P2013, 東京, 2013 年 11 月, No. 706
- 22) 佐藤速夫, 椎原良典, キムサンウォン, 吉川暢宏: 炭素繊維強化プラスチック材のメゾスケール強度解析, 第 51 回飛行機シンポジウム講演集, 高松, 2013 年 11 月
- 23) 圖子田幸佑, 半谷禎彦, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦発熱現象を利用した大型ポーラス Al の作製, 第 20 回「エレクトロニクスにおけるマイクロ接合・実装技術」シンポジウム mate2014, 横浜, 2014 年 2 月, pp.337-340
- 24) 半谷禎彦, 圖子田幸佑, 石原綾乃, 藤井英俊, 上路林太郎, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦発熱プロセスを利用したオープンセル型多孔質金属の創製, 第 20 回「エレクトロニクスにおけるマイクロ接合・実装技術」シンポジウム mate2014, 横浜, 2014 年 2 月, pp.341-344
- 25) 圖子田幸佑, 半谷禎彦, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦発熱現象とツール走査を利用した大型ポーラス Al の作製および機械的性質の検討, 日本金属学会春期(第 154 回)講演大会, 東京, 2014 年 3 月, CD-ROM, 76
- 26) 中野ゆき子, 齋藤雅樹, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: 摩擦圧接による ADC12 ポーラス Al/A1050 パイプ複合部材の作製およびパイプ薄肉化の検討, 日本金属学会春期(第 154 回)講演大会, 東京, 2014 年 3 月, CD-ROM, 77
- 27) 久保田直之, 齋藤公佑, 半谷禎彦, 石間経章, 川島久宜, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏: A1050-A6061 ポーラス Al における衝撃圧縮特性評価, 日本金属学会春期(第 154 回)講演大会, 東京, 2014 年 3 月, CD-ROM, 78
- 28) 田口裕規, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: ADC12 ポーラスアルミニウムの圧縮強度に及ぼす Al₂O₃ 添加量の影響, 日本金属学会春期(第 154 回)講演大会, 東京, 2014 年 3 月, CD-ROM, 79
- 29) 石原綾乃, 半谷禎彦, 圖子田幸佑, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦圧粉法により作製したポーラスアルミニウムに生じるせん断変形挙動, 日本金属学会春期(第 154 回)講演大会, 東京, 2014 年 3 月, CD-ROM, 80

総説・解説:

- 1) 吉川暢宏: 複合容器の歴史に想う, 2013 年 7 月, 圧力技術, Vol.51, No.4, P. 16

(2) 研究プロジェクト

民間等との共同研究：

- 1) 「超高压ガス用 FRP 容器の適用性に関する研究」
- 2) 「超高压水素容器の最適設計に関する研究」
- 3) 「スチールライナー-CFRP 複合容器の鋼材厚および CFRP 厚と許容応力との関係予測」
- 4) 「高压水素蓄圧器の開発」
- 5) 「航空エンジン用複合材ファン動翼衝撃解析技術の開発」
- 6) 「CFRP 製パイプに発生する欠陥が引き起こす強度低下の評価に関する研究」

受託研究：

- 1) 「(独)新エネルギー・産業技術総合開発機構 水素利用技術研究開発事業 燃料電池自動車及び水素供給インフラの国内規制適正化, 国際基準調和・国際標準化に関する研究開発 複合圧力容器蓄圧器の基準整備等に関する研究開発」
- 2) 「アルミニウム製ライナー複合蓄圧器の長寿命化と更なるコスト低減に関する研究開発」

佐藤文俊研究室 計算生体分子科学

佐藤研究室では、タンパク質などの生体分子を主なターゲットに、巨大分子の機能を理論的に研究している。「巨大分子の電子構造は複雑な分子構造そのままに解析しなければならない」という理念の下、開発に成功したシミュレーション・システム ProteinDF は、巨大分子丸ごとの精密な全電子カノニカル分子軌道が計算できることが特徴である。この新しい手段は、新規酵素や薬剤などの設計といったバイオ分野のみならず、ナノスケールものづくり分野への応用にも貢献するものである。以下に、本年度の主な成果をリストアップする。

(1) 次世代スパコンのための新計算法の開発

① 新しいグリッドフリー交換相関項計算法の開発

密度汎関数法の交換相関項は、被積分関数の複雑さのために、一般的にグリッド法による数値積分が利用される。他の項は全て解析的に見積もることができるため、これは密度汎関数法計算の脆弱性となっている。特に、大規模系のための検証や多数の計算が必要なダイナミクスでは問題がある(前者は(2)にて、当研究グループが克服しつつある)。当研究室では、提案されてはいたものの、望みの計算値が得られず、忘れ去られていたグリッドフリー法に着目し、そのどこに問題があったのかを解明。これを基に、実用的なグリッドフリー法を開発した。

② 密度汎関数法に基づく第3世代カノニカル分子軌道計算アルゴリズムの開発

新しいグリッドフリー法により、密度汎関数法の全ての計算が解析的に行なえるようになった。またこれにより、密度汎関数法独自の計算コードであるクーロン項、フォックの交換項、純交換相関項の全てで4つのインデックスを持つ分子積分が登場することを利用して、これら全てをコレスキー分解法で統一することに成功した。メモリを十分に持ったスパコンであれば、繰り返し計算前に1度だけコレスキー分解計算を行えばよく、繰り返し計算中は行列演算のみで全計算を達成する第3世代アルゴリズムを開発した。

③ コレスキー分解法の加速

上記のコレスキー分解法は、まだまだ加速の余地が十分にある。全ての項に対して、加速アルゴリズムを新たに提案した。来年度も引き続き実施する。

(2) 大規模系における交換相関項数値積分精度検証

大規模タンパク質をターゲットに密度汎関数計算の交換相関項を求める既存の数値積分法を研究し、これまでと同じサイズのグリッドを用いて計算精度を現状よりも数桁向上させる方法を提案し、その性能を実証した。来年度も引き続き実施する。

(3) 新規酵素設計の研究

グルコースオキシダーゼをターゲットに、量子化学計算に基づく電子状態解析を実施した。来年度も引き続き実施する。

(4) QCLO の改良

自動計算プログラム QCLO 法の新コードを整備した。来年度も引き続き実施する。

(5) ProteinDF オープンソース化作業

GPLv3 ライセンスに基づくオープンソース化に向けて、マニュアルと新コードを整備した。

(1)研究成果一覧

欧文論文:

- 1) Kouji Chiba, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato, and Masahiro Okamoto: Clarification of the Role of Protein in Carbonmonoxy Myoglobin by Investigating Electronic States, International Journal of Quantum Chemistry, 2013, 113, pp.2345-2354
- 2) Toshiyuki Hirano and Fumitoshi Sato: A third-generation density-functional-theory-based method for calculating canonical molecular orbitals of large molecules, Physical Chemistry Chemical Physics, 2014. DOI: 10.1039/C3CP55514C

国際会議予稿集:

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato, Hisashi Higuchi: Development of the unbiased density functional method for massively parallel computing, September 2013, 15th International Conference on Density Functional Theory and its Applications

国際会議アブストラクト:

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: ProteinDF: Application Program Designed to Perform All-electron Canonical Molecular Orbital Calculation of Macromolecule, July 2013, International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4)

著書・訳書:

- 1) 佐藤文俊: 6.1.2 タンパク質の設計, ナノ・マイクロスケール機械工学, 石原直, 加藤千幸, 光石衛, 渡邊聡 編, 2014 年 3 月, 東大出版

学会講演論文:

- 1) 樋口恒, 平野敏行, 佐藤文俊: グリッドフリー交換相関計算法の精度に関する研究, 2013 年 5 月, 第 16 回理論化学討論会
- 2) 佐藤文俊: 「ProteinDF」の成果報告と今後の展開, 2013 年 6 月, 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最終報告会
- 3) 平野敏行, 樋口恒, 佐藤文俊: コレスキー分解を用いたグリッドフリー密度汎関数計算の研究, 2013 年 9 月, 第 7 回分子科学討論会
- 4) 松田潤一, 平野敏行, 佐藤文俊: 多中心数値積分の精度向上を目指した球面積分法の提案, 2013 年 9 月, 第 7 回分子科学討論会
- 5) 平野敏行: 光合成反応中心タンパク質の電子移動反応特性に関する理論的研究, 2013 年 10 月, 平成 25 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題中間報告会
- 6) 佐藤文俊: 生体分子の革新的なシミュレーション, 2013 年 11 月, 工学とバイオ(中央水研)
- 7) 佐藤文俊, 小沢知永: タンパク質の電子状態を解き明かす超大規模量子化学計算への期待と ユーザー会の活動報告, 2013 年 12 月, 第 36 回日本分子生物学会年会
- 8) 平野敏行, 佐藤文俊: 量子化学シミュレーションによるタンパク質電子構造の解明, 2013 年 12 月, 第 36 回日本分子生物学会年会

- 9) 千葉貢治, 平野敏行, 佐藤文俊, 岡本正宏: 全電子カノニカル計算のヘムタンパク質への適用, 2013 年 12 月, 第 36 回日本分子生物学会年会
- 10) Yuetsu Kikuta, Junichi Matsuda, Hideo Takebayashi, Shigeki Hiramatsu, Kenji Goto, Masahito Taniguchi, Katsumasa Sato, Arata Hagikura, Yoshimasa Morimoto, Hiroki Yamane, Seiichi Haruta: Diagnostic Efficiency of Instantaneous Wave-Free Ratio and Vasodilation Modification of the Ratio Between Pd and Pa During Resting Wave-Free Period, 2014 年 3 月, 第 78 回日本循環器学会学術集会

総説・解説:

- 1) 阿部敏彦, 関根義人, 佐藤文俊: 残差切除法による Coupled Perturbed 方程式の解法, 2013 年 5 月, 生産研究, 第 65 巻, 第 3 号, pp.13-17

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 平野敏行, 若手研究(B) 「タンパク質の自動量子化学計算法と電子状態 DB の開発」

民間等との共同研究

- 1) 「グルコースオキシダーゼの反応機構の研究」

半場藤弘研究室 流体物理学

半場研究室では、乱流シミュレーション技術の開発のため、ラージ・エディ・シミュレーション(LES)モデルの改良とハイブリッド乱流モデルの基礎研究、また複雑流体の一つである電磁流体乱流の物理とモデリングに関する研究を行った。

乱流シミュレーション技術の進展とコンピューターの進歩に伴い、LES を用いた乱流シミュレーションソフトウェアが開発され、実用問題に適用されつつある。しかし、シミュレーションの基礎となるモデルと計算法についてはまだ課題が残され改良が必要である。例えば高レイノルズ数の壁乱流の LES を行うには壁面の取扱いが大きな問題であり、LES とレイノルズ平均モデル(RANS)を組み合わせるハイブリッドモデルが有効な手法と期待される。また、実用問題における流体現象には複雑な物理現象を伴う場合が多い。液体金属やプラズマ気体などの電導性流体の流れがその一つの例である。そこで次のように乱流モデルの改良および電磁流体乱流の研究を行った。

(1) LES モデルと RANS/LES ハイブリッドモデルの研究

高レイノルズ数の壁乱流の LES を行うには、格子点数の制約から滑りなし条件が困難なため何らかの壁面モデルが必要となる。RANS モデルと組み合わせるハイブリッド計算が精度のよい壁面モデルとして期待される。本研究では二つのモデルをつなげる際に生じる速度不整合の原因を調べそれを取り除く数値計算法の開発を行っている。特に乱流の新しい長さスケールを導入し渦拡散率と渦粘性率の輸送方程式を考察した。LES モデルそのものの改良にも取り組み、長さスケールを含まない新しい LES モデルを提案した。さらに平均速度場のラグランジュ座標に着目して乱流統計理論を改良し、座標変換について共変的な RANS モデルを導いた。

(2) 電磁流体乱流の物理とモデリング

非圧縮性流体の乱流モデルは長年にわたって開発が進められてきたが、燃焼、高速流、電磁流体、混相流など複雑な物理現象が加わった場合には必ずしも正確な乱流モデルが開発されていない。本研究では複雑流体の一つの例である電磁流体について、既存の非圧縮性流体の乱流に対する理論的数値的手法を応用して、電磁流体乱流の物理機構の解明とモデリングおよび数値計算を行った。電磁流体乱流の大きな特徴の一つは、地球や太陽のように電導性流体の運動によって大規模な磁場が駆動されるダイナモ機構が存在することである。本研究では統計理論を用いてクロスヘリシティと残留エネルギーについてのレイノルズ平均モデルを導き、太陽の対流層の流れや磁気リコネクション現象に適用して考察した。またヘリシティ効果を取り入れた LES モデルを提案した。

(1)研究成果一覧

欧文論文:

- 1) Shoji Koyama: A one-equation-type subgrid-scale model including no length scale, July 2013, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.82, pp.074403-1-11.
- 2) Fujihiro Hamba: Exact transport equation for local eddy viscosity in turbulent shear flow, August 2013, Physics of Fluids, Vol.25, pp.085102 1-14.
- 3) Fujihiro Hamba: Exact transport equation for eddy diffusivity in turbulent shear flow, September 2013, Theoretical and Computational Fluid Dynamics, Vol.27, pp.651-664.
- 4) Nobumitsu Yokoi, Katsuaki Higashimori, Masahiro Hoshino: Transport enhancement and suppression in turbulent magnetic reconnection: A self-consistent turbulence model, December 2013, Physics of Plasmas, Vol.20, pp.122310-1-17

国際会議予稿集:

- 1) Nobumitsu Yokoi: Flow induction in MHD turbulence, April 2013, Proceedings of the Nordita Program on Differential Rotation and Magnetism across the HR Diagram, 17-04-2013.
- 2) Nobumitsu Yokoi: Magnetic and flow induction in magnetohydrodynamic turbulence, July 2013, Proceedings of the 12th International Workshop on the Interrelationship between Plasma Experiments in the Laboratory and in Space, O1-8.
- 3) Nobumitsu Yokoi: Turbulence in space plasmas, July 2013, Proceedings of the 3rd East-Asian School and Workshop on Laboratory, Space, Astrophysical Plasmas, Turbulence 2.
- 4) Nobumitsu Yokoi, D. Schmitt: A new simple model for the solar activity cycle, July 2013, Proceedings of the 12th Asia Pacific Plasma Conference (APPC12), D4-PTu-12-p.771.
- 5) Nobumitsu Yokoi: Subgrid-scale model with structural effects incorporated through helicities, August 2013, CRC Colloquium: Astrophysical Flow Instabilities and Turbulence, CRC-963-2013-08-28.
- 6) Nobumitsu Yokoi, Katsuaki Higashimori, Masahiro Hoshino: A self-consistent model for turbulent magnetic reconnection, September 2013, Proceedings of the European Turbulence Conference 14, SC-4-1.
- 7) Nobumitsu Yokoi: Flow induction due to helicity effect, October 2013, Proceedings of the 2nd Helicity Thinkshop on Solar Physics, 2-3.
- 8) Nobumitsu Yokoi: A self-consistent turbulence model for explosive magnetic reconnection, November 2013, National Astronomical Observatory of China (NAOC) Colloquium Series, NAOC-2013-11-01.
- 9) Nobumitsu Yokoi: Dynamo and flow-induction in magnetohydrodynamic turbulence, December 2013, Proceedings of American Geophysical Union Fall Meeting, NG23A-1482.
- 10) Nobumitsu Yokoi: Subgrid-scale modeling with structural effects incorporated through turbulent helicity, December 2013, National Center for Atmospheric Research (NCAR) Colloquium Series, NCAR-2013-12-13.

国際会議アブストラクト:

- 1) Taketo Arika, Fujihiro Hamba: Theoretical investigation for the damping effect on the Reynolds stress in the near-wall region, September 2013, European Turbulence Conference 14.

学会講演論文:

- 1) 中村優佑, 半場藤弘: チャネル乱流におけるエネルギー輸送と散逸率の評価, 2013 年 9 月, 日本物理学会 2013 年秋季大会講演概要集, Vol.2, p.229.
- 2) 横井喜充, D. Schmitt: 太陽磁場活動の変動を記述する新しいモデル, 2013 年 9 月, 日本物理学会 2013 年秋季大会講演概要集, Vol.2, 28pKC-1.
- 3) 横井喜充: 構造効果を組み入れた MHD 乱流のサブ・グリッド・スケール・モデル, 2014 年 3 月, 日本物理学会第 69 回年次大会講演概要集, 29pAT-6

(2)研究プロジェクト

受託研究

①公的資金

- ・ 原子力安全基盤機構 「大口径管に適用する界面積濃度輸送モデルの開発」

大野隆央研究室 計算材料科学

(1) 第一原理シミュレーションによる物性・機能解析

ナノデバイス構造に対する量子論的な構造・機能解析を可能とするデジタルエンジニアリング基盤と革新的デバイスの創成に貢献する第一原理ソフトウェア(PHASE, ASCOT 等)の開発を目指している。今年度は、ソフトウェアの更なる高精度化、京速計算機のような超並列計算機環境に対応する大規模化・最適化を進めるとともに、広範の産業利用に資する機能の更なる強化を図るため、ナノエレクトロニクス材料探索に向けたナノ構造や酸化膜の形成過程やナノ接合系での伝導特性等の解析、電池材料として利用される遷移金属酸化物の表面・界面物性の解析、構造材料の機械的特性の解析等、PHASE/ASCOT を活用した事例研究を実施した。具体的には、スピントロニクスへの応用を目指して、強磁性電極を架橋した非磁性分子による電子伝導特性を解析し、スピンフィルター効果等のスピントロニクス機能出現の可能性を提案した。また、構造材料の機械的特性の解析・評価を目指して、鉄鋼材料の粒界脆化を第一原理的に解析した。純鉄の典型的な粒界に対して第一原理的な引っ張りテストを実施し、粒界強度に対する水素、空孔等の効果を調べた。その結果、水素は粒界に析出し粒界強度を弱体化するがその効果は小さく、一方、水素の存在によって安定化された空孔が粒界に析出して粒界強度を大きく脆化することを明らかにした。また、リチウム二次電池の正極材料におけるLiイオン拡散過程を解析した。正極材料には、高電位、高容量、高出力、高い安定性、高い環境親和性、低価格等の優れた特性が要求される。特に、イオン伝導特性は高出力を実現するために重要な特性であり、その微視的な理解が優れた材料の探索に不可欠である。新規な正極材料、 $\text{LiFePO}_4\text{CO}_3$ 等におけるLiイオンの拡散過程を第一原理計算により詳細に解析し、擬3次元的な拡散特性を明らかにした。

(2) 非シリコン系材料のデバイス応用の探索

文部科学省「HPCI 戦略プログラム」分野4次世代ものづくりの研究開発課題の一つとして、「次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発」を実施した。この研究課題では、非シリコン系ナノ構造材料のマイクロエレクトロニクス応用を念頭に、第一原理計算等のシミュレーション技術に基づき、ナノ構造材料の基礎物性から、素子としての特性、素子をつくるプロセスまでを解析・理解することにより、次世代半導体集積素子で利用可能な非シリコン系ナノ構造のプロセス技術を確立することを目指している。本年度は、昨年度に引き続き、次世代半導体集積素子における非シリコン系ナノ構造の特性・プロセスに関する第一原理シミュレーションによる実証解析を実施した。具体的には、触媒金属 CVD 成長法、及び SiC 熱分解法によるグラフェン創成プロセスの反応過程に対する実成長温度における第一原理分子動力学解析、プリカーサ分子を用いたグラフェン・リボンの bottom-up 成長法の解析、グラフェン-金属接合構造に対する第一原理伝導特性解析等により、グラフェンの成長過程及び伝導特性の抽出を実施した。CVD 法の実成長温度における第一原理分子動力学解析からは、従来の静的解析とは異なる反応ダイナミクスが得られ、グラフェン成長の原子レベルでの理解を進めるとともに、実成長温度での解析の重要性を明確にした。

(1)研究成果一覧

欧文論文:

- 1) Hongmei Liu, Hisashi Kondo, and Takahisa Ohno: Effect of contact area on electron transport through graphene-metal interface, August 2013, The Journal of Chemical Physics 139, pp.074703-1-8
- 2) Diem My Duong, Van An Dinh, and Takahisa Ohno: Quasi-Three-Dimensional Diffusion of Li ions in $\text{Li}_3\text{FePO}_4\text{CO}_3$: First-Principles Calculations for Cathode Materials of Li-Ion Batteries, October 2013, Applied Physics Express 6, pp.115801-1-4
- 3) Hiroyoshi Momida, Yusuke Asari, Yoshimichi Nakamura, Yoshitaka Tateyama, and Takahisa Ohno: Hydrogen-enhanced vacancy embrittlement of grain boundaries in iron, October 2013, Physical Review B 88, pp.144107-1-13
- 4) Hisashi Kondo and Takahisa Ohno: Spintronic transport of a non-magnetic molecule between magnetic electrodes, December 2013, Applied Physics Letters 103, pp.233115-1-4

国際会議予稿集:

- 1) Nobuo Tajima and Takahisa Ohno: Carbon atom reactions in CVD graphene growth on nickel: A theoretical study, September 2012, Extended Abstracts of the 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials, pp.300-301

国際会議アブストラクト:

- 1) Hiroyoshi Momida, Yusuke Asari, Yoshimichi Nakamura, Yoshitaka Tateyama, and Takahisa Ohno: Hydrogen-Enhanced Vacancy Embrittlement of Grain Boundaries in Iron: First-Principles Calculations, July 2013, International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4-2013)
- 2) Tomoaki Kaneko and Takahisa Ohno: DFT-NEGF Study of Contact Resistance between Graphene and Metal Electrodes ($\text{M}=\text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Al}, \text{Ti}, \text{Pd}, \text{Ag}, \text{Pt}$ and Au), September 2013, 5th International Conference on Recent Progress in Graphene Research (RPGR-2013)
- 3) Tomoaki Kaneko and Takahisa Ohno: Effect of Impurities in SiO_2 on Charge Puddle Formation in Graphene on SiO_2 Surface, September 2013, 5th International Conference on Recent Progress in Graphene Research (RPGR-2013)
- 4) Takahiro Yamasaki, Jun Nara, Junichiro Koga, Tsuyosi Uda, Akiyoshi Kuroda, Kazuo Minami, and Takahisa Ohno: Planewave Based First-Principles Calculations on the 83,000 Nodes K-Computer Applied to SiC Screw Dislocations, September 2013, 2013 JSAP-MRS Joint Symposia
- 5) Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Jun Nara, and Takahisa Ohno: Carbon Atom Bonding Processes in CVD Graphene Growth on Copper Surface: A First Principles Study, September 2013, 2013 JSAP-MRS Joint Symposia
- 6) Tomoaki Kaneko and Takahisa Ohno: DFT-NEGF Study of Contact Resistance between Graphene and Metal Electrodes: Effect of Oxygen Intercalation, September 2013, 2013 JSAP-MRS Joint

Symposia

- 7) Takahiro Yamasaki, Hiroshi Koyama, Jun Nara, Junichiro Koga, Tsuyoshi Uda, Akiyoshi Kuroda, Kazuo Minami, and Takahisa Ohno: 4H-SiC Screw Dislocations and Their Electronic Structures, September 2013, 2013 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM-2013)
- 8) Hiroshi Koyama, Jun Nara, and Takahisa Ohno: First-Principles Study of the 3C-SiC(1-10) and 4H-SiC(11-20) Electronic States, September 2013, International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ICSCRM-2013)
- 9) Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Jun Nara, and Takahisa Ohno: Carbon Atom Reactions in CVD Graphene Growth on Copper Surface: A First-Principles study, March 2014, American Physics Society March Meeting 2014
- 10) Tomoaki Kaneko, Nobuo Tajima, and Takahisa Ohno: Role of Au Surface Step Edge on Bottom-up Growth of Atomically Precise Graphene Nanoribbons: First-Principles Study, March 2014, American Physics Society March Meeting 2014
- 11) Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Jun Nara, and Takahisa Ohno: Carbon Atom Reactions in CVD Graphene Growth on Copper Surface: A First-Principles study, March 2014, American Physics Society March Meeting 2014

学会講演論文:

- 1) 小山洋, 奈良純, 大野隆央: 3C-SiC(1-10)及び 4H-SiC(11-20)表面に置ける電子状態とその安定性, 2013 年 9 月, 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会
- 2) 山崎隆浩, 加藤弘一, 宇田毅, 大野隆央: Si(110)-(16x2)のさまざまな安定表面構造, 2013 年 9 月, 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会
- 3) 山崎隆浩, 加藤弘一, 宇田毅, 大野隆央: Si(110)-(16x2)表面五員環構造の起源, 2013 年 9 月, 日本物理学会 2013 年秋季大会
- 4) 小山洋, 山崎隆浩, 奈良純, 大野隆央: 4H-SiC(0001)及び(000-1)表面の酸化反応の動的シミュレーション, 2013 年 12 月, SiC 及び関連半導体研究第 22 回講演会
- 5) 山崎隆浩, 奈良純, 甲賀淳一郎, 宇田毅, 黒田明義, 南一生, 大野隆央: 4H-SiC 中の貫通螺旋転位の構造と電子状態, 2013 年 12 月, SiC 及び関連半導体研究第 22 回講演会
- 6) 金子智昭, 田島暢夫, 大野隆央: ナノリボンのボトムアップ成長に関する第一原理解析, 2013 年 12 月, 最先端研究開発支援プログラム「グリーン・ナノエレクトロニクスのコア技術開発」最終成果報告会
- 7) 田島暢夫, 金子智昭, 奈良純, 大野隆央: Cu-CVD グラフェン生成系における C-C 結合反応に関する第一原理解析, 2013 年 12 月, 最先端研究開発支援プログラム「グリーン・ナノエレクトロニクスのコア技術開発」最終成果報告会
- 8) 小山洋, 山崎隆浩, 奈良純, 清水達雄, 大野隆央: 4H-SiC(0001)面の酸化過程の動的シミュレーション: Si 面と C 面, 2014 年 1 月, 第 19 回ゲートスタック研究会ー材料・プロセス・評価の物理ー

- 9) 山崎隆浩, 奈良純, 甲賀淳一郎, 宇田毅, 黒田明義, 南一生, 大野隆央: 4H-SiC 中の貫通螺旋転位の様々な構造, 2014 年 1 月, 第 19 回ゲートスタック研究会ー材料・プロセス・評価の物理ー
- 10) 田島暢夫, 金子智昭, 奈良純, 大野隆央: Cu 表面上の CVD グラフェン成長における炭素原子反応ー第一原理的研究, 2014 年 3 月, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会
- 11) 金子智昭, 田島暢夫, 大野隆央: グラフェン・ナノリボンのボトムアップ成長における金属表面ステップの影響についての第一原理解析, 2014 年 3 月, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会
- 12) 金子智昭, 大野隆央: Al_2O_3 下のグラフェンでの電気伝導の第一原理解析, 2014 年 3 月, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会
- 13) 小山洋, 山崎隆浩, 奈良純, 清水達雄, 大野隆央: 4H-SiC(0001)SI 面及び(000-1)C 面, それぞれの酸化反応の動的シミュレーション, 2014 年 3 月, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会
- 14) 小野裕己, 奈良純, 大野隆央: SiC 基板上での初期のグラフェン成長に対する第一原理分子動力学シミュレーション, 2014 年 3 月, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会
- 15) Takahiro Yamasaki and Takahisa Ohno: Switching Mechanism of Resistance Random Access Memory Based on the First-Principles Calculations, 2014 年 3 月, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会

畑田敏夫研究室 プロジェクトマネージメント／知識ベースデジタルエンジニアリング

畑田研究室は、東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センターを中核拠点として実施される大規模な産官学連携プロジェクトの研究開発マネージメントを主たるミッションとして平成20年度より活動している。研究室の独自の目標として掲げているのは、国家プロジェクト等において開発される先端シミュレーションソフトウェアを産業界等へ普及させるための仕組みの構築である。特に、ユーザーが前記ソフトウェアを効率的・効果的に利活用するために必要な知識ベースの開発とそれを融合させたソフトウェアプラットフォームのコンセプトの創出を行うとともに、関連研究室、研究機関ならびに産業界と連携した本プラットフォーム実現のための研究開発マネージメントに力を置いている。

平成25年度の主な活動は、文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「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プロジェクト」終了後の成果の持続的発展・普及体制の構築と文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業「HPCI戦略プログラム 分野4 次世代ものづくり」(本格研究3年目)に関する研究開発マネージメントである。

(1) 「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プロジェクト」終了後の成果の持続的発展・普及体制の構築

本プロジェクトは、平成20年度から平成24年度の5年間にわたって実施された産学官連携プロジェクトであり、産業イノベーションに資する我が国独自のソフトウェアの開発とその普及が目標となっていた。本プロジェクトは予定されていた目標をほぼ達成して終了したが、そこで開発された主要なアプリケーションソフトウェア(ものづくり関係4本(流体FrontFlow/blue, 構造FrontISTR, 複合材料FrontCOMP, マルチ力学連成 REVOCAP), バイオ関係2本(密度汎関数法 ProteinDF, FMO法 ABINIT-MP), ナノ関係1本(第1原理法 PHASE))が今後も持続的に発展する仕組みとして、各アプリごとに独自のユーザー会組織を立ち上げるに至った。各ユーザー会では基本的に独自努力によってソフトウェアのバージョンアップ資金を調達する一方、当センターとの連携を継続させることにより一部公的資金のサポートも受け入れることが可能な組織としているところに特徴がある。

(2) 「HPCI戦略プログラム 分野4 次世代ものづくり」に関する研究開発マネージメント

本プログラムは、スーパーコンピュータ「京」の戦略的利用を図ることを目的として平成23年度から本格研究が実施されている(～平成27年度までの予定)。当センターは5つの戦略分野の中の「分野4 次世代ものづくり」の代表戦略機関として、他の連携戦略機関((独)日本原子力研究開発機構, (独)宇宙航空研究開発機構)などとともに本格研究3年目の研究開発を実施した。本分野では戦略目標として、「21世紀のものづくりを抜本的に変革する計算科学技術の戦略的推進」を掲げ、それを実現するための施策を、研究開発課題と計算科学推進体制構築の2本柱で推進している。前者については、平成24年秋から本格運用が開始されたスパコン「京」による大規模解析事例が順次蓄積されてきている。一方、後者については特にHPCを産業界に広く普及させるための中心的なビークルとして位置付けているHPC次世代ものづくりプラットフォーム(HPC/PF)のプロトタイプの開発がほぼ終了し、有力なアプリケーションソフトウェアラインナップの整備とそれを有効に利活用するための知識・データベースのコンテンツの実装を実施中である。

梅野宣崇研究室 ナノ構造強度物性学

梅野研究室では、第一原理計算によるマルチフジックス解析、第一原理ベースの高精度原子間ポテンシャル作成、分子動力学法や原子レベル構造不安定モード解析等の原子モデルシミュレーションといったシミュレーション技術を軸として、材料の原子レベル構造不安定の機構解明、機能性デバイスの特性や劣化機構の解明、次世代ナノデバイスの特性予測、燃料電池の高効率化・長寿命化のためのモデリングといったさまざまな問題に取り組んでいる。

(1) 強誘電材ドメインスイッチングの原子レベルシミュレーション

電気-ひずみ変換素子としてセンサやエネルギー回収など多方面に応用される強誘電体材料では、ドメインスイッチング(外力・電場負荷による分極ドメインの移動)がその特性を支配する。電気分極を記述できるポテンシャルモデルを用い、ドメイン壁移動の原子シミュレーションを行って構造や温度がドメイン壁移動に及ぼす影響を検討した。代表的な強誘電体の一つチタン酸鉛を対象に、外部応力場や外部電場重畳下のドメイン壁移動条件(臨界電場・臨界応力)を評価するとともに、温度によるドメイン壁構造やドメイン壁移動条件への影響を定量的に評価した。また、キンク構造や酸素空孔がドメイン壁移動条件に大きく影響することを明らかにした。さらに、チタン酸バリウムに対する電気双極子(ダイポール)型原子間ポテンシャルの開発にも成功した。

(2) 多層カーボンナノチューブの新奇変形特性とマルチフィジックス解析

カーボンナノチューブに変形を加えるとバンド構造が変化するという特性を利用し、次世代のナノデバイスを作製することが期待されている。当研究室では静水圧を受ける多層カーボンナノチューブがコルゲーション(皺状変形)と呼ばれる特異な変形を示すことを分子動力学解析によって初めて実証した。さらに、コルゲーションを有するナノチューブのバンド構造計算を行い、バンドギャップの変化などの電気的特性を明らかにしている。

(3) 固体酸化物形燃料電池(SOFC)の電解質・燃料極材料の特性解析

SOFCの典型的な電解質・燃料極材料としてYSZ(Yttria-stabilized zirconia), YSZ/Ni サーマットが挙げられる。SOFCの性能向上・長寿命化のため、高温動作下におけるサーマットの微視的構造変化や電解質のイオン電導性などといった性質を明らかにすることが求められている。そこで、電子周りの電気分極を考慮したダイポールモデルにより高精度な原子間ポテンシャル関数を作成し、YSZ/Ni系の原子シミュレーションを高い精度で実現(実用的なイットリア濃度域において、立方晶-正方晶の相転移をよく記述し、酸素空孔移動のエネルギー障壁も精度よく再現)することに成功した。これを用いて、表面近傍のイオン電導性が表面方位によって大きく異なることなどを明らかにした。また、第一原理計算によりYSZ/Ni界面近傍に析出するカチオンが界面拡散に及ぼす影響の解析も進めており、シンタリングによる構造変化を抑制する添加物の選定を行っている。

(1)研究成果一覧

欧文論文:

- 1) Juan Wang, Jan-Michael Albina, Tomio Iwasaki, Hiroshi Moriya and Yoshitaka Umeno: Influence of normal and shear strain on magnetic anisotropy energy of hcp cobalt: An ab initio study, May 2013, Journal of Materials Research, Vol. 28, No. 12, pp.1559-1566
- 2) Hisao Taira, Hiroyuki Shima, Yoshitaka Umeno and Motohiro Sato: Radial deformation and band-gap modulation of pressurized carbon nanotubes, July 2013, Coupled Systems Mechanics, Vol. 2, No. 2, pp.147-157
- 3) A Kubo, J-M Albina and Y Umeno: Atomistic study of stress-induced switching of 90° ferroelectric domain walls in PbTiO₃: size, temperature and structural effect, August 2013, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol. 21, No. 6, 065019-1-12

国際会議予稿集:

- 1) Yoshitaka Umeno, Wofram Nöhring, Albert Iskandarov and Erik Bitzek: Atomistic model analysis of local and global instabilities in crystals at finite temperature, 2014, Key Engineering Materials, Vols.592-593 pp.39-42 (MSMF-7: Seventh International Conference on Materials Structure & Micromechanics of Fracture, 2013.07.01-03, Brno University of Technology, Brno, the Czech Republic)
- 2) Y. Umeno, A.M. Iskandarov, A. Kubo and J.-M. Albina: Atomistic Modeling and Ab Initio Calculations of Yttria-Stabilized Zirconia, 2013, ECS Transactions 57-1 pp.2799-2809 (SOFC-XIII: 13th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells, 2013.10.07-11, Okinawa Convention Center, Ginowan, Okinawa, Japan)
- 3) A. M. Iskandarov, A. Kubo and Y. Umeno: Development of Interatomic Potential for Molecular Dynamics Simulation of Ni/YSZ Anode in Solid Oxide Fuel Cells, 2013, ECS Transactions 57-1 pp.2811-2819 (SOFC-XIII: 13th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells, 2013.10.07-11, Okinawa Convention Center, Ginowan, Okinawa, Japan)

国際会議アブストラクト:

- 1) Motohiro Sato, Yoshitaka Umeno, Ayako Kusano and Hiroyuki Shima: Continuum and atomistic modelling of carbon nanotube corrugation (10th HSTAM International Congress on Mechanics, 2013.05.25-27, Chania, Crete, Greece)
- 2) Atsushi Kubo and Yoshitaka Umeno: Development of interatomic potential for impurity-doped Sn and diffusion analysis (ISAM4-2013: International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials, 2013.07.22-24, Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Japan)
- 3) Yoshitaka Umeno, Atsushi Kubo and Albert M. Iskandarov: Atomistic modeling of functional materials: Interatomic potential development for metals, oxides and magnetic materials

(ISAM4-2013: International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials, 2013.07.22-24, Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Japan)

- 4) Yoshitaka Umeno, Wolfram Noehring, Albert M. Iskandarov, Atsushi Kubo and Erik Bitzek: Analysis of global instability mode in atomistic model (SES (Society of Engineering Science) 50th Annual Technical Meeting and ASME-AMD Annual Summer Meeting, 2013.07.28-31, Brown Univ., Providence, RI, USA)
- 5) Wolfram Nöhring, Erik Bitzek and Yoshitaka Umeno: Atomic scale analysis of structural instability in nanostructures (ICMM3-EMMC13: 3rd International Conference on Material Modelling incorporating the 13th European Mechanics of Materials Conference, 2013.09.08-11, Warsaw, Poland)
- 6) Yoshitaka Umeno, Wolfram Nöhring, Albert M. Iskandarov and Erik Bitzek: Structural Instability in Atomistic Level: Analysis of Ideal Strength and Global Instability Mode (ASME 2013 International Mechanical Engineering Congress & Exposition, 2013.11.15-21, San Diego, CA, USA)
- 7) Atsushi Kubo, Juan Wang and Yoshitaka Umeno: Development of interatomic potential for Nd₂Fe₁₄B and atomistic model simulation of interface structure (Electron Microscopy & Multiscale Modeling 2013, 2013.11.11-13, Kyoto, Japan)
- 8) Yoshitaka Umeno, Atsushi Kubo and Albert M. Iskandarov: Interatomic potential development and atomistic modeling simulation of yttria-stabilized zirconia (THERMEC2013: International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials, 2013.12.02-06, Las Vegas, USA)

学会講演論文:

- 1) 梅野宜崇: 結晶理想強度と原子構造不安定モード解析による 原子レベルの変形クライテリア評価, 第 18 回日本計算工学会講演会, 東京大学生産技術研究所, 2013 年 6 月 19 日～21 日, 講演論文集 USB
- 2) 李星海, 久保淳, 梅野宜崇: 強誘電体ドメインスイッチングのマルチフィジックス原子シミュレーション, 日本機械学会第 26 回計算力学部門講演会, 2013 年 10 月 2 日～4 日, 佐賀大学, 講演論文集 USB
- 3) 石垣文彦, Wolfram Nöhring, 久保淳, 梅野宜崇: 原子レベル構造不安定解析による双晶形成メカニズムの検討, 日本機械学会第 26 回計算力学部門講演会, 2013 年 10 月 2 日～4 日, 佐賀大学, 講演論文集 USB
- 4) 石垣文彦, Wolfram Nöhring, 久保淳, 梅野宜崇: 原子レベル構造不安定解析による双晶形成メカニズムの検討, 日本機械学会第 26 回計算力学部門講演会, 2013 年 10 月 2 日～4 日, 佐賀大学, 講演論文集 USB
- 5) 梅野宜崇, A.M. Iskandarov, 久保淳: イットリア安定化ジルコニアの電気双極子モデル原子間ポテンシャルの作成と原子シミュレーション, 第 22 回 SOFC 研究発表会, 2013 年 12 月 19 日～20 日, 東京, 講演論文集 p.110-113

- 6) Leton C. Saha, Takayoshi Ishimoto, Albert Iskandarov, Yoshitaka Umeno, Kazuhide Nakao, Michihisa Koyama: Reactive molecular dynamics simulations study of Ni/YSZ interface for solid oxide fuel cell anode, 第 22 回 SOFC 研究発表会, 2013 年 12 月 19 日～20 日, 東京, 講演論文集 p.52-55

溝口照康研究室 ナノ物質設計工学

溝口研究室では、様々なシミュレーションとナノ計測を複合利用することにより、物質の原子配列と電子構造を精密に理解し、構造と機能との相関性(構造機能相関)を明らかにすることを目標とした研究を行っている。2013年度においては、電池材料、光ファイバー材料、強相関化合物およびイオン液体などの先進材料を研究対象とし、以下のような研究を行った。

(1) 第一原理相対論多重項計算法による機能材料の ELNES/XANES 計算

電子および X 線を用いた内殻電子励起分光(ELNES/XANES)スペクトルは原子配列や電子構造に関する情報を有しており、さまざまな材料の解析に用いられている。一方でスペクトルを解釈するためには第一原理計算による理論解析が不可欠である。本研究では高容量リチウムイオン電池正極材料、強相関化合物および絶縁体中に形成された伝導ナノワイヤについて、ELNES/XANES の第一原理計算を行い、材料開発を行ううえで重要な知見を得た。

(2) 液体の内殻電子励起分光(ELNES/XANES)スペクトル計算法の確立

液体中分子の動的挙動を調べるために赤外分光(IR)や核磁気共鳴(NMR, MRI)などが広く用いられてきた。しかし、それらの手法は試料全体の平均的な情報しか得ることができず、特定領域の情報を取得することができない。本研究では透過型電子顕微鏡で取得される ELNES に着目し、分子動力学計算と第一原理バンド計算を複合利用してメタノールの炭素 K 端 ELNES の理論計算を行い、炭素の K 端 ELNES に液体を構成するメタノール分子の原子構造や電子構造に関する情報だけではなく、メタノール分子の動的な挙動が含まれていることを突き止めた。同研究成果はプレスリリースされ各種メディアで報道された。

(3) 機能材料の格子欠陥の形成および動的挙動の解析

機能材料の特性は粒界や空孔、ドーパント等の格子欠陥により支配されており、そのような格子欠陥近傍の構造と動的挙動を理解することは材料開発をするうえで重要である。本研究ではチタニアナノシートや、高温キャパシタとしての応用が期待されている新規物質、高温高压で合成されるデバイス材料、および二次元電子ガスを形成する基板物質についての第一原理計算を行い、それら機能材料における欠陥形成と動的な挙動について重要な知見を得た。

(4) ガラスファイバー中に添加された重元素の原子分解能解析

現在の高度情報化社会は光通信によって支えられており、日々膨大な情報が光信号として運ばれている。そのような光通信で用いられている光増幅器ではエルビウムを添加したガラスファイバーが用いられているが、ガラス構造が複雑なためファイバー内部のエルビウム原子がどのような分散状態で存在しているかわからなかった。本研究では球面収差補正走査透過型電子顕微鏡環状暗視野法と、分子動力学計算およびマルチスライスシミュレーションを複合利用することにより、光ファイバー中のエルビウムのみを優先的に可視化することに成功した。また、ガラス中のエルビウムが可視化される結像原理を説明し、アモルファス構造の中に取り込まれた重原子を可視化するための最適条件を突き止めた。同研究成果はプレスリリースされ、各種メディアで報道された。

(1)研究成果一覧

欧文論文:

- 1) Takashi Yamamoto and Teruyasu Mizoguchi: The influence of neighboring vacancies and their charge state on the atomic migration of LaAlO_3 , May 2013, Applied Physics Letters, 102, pp. 211910-1-4
- 2) Teruyasu Mizoguchi, Scott D. Findlay, Atsunobu Masuno, Yoshihiro Saito, Koji Yamaguchi, Hiroyuki Inoue, and Yuichi Ikuhara: Atomic-Scale Identification of Individual Lanthanide Dopants in Optical Glass Fiber, June 2013, ACS Nano, 7, pp.5058-5063
- 3) Atsutomo Nakamura, Teruyasu Mizoguchi, Katsuyuki Matsunaga, Takahisa Yamamoto, Naoya Shibata, and Yuichi Ikuhara: Periodic Nanowire Array at the Crystal Interface, July 2013, ACS Nano, 7, pp.6297-6302
- 4) Shuji Nishida, Shunsuke Kobayashi, Akihito Kumamoto, Hidekazu Ikeno, Teruyasu Mizoguchi, Isao Tanaka, Yuichi Ikuhara, and Takahisa Yamamoto: Effect of local coordination of Mn on Mn-L_{2,3} edge electron energy loss spectrum, August 2013, Journal of Applied Physics, 114, pp.054906-1-6
- 5) M. Haruta, T. Nagai, N. R. Lugg, M. J. Neish, M. Nagao, K. Kurashima, L. J. Allen, T. Mizoguchi, and K. Kimoto: Atomic resolution chemical bond analysis of oxygen in La_2CuO_4 , August 2013, Journal of Applied Physics, 114, pp.083712-1-8
- 6) Megumi Ohwada, Koji Kimoto, Teruyasu Mizoguchi, Yasuo Ebina, and Takayoshi Sasaki: Atomic structure of titania nanosheet with vacancies, September 2013, Scientific Reports, 3, pp.2801- 1-5
- 7) Atsunobu Masuno, Chikako Moriyoshi, Teruyasu Mizoguchi, Toshihiro Okajima, Yoshihiro Kuroiwa, Yasutomo Arai, Jianding Yu, Hiroyuki Inoue, and Yasuhiro Watanabe: Stabilization of metastable ferroelectric $\text{Ba}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Ti}_2\text{O}_5$ by breaking Ca-site selectivity via crystallization from glass, October 2013, Scientific Reports, 3, pp.3010-1-6
- 8) Yoshiki Matsui, Koichiro Seki, Akihito Hibara, and Teruyasu Mizoguchi: An estimation of molecular dynamic behaviour in a liquid using core-loss spectroscopy, December 2013, Scientific Reports, 3, pp.3503-1-7
- 9) Kei Kubobuchi, Masato Mogi, Hidekazu Ikeno, Isao Tanaka, Hideto Imai, and Teruyasu Mizoguchi: Mn L_{2,3}-edge X-ray absorption spectroscopic studies on charge-discharge mechanism of Li_2MnO_3 , February 2014, Applied Physics Letters, 104, pp.053906-1-4

国際会議予稿集:

- 1) H. Yamaguchi, H. Hiramatsu, H. Hosono, and T. Mizoguchi: Atomic structure and band gap of CuInSe_2 grain boundary, 2013, June 4, 10th PacRIM, SanDiego, U.S.A.
- 2) H. Yamaguchi, H. Hiramatsu, H. Hosono, and T. Mizoguchi: The study of grain boundary atomic structures in photovoltaic cell material CuInSe_2 , 2013, July 22, ISAM4 2013, Komaba, Tokyo, Japan
- 3) Teruyasu Mizoguchi: Identification and characterization of defects in functional materials: first principles calculation and STEM-EELS, 2013/Aug. 6, PRICM-8, Hawaii, USA

- 4) Teruyasu Mizoguchi: Investigation of amorphous glass and liquid using STEM, EELS, and theoretical calculation, 2013/Sep. 9, FEMMS2013, Lorne, VIC, Australia
- 5) H. Yamaguchi, H. Hiramatsu, H. Hosono, T. Mizoguchi: Atomic structure and potential barrier at grain boundary of CuInSe₂, 2013, November 10th-14th, Electron Microscopy & Multiscale Modeling 2013 (EMMM 2013),, Kyoto, Japan
- 6) T. Mizoguchi, Y. Matsui, K. Seki, and A. Hibara: ELNES/XANES calculation of liquid, 2013/Nov. 11, Electron Microscopy and Multiscale Modeling (EMMM) 2013, Kyoto University, Kyoto

著書・訳書:

- 1) 小無健司, 湊和生 編: アクチノイド物性研究のための計算科学入門, 2013, 一般社団法人日本原子力学会, ISBN-978-4-89047-156-0 分担執筆

学会講演論文:

- 1) 溝口照康: ELNES 理論計算の現状と将来: 一粒子・二粒子・多粒子計算, 2013 年 9 月 3 日, 第 29 回 分析電子顕微鏡討論会, 幕張, 千葉
- 2) 溝口照康: 第一原理計算とナノ計測をもちいたアモルファスおよび液体の構造解析, 2013 年 9 月 4 日, セラミックス協会 2013 年秋季大会, 信州大学, 長野
- 3) 山口裕之, 平松秀典, 細野秀雄, 溝口照康: CuInSe₂ における粒界原子構造と欠陥形成挙動, 2013 年 10 月 24 日, 日本セラミックス協会電子材料部会, 第 33 回エレクトロセラミックス研究討論会, 茨城
- 4) 溝口照康, 山本貴志: ペロブスカイト型酸化物における欠陥形成と原子拡散の第一原理計算, 2013 年 10 月 24 日, 第 33 回エレクトロセラミックス研究討論会, つくば
- 5) 山口裕之, 溝口照康: 第一原理計算によるカルコパイライト型化合物の粒界構造設計, 2014 年 3 月 19 日, 応用物理学会 学術講演大会, 青山学院大学相模原キャンパス

総説・解説:

- 1) 溝口照康: 球面収差補正走査透過型電子顕微鏡をもちいたガラス中ドーパントの単原子観察, 2014, NEW GLASS, vol.29, No.1, pp.23-27

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究:

- 1) 挑戦的萌芽研究, 2011 年度～2013 年度
「結晶界面ノンストイキオメリー制御による高効率太陽光発電セル光吸収体の開発」
- 2) 若手研究(A), 2010 年度～2013 年度
「時間分解能 EELS 法の開発と先進材料設計」

民間等との共同研究:

- 1) 「電子材料に関する研究」 国内素材メーカー 2013 年度
- 2) 「電池材料に関する研究」 国内分析メーカー 2013 年度

受託研究

- ・ 所内競争資金: 選定研究「高精度スペクトル計算によるエネルギー材料解析」2013 年度

長谷川洋介研究室 界面輸送工学

長谷川研究室では、地球環境予測、エネルギー有効利用を目的として、界面を介する多様な輸送現象の正確な予測、及び自在な制御に向けた研究活動を進めている。2013年度は、乱流摩擦抵抗低減を目的として、能動制御ではスパン方向壁振動制御、また受動制御では超撥水面における抵抗低減効果に関する研究を実施した。

スパン方向壁振動制御に関しては、多くの従来研究では振動波形は正弦波に限られていたのに対して、本研究では正弦波以外の様々な周期波形を検討し、振動波形が抵抗低減効果に与える影響を調査した。その結果、最適な振動周期、及び振幅では、正弦波において最も大きな省エネルギー効果が得られることが分かった。一方、上記の最適周期、及び最適振幅以外の条件下では、正弦波以外の波形が正弦波に対して有利となり得ることを明らかにした。この事実は、現実応用において、ハードウェアの制約等により最適周期や最適振幅が実現できない場合、正弦波以外の振動波形を用いることによって、より大きな制御効果が期待できることを示唆しており、重要な知見である。また、多様な振動モードにおいて得られる抵抗低減率を整理することにより、壁面振動によって誘起されるストークス層の厚さを用いた簡便な抵抗低減率の予測式を構築した。この予測式は、振動周期と振幅が与えられた際に、振動波形の設計ツールとして有用であることを示した。

微細な溝形状で覆われた固体表面に液体が接する場合、溝内部に気相がトラップされるために、極めて高い撥水性が得られることが知られている。このような表面上では、液体と壁面の実効的な接触面積が減少し、高い抵抗低減効果が得られる。層流状態においては、流れ方向、及びスパン方向に一樣な溝形状に対しては、抵抗低減率が解析的に与えられる一方、乱流状態では、依然として実験、及び数値計算のデータが少なく、溝形状と得られる抵抗低減効果の関係が明らかにされていない。そこで、本研究では、壁面の微細溝を解像しつつ、その上を流れる乱流場の直接数値シミュレーションを実施した。その結果、乱流状態における抵抗低減効果は、層流状態の値とは大きく異なり、特に小さい溝幅において、乱流時の抵抗低減率は、層流時の値よりも大きいことが明らかになった。この事実は、高レイノルズ数域において、より小さな溝幅で高い抵抗低減効果が得られることを示しており、現実応用に向けて好ましい結果と言える。本研究では、溝幅が乱流構造に与える効果をモデル化し、広いレイノルズ数域に適用可能な溝幅と抵抗低減効果を関連づける相関式を提案した。

熱交換器、反応攪拌器、蒸発吸収器等のエネルギー機器では、作動流体の抵抗低減のみならず、熱・物質輸送促進に対するニーズも大きい。しかし、経験的に圧力損失と伝熱の高い相似性(レイノルズ相似則)が広く知られており、抵抗を抑制しつつ伝熱を促進すること(非相似伝熱促進)は極めて困難であると考えられてきた。本研究では、完全発達チャネル乱流場において、最適制御理論に基づき壁面吹き出し／吸い込みの時空間分布を最適化することにより、非相似伝熱促進の可能性を検討した。その結果、吹き出し／吸い込みの強度が主流の5%程度の条件において、圧力損失を30%程度低減しつつ、伝熱を2倍以上促進させることを実証した。この結果は、単純な進行波を流れ場に加えることによって、抵抗低減と伝熱促進を実現できることを示しており、様々なエネルギー機器の高効率化に向けて極めて重要な指針を与えるものである。

(1)研究成果一覧

欧文論文:

- 1) Andrea Cimarelli, Bettina Frohnappfel, Yosuke Hasegawa, Elisabetta De Angelis and Maurizio Quadrio: Prediction of Turbulence Control for Arbitrary Periodic Spanwise Wall Movement, July 2013, Physics of Fluids, Vol. 25, 075102-1-11.
- 2) Akira Yamamoto, Yosuke Hasegawa, Nobuhide Kasagi: Optimal control of dissimilar heat and momentum transfer in a fully developed turbulent channel flow, September 2013, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 733, pp.189-220.
- 3) Sebastian Tuerk, Gertraud Daschiel, Alexander Stroh, Yosuke Hasegawa, Bettina Frohnappfel: Turbulent flow over superhydrophobic surfaces with streamwise grooves, May 2014, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 747, pp.186-217.

国際会議予稿集:

- 1) Yosuke Hasegawa, Sebastian Tuerk, Alexander Stroh, Gertraud Daschiel, Bettina Frohnappfel: Secondary Motion in Turbulent Flows Over Superhydrophobic Surfaces, Aug. 28-30 (2013), 8th Int. Symp. on Turbulent Shear Flow Phenomena (TSFP8), Poitiers, France
- 2) Andrea Cimarelli, Bettina Frohnappfel, Yosuke Hasegawa, Elisabetta De Angelis, Maurizio Quadrio: Turbulent Skin-Friction Drag Reduction by Spanwise Wall Oscillation with Generic Temporal Waveform, , Aug. 28-30 (2013), 8th Int. Symp. on Turbulent Shear Flow Phenomena (TSFP8), Poitiers, France
- 3) Yosuke Hasegawa, Bettina Frohnappfel, Maurizio Quadrio: Direct numerical simulation of turbulent flows at constant power input, Sept. 1-4 (2013), 14th European Turbulence Conference, Lyon, France
- 4) Aiko Yakeno, Yosuke Hasegawa, Nobuhide Kasagi: Phase dependency of near-wall streamwise vortices and associated Reynolds shear stresses close to spanwise oscillating wall, Sept. 1-4 (2013), 14th European Turbulence Conference, Lyon, France
- 5) Alexander Stroh, Yosuke Hasegawa, Bettina Frohnappfel: Reactive Control of Spatially Developing Turbulent Boundary Layer, Sept. 1-4 (2013), 14th European Turbulence Conference, Lyon, France

国際会議アブストラクト:

- 1) Yosuke Hasegawa: Optimal control of heat and fluid flow for efficient energy utilization, (invited lecture), May 6-8 (2013), Multiple Shooting and Time Domain Decomposition Methods, Heidelberg University

学会講演論文:

- 1) 焼野藍子, 長谷川洋介: スパン方向壁振動制御における縦渦構造変化と抵抗低減効果の関係について, 日本流体力学会 年会2013, 東京, 2013年9月12-14日
- 2) 村松憲志郎, 韓榮培, 横山圭史, 長谷川洋介, 鹿園直毅: Phase-Field法を用いた細管内スラグ流液膜厚さに関する数値解析, 熱工学コンファレンス2013, 弘前, 2013年10月19-20日

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(B)「革新的対流伝熱促進の数理と実践」(研究代表者)

受託研究

① 公的資金

- 1) JST 「熱源の温度変化に対応したトリラテラルサイクル蒸気機関の開発」(研究分担者)
- 2) 文部科学省 「スマートステーションと自律移動プローブによる熱水域の3次元画像・4次元化学パラメータ統合マッピングシステム」(研究協力者)

革新的シミュレーション研究センター 平成 25 年度 活動報告 Vol. 6

この資料の転載、引用などをご遠慮ください。
本資料に関するお問い合わせは下記へお願いします。

編集・発行 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター

〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1
E-mail: office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp
URL: <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/>
TEL: 03-5452-6661 FAX: 03-5452-6662

