



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 27 年度
活動報告

Vol. 8

はじめに

数値シミュレーションによる計算科学は、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、平成 27 年 2 月にはポスト「京」をにらんだ研究開発が始まりました。しかし、エクサスケールの計算機環境をフルに活用できる、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は容易ではありません。全く新しい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。また、非常に大規模な解析データ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。

平成 25 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きており、HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 戦略プログラム分野 4「次世代ものづくり」についても、6 年間のプロジェクト期間を経て平成 27 年度に成功裏に終了することができました。また、平成 28 年度からは『「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」重点課題』重点課題⑧近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発の代表機関としてポスト「京」向けアプリケーションの研究開発を本格的に推進しています。今後も、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、新たな設計論の研究開発とその展開を推進していく所存です。

「京」やポスト「京」、さらにはそれらのコモディティを増した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。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 28 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 27 年度 活動報告

Vol. 8

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) 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』 (実施期間: 平成 21～27 年度)	
2) 文部科学省『「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関する アプリケーション開発・研究開発」重点課題』 重点課題⑧近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発 (実施期間: 平成 26～31 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	29

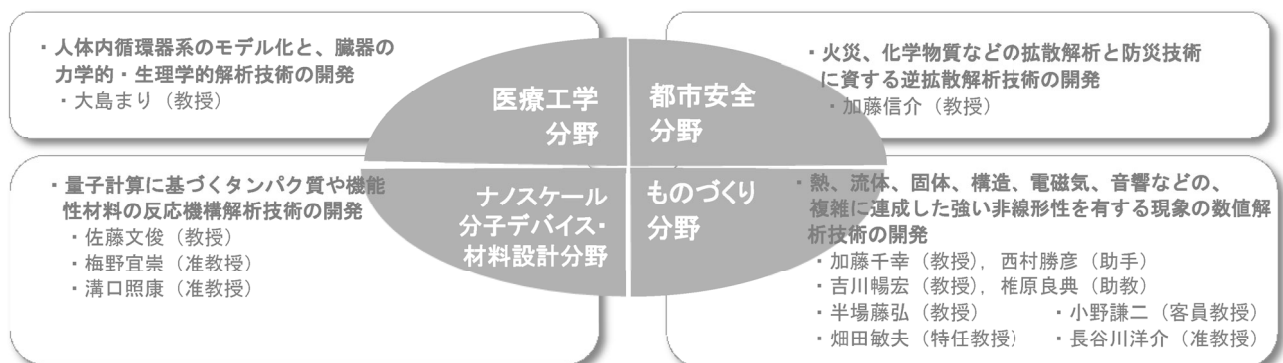
1. 革新的シミュレーション研究センターの概要

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, ①量子計算に基づくタンパク質や機能性材料の反応機構解析技術の開発, 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. 大型プロジェクトとして, 文部科学省「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくり(実施期間:平成 21~27 年度), 文部科学省「ポスト「京」」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発『重点課題⑧近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発(実施期間:平成 26~31 年度)』を代表機関として推進し, 重点課題⑥革新的クリーンエネルギーシステムの実用化(実施期間:平成 26~31 年度)に参画しています.



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

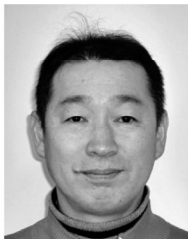
Fujihiro HAMBA, Professor

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



小野 謙二 客員教授

Kenji ONO, 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 大規模計算機工学

Large-scale computer engineering



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 准教授

Yosuke HASEGAWA, 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 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) 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』

(実施期間:平成 21～27 年度)統括責任者: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 27 年度は本格研究期間の 5 年目(事業最終年度)として、研究開発については、「京」を利用した更なるインパクトのある解析事例の創出と成果のとりまとめ・データベース化を実施し、計算科学技術推進体制構築については、各課題成果のうち広範な用途への利用が可能なアプリケーション・コンテンツ類の統合情報基盤への実装とアウトリーチサイト等を最大限に利用した広報普及活動を実施した。また、それらの業務を効率的・効果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。以下に具体的な事業内容について記す。

[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」を利用した流体制御メカニズム、次世代デバイス材料のナノ特性の解明を深め、実用化に資するよりインパクトのある解析事例を創出するとともに、成果全体のとりまとめとデータベース化を実施した。

(研究協力機関:学校法人東京理科大学、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構、国立研究開発法人物質・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」を利用した自動車空力特性、ターボ機械流体力特性、燃焼・ガス化特性ならびに多目的設計探索による設計の革新に関する検討を深め、実用化に資するよりインパクトのある解析事例を創出するとともに、成果全体のとりまとめとデータベース化を実施した。

(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, 国立大学法人神戸大学, 国立大学法人広島大学, 国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構, 学校法人東京理科大学)

[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」を利用した複数の大規模施設を対象とする耐震特性等の解明を深め、実用化に資するよりインパクトのある解析事例を創出するとともに、成果全体のとりまとめとデータベース化を実施した。

(国立研究開発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、スパコンのさらなる需要拡大につながる効率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、特に各研究課題全成果を基にした機能・コンテンツの実装を行った。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、コンテンツの拡充によるより効果的なアウトリーチ活動を実施した。

(協力機関:国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構, 国立研究開発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継続的に推進した。また、先端的ソフトウェア利活用人材の育成については、「HPC産業利用スクール」の、従来の実績を踏まえた効果的コース設定等を行うとともに、需要拡大のための実務セミナーを継続実施した。

d) 人的ネットワークの形成

「京」を中核とするHPCIを活用した次世代ものづくりに関する本事業全成果の公表と今後の展開について議論する場として、第6回「分野 4 次世代ものづくり」シンポジウム(最終成果報告会)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引き続き実施し、上記基盤への成果の実装を行った。

(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、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構、国立研究開発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27年度は、本分野の目標完遂へ向けた研究開発ならびに体制構築施策に対する強力な支援を行うとともに、全成果のとりまとめと社会への効果的な成果情報の発信を実施した。

(協力機関:一般社団法人HPCIコンソーシアム)

2) 文部科学省『「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」重点課題』

重点課題⑧近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

(実施期間:平成26～31年度)課題責任者:加藤千幸(東京大学生産技術研究所)

[概要]

近未来社会における多様なニーズをとらえた付加価値の高いものづくりは、我が国の持続的成長を支える産業の発展に必要不可欠な重要政策である。これに対応するためには、特にものづくりの上流における製品・技術コンセプト創出力とそれを具現化する完成度の高い設計力の抜本的強化が重要であるとともに、信頼性、経済性に優れるものづくりを可能にする革新的製造プロセスの開発が必須要件となる。本委託業務では、これらの近未来型ものづくりの核心をなす手段である、最先端スパコンの能力を最大限に引き出せるアプリケーションソフトウェア群ならびにそれらを統合して設計・製造支援を行うための超高速シミュレーションシステムの開発・戦力化を目的とする。

このため、中核機関の国立大学法人東京大学は、分担参画機関の国立大学法人北海道大学、国立大学法人東北大学、国立大学法人神戸大学、国立大学法人広島大学、国立大学法人九州大学、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構、及び国立研究開発法人理化学研究所と密接に連携し、研究開発を実施する。調査研究・準備研究フェーズの2年目にあたる平成27年度は、昨年度に立案した研究開発計画、研究開発体制、人材登用・育成計画等を元に、各サブ課題実施内容ならびに全体の成果目標等に関する十分なフィージビリティスタディーを行い、その結果をとりまとめた。以下に各サブ課題の業務内容について記す。

また、ターゲットアプリケーション(Frontflow/blue(FFB))のコーデザインの成果をサブ課題D開発するアプリケーション(UPACS-Lite)およびサブ課題E開発するアプリケーション(FrontISTR)へ展開するためプロファイリング作業を実施した。

[詳細]

(i)研究開発

(サブ課題A) 上流設計プラットフォームの開発整備と産業利用実証によるものづくり革新

本サブ課題では、多目的設計最適化問題のトレードオフを可視化する多目的設計探索技術と工業製品のコンセプト設計時の曖昧さを含む製品形状に対して性能の定量評価を行い、意思決定を支援

する不確定性評価技術を開発する。これらの技術を共通基盤となる設計プラットフォームとして整備し、メーカーや宇宙航空研究開発機構、他のサブ課題が抱える実設計問題に適用して有効性を実証する。

本年度は、昨年度立案した研究開発等の計画を元に、下記の各項目の内容ならびに全体の成果目標等に関する十分なフィージビリティスタディーを行ってその結果をとりまとめた。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

a) 多目的設計探索技術

a)-1 制約条件取扱い手法に関する調査検討に関しては、これまでに発表された国内外の関連文献の調査およびアルゴリズムの構想検討を国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構が実施した。

b) コンセプト設計評価技術

b)-1 評価システムの要素技術検討に関しては、システムを構成する機能とその機能のソフトウェア要素への検討を国立研究開発法人理化学研究所が実施した。

c) 高速計算技術

c)-1 時間領域並列化法の実装検討に関しては、次年度の解決法の検証・発展研究への準備として、Parareal 法ベースの時間並列 Framework の整備および課題可決法の方角の設定を国立研究開発法人理化学研究所が実施した。

c)-2 ステンシル計算の低 B/F 実装法の検討に関しては、複数の解ベクトルを同時に求解する計算方法の実装と性能評価を国立研究開発法人理化学研究所が実施した。

(サブ課題 B) リアルタイム・リアルワールド自動車統合設計システムの研究開発

本サブ課題では、「京」で実現した自動車空力連成解析を基盤技術として、設計上流側でデザインと技術者が協調して実施するコンセプトデザインを支援する(リアルタイム)と共に、時々刻々と変化する運転条件を考慮した(リアルワールド)シミュレーションを実現する。

本年度は、昨年度立案した研究開発等の計画を元に、下記の各項目の内容ならびに全体の成果目標等に関する十分なフィージビリティスタディーを行ってその結果をとりまとめた。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

a) エクサスケールを想定したソルバーカーネルの高速化に関しては、非圧縮性アルゴリズムに対して Unsteady Geometric Multigrid ソルバーを導入し、R&B SOR に対して最大 3 倍程度の加速を得た。また MPI における通信袖領域を改良することで、最大 2 倍弱の加速を得た。これらを国立研究開発法人理化学研究所が実施した。

b) 複雑形状流体解析の高精度化に関しては、非圧縮性アルゴリズム、圧縮性アルゴリズムそれぞれに対して、自動車開発 CAD データを用いた丸ごと流体解析を実施(数億～数百億セル規模)し、車両空力や車体回り流れ構造の再現性について、風洞実験との比較を実施した。以上を、国立大学法人神戸大学が国立研究開発法人理化学研究所と連携して実施した。

c) オイラー構造解析手法の可能性に関しては、ソリッド要素と共に、自動車 CAD データにおいては重

要なシェル要素について、アイソパラメトリック要素法等の最新動向の導入等を検討した。以上を、国立大学法人山梨大学が実施した。

- d) 流体・構造統一解法アルゴリズム に関しては、移動境界法としてラグランジュ粒子法を採用し、オイラー法に基づく流体・構造統一解析との整合性が取れるよう、性能評価とロードバランスチューニングを行った。動的負荷分散をすることで 20～30%程度の性能改善を得た。以上を、国立研究開発法人理化学研究所が実施した。
- e) 産学連携開発体制の構築に関しては、トヨタ自動車、日産自動車、本田技術研究所、スズキ、マツダ、富士重工業、三菱自動車各社の CAE 担当者と面談し、流体解析、構造解析のそれぞれについて、各社のニーズと今後の研究開発体制について協議を行った。以上を、国立大学法人神戸大学が実施した。

(サブ課題 C) 準直接計算技術を活用したターボ機械設計システムの研究開発

本サブ課題では、最大1兆グリッドの大規模解析技術およびこれをリファレンスデータとする多目的最適化技術を研究開発し、性能・信頼性を大幅に向上することができるターボ機械設計システムを実現する。

本年度は、昨年度立案した研究開発等の計画を元に、下記の各項目の内容ならびに全体の成果目標等に関する十分なフィージビリティスタディーを行ってその結果をとりまとめた。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

- a) エクサスケール計算機で高速動作する流れソルバーコアカーネル
 - a)-1 複数ベクトルによるコアカーネルの高速化に関しては、コアカーネルである行列ベクトル演算処理に対し複数ベクトル計算機能の実装およびこの性能評価を実施した。この結果ベクトル本数を8本とすることにより4.9倍の高速化を確認した。
 - a)-2 高速化したコアカーネルの実装および性能評価に関しては、高速化されたコアカーネルを流れソルバーに実装した。また、実装した流れソルバーの性能を確認した。
- b) 大規模流体解析における収束性改善のための計算アルゴリズム
 - b)-1 圧縮性解析手法導入に関する調査に関しては、開発した圧縮性計算機能の基礎検証として空力騒音の伝播に関するベンチマークテストを実施した。
 - b)-2 大規模流体構造連成解析のためのデータインターフェースの基本設計に関しては、数百億規模の流体解析および数百万から数億規模の構造解析を実施するための流体解析システム、構造解析システムおよび連成システムの基本設計を実施した。
- c) 格子ボルツマン法(LBM)による空力騒音解析手法
 - c)-1 メッシュレスLBM導入に関する調査に関しては、文献調査を実施するとともに、簡単な二次元流れの問題を対象としてメッシュレスLBMの検証および評価を国立大学法人九州大学が国立大学法人東京大学と連携して実施した。
 - c)-2 直交格子(従来形LBM)とレイヤー格子(メッシュレスLBM)とのインターフェース機能の実装お

よび性能評価に関しては、ベースとなる直交格子を用いた従来形 LBM の高速化に関する調査、およびメッシュレス LBM とのインターフェースにおける物理量の補間・受け渡し方法についての検討を国立大学法人九州大学が国立大学法人東京大学と連携して実施した。

(サブ課題 D) 航空機の設計・運用革新を実現するコア技術の研究開発

本サブ課題では、設計から運用までがものづくりである、という観点に立ち、航空機の設計・開発および運用・運航プロセスに革新をもたらすコア技術として、新たな設計評価技術、飛行安全性向上技術、効率的運航制御技術を実現する。

本年度は、昨年度立案した研究開発等の計画を元に、下記の各項目の内容ならびに全体の成果目標等に関する十分なフィージビリティスタディーを行ってその結果をとりまとめた。

国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構において具体的に実施した内容に関して以下に記す。

a) 高速・高精度乱流解析技術

a)-1 直交格子ベース基盤ソルバーの開発に関しては、ベースプログラムの FFV に圧縮性ソルバーを導入するためにプログラム構造の分析を実施した。また、低バンド幅向けデータ・ループ構造の検討を実施した。

a)-2 壁面モデルの開発に関しては、既存プログラムをベースに物理および実装モデルの検討を実施した。

b) 設計評価技術、飛行安全性向上技術(バフエット解析、全機騒音解析、非線形飛行力学モデル)

b)-1 既存プログラムを用いた予備解析に関しては、これまでの解析実績を基にターゲット解析規模の見積もりを実施した。

c) ビッグデータとシミュレーションの融合による新しい運航制御

c)-1 解析プログラムの予備検討に関しては、単純なモデル(航空機 1 機が空港に侵入するモデル)を想定したプログラムを対象として必要な機能、計算規模の見積もり等を実施した。

(サブ課題 E) 新材料に対応した高度成形・溶接シミュレータの研究開発

本サブ課題では、京コンピュータで実績のある並列構造解析ソフトウェア「FrontISTR」を基盤とし、高強度・超高張力鋼板など新材料に対応した高度なプレス成形・溶接シミュレーション技術を開発する。それにより、成形機・車両全体規模での数 μm 精度の予測を可能とするコア技術を実現する。

本年度は、昨年度立案した研究開発等の計画を元に、下記の各項目の内容ならびに全体の成果目標等に関する十分なフィージビリティスタディーを行ってその結果をとりまとめた。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

a) アセンブリ/接触問題の大規模解析が可能な並列反復法に関しては、実用的な接触解析(摩擦伝動ベルト解析、2 軸 2 輪車両モデルとレールの摩擦接触解析、スマートフォンケースの曲げ解析)に対する性能評価を実施した。

b) 並列領域分割法の基本アルゴリズムに関しては、その全体処理の流れを検討した。そして、節点番号に空間的な飛び多いデータを含む、大規模な解析モデルの分割に対して、メモリ消費量や計算時

間の評価を実施した。

- c) プレス成形・溶接のための複合強連成のための基本アルゴリズムに関しては、実験結果との比較を行い、計算結果の妥当性を確認した。そして、時間増分を大きくした場合において、本アルゴリズムと staggered 法との精度比較を実施した。
- d) プリ・ポストの詳細設計に関しては、メッシュ生成エンジン (Adventure_tetmesh や Netgen) および REVOCAP_PrePost のメッシュ操作ライブラリの利用、大規模な解析モデルのデータ処理について検討を実施した。

(サブ課題F) マルチスケール熱可塑CFRP成形シミュレータの研究開発

航空機や自動車の軽量化を目的として成形性の高い熱可塑CFRPの適用に期待が集まっている。本サブ課題では、熱可塑CFRPに対して加熱成形後の繊維配置と欠陥を正確に予測して、強度評価に裏打ちされた最適設計を可能とするためマルチスケール熱可塑シミュレーションを研究開発する。

本年度は、昨年度立案した研究開発等の計画を元に、下記の各項目の内容ならびに全体の成果目標等に関する十分なフィージビリティスタディーを行ってその結果をとりまとめた。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

- a) ポスト「京」のアーキテクチャに対応した多階層並列直接法に関しては、結晶性熱可塑樹脂の温度解析シミュレーションにおける、陽解法的アルゴリズムの適用可能性に関する検討を実施した。
- b) 接触変形・熱弾塑性・相変態の相互作用を忠実に再現する連成解析アルゴリズムに関しては、各種成形プロセスを想定した変形・熱粘弾性・相変態の相互作用下におけるメッシュ品質健全性試験を実施した。
- c) 並列領域分割アルゴリズムに関しては、要素の自動分割を高速化するための並列処理手法を開発しマクロ処理のスクリプト作成を実施した。

(ii) プロジェクトの総合的推進

プロジェクト全体の連携を密としつつ円滑に運営していくため、評価委員会(諮問委員会)、推進会議、アプリケーション連携開発会議(重点課題⑥との連携)等を適宜開催し、参画各機関の連携・調整にあたる。特に、プロジェクト全体の進捗状況を確認しつつ計画の合理化を検討し、必要に応じて調査を実施したり外部有識者を招聘して意見を聞くなど、プロジェクトの効果的・効率的推進に資する施策を実施する。また、プロジェクトで得られた成果については、可能な限り積極的に公開して今後の展開に資するとともに、ものづくり産業での早期戦力化を支援する。

本年度は、来年度以降の本格実施フェーズに備え、プロジェクト全体ならびに各サブ課題で掲げる目標の妥当性確認のための文科省指導のもと諮問委員会を設け、指導、助言、評価を行うため全体推進会議兼諮問委員会の開催や、確実な成果創出のための管理の仕組みを構築した。また、各サブ課題で実施するフィージビリティスタディーの支援を実施した。

(2) 他研究機関との連携

国立研究開発法人理化学研究所・一般財団法人高度情報科学研究機構

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国立研究開発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研究機構(RIST)の協力を得て, 平成 27 年度は, 流体解析プログラム FrontFlow/blue について以下のとおり実施した。

< FrontFlow/blue >

平成 27 年度は FFB のコアカーネルである行列・ベクトル積カーネルの高速化をすすめた。国立研究開発法人理化学研究所と連携し, 27 年度までに開発した右辺ベクトルを複数並べる手法を実装したカーネルを京および FX100 においてチューニングし右辺ベクトルを 8 本用いた場合, 京において 2.3 倍, FX100 において 4.8 倍の性能向上を確認した。上記のベンチマークにおいて, さらなる高速化を実現するためには, コンパイラおよびミドルウェアの専門家と連携し, メモリからレジスタ(特に L1 キャッシュからレジスタ)のデータロード効率を向上する必要があることがわかった。今後, コアカーネルをソルバーに実装するとともにソルバー全体を複数ベクトルに対応することによりソルバー全体の性能を向上させる。

(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」

本活動は, 先端ソフト開発人材の育成を行うもので, 東大大学院工学系研究科の演習として推進している。内容は, 「チーム制によるシミュレーションソフトウェア開発教育」, 「ソフトウェア工学教育と HPC 教育(おもに前者に比重)」, 「ソフトウェア工学の作法と HPC の技術を実践的に両立させる訓練」, 「産業界の講師による実践的な講義・演習」, 「東大情基センター FX10 システムの利用」である。年間を通しての実施項目は, 演習内容の(再)構築, 演習を行うための周辺機器・ソフト構築, ドキュメント作成, 大学院教育, 次年度のための振り返りと反省ポイントの洗い出しであり, これらの実施項目を繰り返すことによって, 本活動を毎年ブラッシュアップしている。本年度の受講者数は昨年度同様であったが, 例年同様, 様々な専攻から受講があった。

本活動と同時進行で, これまでに得られた経験・成果を展開すべく, 教科書として基礎編「ソフトウェア開発入門: シミュレーションソフト設計理論からプロジェクト管理まで」東大出版(2014)を出版, さらに本年度は参考書として応用編「ソフトウェア開発実践: 科学技術シミュレーションソフトの設計」東大出版(2015)を上梓した。これらの活動により, 大学や企業におけるシミュレーションソフトウェア開発者人材育成を目指した共通教育演習のベース作成に成功した。

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

【参考文献】

- ・居駒幹夫, “講義紹介: 実践的シミュレーションソフトウェア開発演習”, 東京大学情報基盤センター スーパーコンピューティング ニュース, Vol.14, No.6, 2012 年 11 月
- ・佐藤文俊, 加藤千幸編, “ソフトウェア開発入門: シミュレーションソフト設計理論からプロジェクト管理まで”, 東大出版, 2014 年 4 月
- ・佐藤文俊, “教育利用講義報告「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」”, 東京大学情報基盤センター スーパーコンピューティング ニュース, Vol.17, No.5, 2015 年 9 月
- ・佐藤文俊, 加藤千幸編, “ソフトウェア開発実践: 科学技術シミュレーションソフトの設計”, 東大出版, 2015 年 11 月

2) HPC 産業利用スクール

HPC 産業応用サマースクール

第一人者との直接の対話や, 業種・業界を超えた情報交換と関連する情報共有を行い, 技術論だけでなく, HPC 利技術を 活用することが企業将来をどのように形作るかといったことをテーマに企画した. さらに, 今注目されているオープンソースコードを用いて, 実務講義および参加者による実習を行った.

開催日: 平成 27 年 9 月 11 日(金)~12 日(土)

場 所: マホロバ・マイنز三浦

主 催: スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

協 力: 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, 国立研究開発法人 理化学研究所情報基盤センター, NS プラント設計株式会社, 公益財団法人 計算科学振興財団, 一般財団法人 高度情報科学技術研究機構

(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

HPCI 戦略プログラム 第 6 回「分野 4 次世代ものづくり」シンポジウム(最終成果報告会)

～スパコン「京」がひらく科学と社会～

最終成果報告会となる今回のシンポジウムでは、6 年間に亘る研究開発成果や成果普及に対する分野 4 の特徴的施策のご報告を行うとともに、近未来のものづくりを見据えたHPCIのさらなる貢献について議論を行うことを主眼として開催した。

開催日：平成 28 年 3 月 23 日(水) 13:20～17:55

3 月 24 日(木) 10:00～17:20

場 所：東京大学生産技術研究所 コンベンションホール(An 棟 2 階)

主 催：東京大学生産技術研究所

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構

国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構

後 援：国立研究開発法人理化学研究所 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

公益財団法人計算科学振興財団

一般社団法人 HPCI コンソーシアム

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：459 名

資料作成：予稿集 202 頁

○プログラム

3 月 23 日(水)

司会 東京大学生産技術研究所 特任教授 畑田敏夫

開会の挨拶

主催者挨拶 東京大学生産技術研究所 所長 藤井 輝夫

文部科学省挨拶 文部科学省研究振興局計算科学技術推進室 室長 工藤 雄之

分野マネージャ挨拶 アイシン精機株式会社 取締役 小林 敏雄

「分野4成果の概要とその先への展望」

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

革新的シミュレーション研究センター長

【プロダクトイノベーションへの貢献】

課題1:輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化に関する研究開発

「全体成果の概要」

藤井 孝藏 課題責任者 東京理科大学 教授

「プラズマ気流制御の風車適用の検討」

田中 元史 株式会社東芝 参事

「プラズマ気流制御の自動車空力制御への適用検討」

清水 圭吾 マツダ株式会社 技術研究所

「プラズマ気流制御技術 ―実験研究者の視点から―」

瀬川 武彦 産業技術総合研究所

課題2: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

「全体成果の概要」

大野 隆央 課題責任者 物質・材料研究機構 特命研究員

「グラフェン成長 -大規模シミュレーション-」

山崎 隆浩 物質・材料研究機構 特別研究員

「グラフェン成長 -実験からの期待-」

高村 真琴 日本電信電話株式会社 物性科学基礎研究所

「SiC パワーデバイス特性向上を目指したシミュレーション研究」

清水 達雄 株式会社東芝 研究開発センター 研究主幹

【プロセスイノベーションへの貢献】

課題3:乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発

「全体成果の概要」

加藤 千幸 課題責任者 東京大学生産技術研究所 教授

「自動車用次世代空力熱設計システムの概要」

坪倉 誠 神戸大学 教授

「“京”を利用した自動車の風騒音解析事例紹介」

飯田 桂一郎 スズキ株式会社

「ミラー騒音解析のための実車 Wall Resolved LES 解析」

寺村 実 株式会社本田技術研究所 主任研究員

「車両運動性能向上を目指した非定常空力シミュレーション」

小林 竜也 富士重工業株式会社

「乱流の直接計算に基づく次世代数値曳航水槽の開発」

西川 達雄 一般財団法人日本造船技術センター 課長

「燃焼器設計開発支援のための燃焼数値シミュレーション」

武藤 昌也 京都大学 特定助教

閉会の挨拶 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
革新的シミュレーション研究センター長

3月24日(木)

司会 東京大学生産技術研究所 特任教授 畑田敏夫

閉会の挨拶 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
革新的シミュレーション研究センター長

【プロセスイノベーションへの貢献】

課題4:多目的設計探索による設計手法の革新に関する研究開発

「全体成果の概要」

大山 聖 課題責任者 宇宙航空研究開発機構 准教授

「京で可能になったロケット射点形状の空力音響多目的設計探査」

立川 智章 東京理科大学 講師

「車両空力性能向上のためのタイヤ設計」

小石 正隆 横浜ゴム株式会社 理事・研究室長

「スパコン「京」を用いた複数の車体構造の同時多目的設計最適化」

小平 剛央 マツダ株式会社 アシスタントマネージャー

【安心・安全社会構築への貢献】

課題5:原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発

「全体成果の概要」

中島 憲宏 課題責任者 日本原子力研究開発機構 副センター長

「石油・化学プラントにおける次世代耐震シミュレーションの活用」

松川 圭輔 千代田化工建設株式会社 主席技師長

「一般産業機械における次世代耐震シミュレーションの活用」

杉山 道子 株式会社荏原製作所 構造・振動解析グループ長

司会 (国研)日本原子力研究開発機構 副センター長 中島憲宏

【計算科学技術推進体制構築】

「全体成果の概要」

畑田 敏夫 課題責任者 東京大学生産技術研究所 特任教授

「HPC/PFの開発・利活用と今後の展開」

小野 謙二 理化学研究所/神戸大学 チームリーダー/客員教授

「アウトリーチ活動の成果と今後の展開」

川鍋 友宏 東京大学生産技術研究所 特任研究員

【パネルディスカッション】「今後の実用化に向けて」

司 会: 加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授

パネリスト: 藤井 孝藏 東京理科大学 教授

大山 聖 宇宙航空研究開発機構 准教授

西川 達雄 一般財団法人日本造船技術センター 課長

農沢 隆秀 マツダ株式会社 技術研究所 技監

福島 伸 株式会社東芝 研究開発センター 首席技監

閉会の挨拶 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
革新的シミュレーション研究センター長

第 31 回生研 TSFD シンポジウム

「乱流シミュレーションと流れの設計－LES の現状と展望」

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ご参加を得てきた「生研 TSFD (Turbulence Simulation and Flow Design) シンポジウム」(旧「生研 NST シンポジウム」)は本年度で 31 回目となり、基礎から応用まで理工学の広い分野から 13 件の講演を行った。今回は乱流の数値シミュレーション研究とその応用に関する自由な意見交換と白熱した討論を行った。

開催日:平成 27 年 3 月 9 日(水) 9:25～17:40

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:38 名

○プログラム

9:25 開会のあいさつ 半場藤弘(東大生研)

9:30～12:00 セッション 1 DNS・LES 司会 長谷川洋介(東大生研)

スケール空間の乱流エネルギー密度とエネルギー輸送
半場藤弘(東京大学)

剥離乱流境界層の DNS とモデリング
阿部浩幸 溝渕泰寛 松尾裕一(JAXA)

ものづくり分野における大規模 LES 解析の最新成果
加藤千幸(東京大学)

LES における楕円形バーガーズ渦を用いたアプリオリテストの検討
小林宏充(慶應義塾大学)

Validation of unstructured LES: flow past a square cylinder at $Re=2.2e4$
Yong Cao, Tetsuro Tamura (Tokyo Institute of Technology)

13:20～15:20 セッション 2 LES 司会 大岡龍三(東大生研)

LBM を用いた都市大気境界層の乱流計算
稲垣厚至(東京工業大学)

格子ボルツマン法 LES のための局所細密格子法の開発
桑田祐丞(大阪府立大学)

翼まわりのキャビテーション乱流の LES
稲岡拓也 梶島岳夫(大阪大学)

RANS 解析のための都市 Canopy モデル付加項に含まれる長さスケールの LES データによる推定
渡部朱生 大風翼 持田灯(東北大学)

15:40～17:40 セッション 3 RANS・その他 司会 北澤大輔(東大生研)

渦粘性係数の輸送方程式を用いた 3 方程式レイノルズ平均モデルの建物周辺流れへの応用
大風翼(東北大学) 吉澤徹(JAXA(客員)) 持田灯(東北大学)

反転流れ場でのトレーサ拡散と 2 次元居室空間における汚染物質の発生源同定
菊本英紀 大岡龍三 加藤信介(東京大学)

レシプロエンジン用圧縮性流体解析ソルバの研究開発
南部太介 溝渕泰寛 松尾裕一(JAXA) 菱田学 安田章悟 八百寛樹(菱友システムズ)
石田崇 橋本敦 森井雄飛(JAXA)

粒子法を援用した着氷シミュレーション手法の開発
結城光司 守裕也 福島直哉 山本誠(東京理科大学)

b) 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。現在 2 ヶ月に 1 回、東大生研にて研究会を開催している。

第 35 回 LES 研究会

日時 2015 年 5 月 12 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)

「楕円形バーガーズ渦周りの SGS エネルギー輸送」

小林宏充(慶応義塾大学)

「鉛直加熱平板に沿って発達する自然対流境界層の特性」

中尾圭佑(電力中央研究所)

第 36 回 LES 研究会

日時 2015 年 7 月 10 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)

「乱流の階層構造に基づく格子幅自己認識型 SGS モデル」

福島直哉(東京大学)

「Explicit-MPS 法を用いた固気液三相流計算手法の開発」

高橋亮平(東京理科大学)

第 37 回 LES 研究会

日時 2015 年 9 月 8 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)

「LBM を用いた中立都市大気境界層の相似性の検討」

稲垣厚至(東京工業大学)

「マイクロデバイスをを用いた輸送機器・流体機器の流体制御に関する LES」

佐藤允(JAXA 宇宙科学研究所)

第 38 回 LES 研究会

日時 2015 年 11 月 13 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)

「WRF-LES による中立大気接地層の乱流構造解析」

服部康男(電力中央研究所)

「LES/RANS ハイブリッド法を用いたロケットフェアリング遷音速流れの解析」

堤 誠司(JAXA)

第 39 回 LES 研究会

日時 2016 年 1 月 12 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)

台風全域 LES」

伊藤純至(気象研究所)

「重合移動格子による複雑物体周りの計算と高速化について」

大橋訓英(海上技術安全研究所)

c) セミナー・講習会

第 6 回 クラウドコンピュータ利用 FrontFlow/blue の設計実務セミナー

研究開発・設計現場でのクラウドコンピューティングでの利用を想定した FrontFlow/blue の実行を実習するため、東京大学生産技術研究所スパコンと会場内 PC をリモートで接続し、Windows 知識で使えるスパコンゲートウェイ『CCNV』を利用。今回は、「車体モデル周り空力の LES 解析」を題材に扱い、演習では、ノート PC を使用し『Pointwise17.3』によるメッシュ生成から FrontFlow/blue での非定常流れ場解析、『FieldView15』による大規模解析可視化までの CFD 設計実務の一連の作業を体験してもらうセミナーを開催した。

開催日： 平成 27 年 4 月 3 日(金) 10:00-17:00

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： 16 名

第 4 回 PHASE/0 利用講習会: 応用編

PHASE システム研究会を中核として、第一原理電子状態計算ソフトウェア「PHASE」に並列性能の向上など既存機能の改良に加え新規機能を搭載し、名称を「PHASE/0」としたソフトウェアを公開したことに伴い、初心者を対象とした利用講習会を 3 回開催しましたが、要望多数のため、応用機能説明を充実させて講習会を開催した。

開催日： 平成 27 年 5 月 27 日(水) 10:30-17:00

場 所： 東京大学生産技術研究所 As 棟ロセミナー室4

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 PHASE/0 利用講習会: 基礎編

内容は過去 3 回開催した基礎編と同様に、初心者を対象として、初めての方でも理解できるよう工夫したプログラムを利用し、実習には FOCUS スパコンを利用した計算実行を盛り込んだ、実用的な電子状態解析まで体験できる講習会を開催した。

開催日： 平成 26 年 8 月 26 日(水) 10:00-17:00

場 所： 東京大学生産技術研究所 As 棟ロセミナー室4

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： 20 名

第 6 回 PHASE/O 利用講習会:基礎編

内容は過去 4 回開催した基礎編と同様に、第 6 回目の講習会の会場を神戸にて開催した。

開催日: 平成 28 年 1 月 19 日(火) 10:30-17:00

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: 14 名

HPC/PF を利用した FrontFlow/blue 解析セミナー

HPCI 戦略プログラム分野4「次世代ものづくり」で開発している解析実行環境,「HPC/PF」を利用することで、プリポストを含めた FrontFlow/blue(FFB)による一連の解析作業が簡単にできることを体験するハンズオンセミナーを開催した。

計算格子を自動生成するプリプロセスアプリ, FXgen を利用して、手元の PC 上で階層型直交格子を生成, データを FOCUS スパコンに自動転送し FFB で流体解析, 結果データを手元 PC 上で可視化処理を行う, といった一連の解析ワークフローを, HPC/PF の機能を用いて簡単に自動実行できることを実習した。

開催日: 平成 27 年 9 月 11 日(金) 10:00~17:00

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: 16 名

HPC/PF を利用した FrontISTR 解析セミナー ～FOCUS スパコンを用いた並列構造解析～

HPCI 戦略プログラム分野4「次世代ものづくり」で開発している解析実行環境,「HPC/PF」を利用することで、ポストを含めた FrontISTR による一連の解析作業が簡単にできることを体験するハンズオンセミナーを開催し、計算工学ナビのデータを FOCUS スパコンに自動転送し、FOCUS スパコン上で FrontISTR による構造解析, 結果データを手元 PC 上で可視化処理を行う, といった一連の解析ワークフローを, HPC/PF の機能を用いて簡単に自動実行できることを実習した。

開催日: 平成 27 年 11 月 6 日(金) 10:00-18:00

場所: 東京大学生産技術研究所 As 棟中セミナー室 3

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: 16 名

HPC/PF を利用した UPACS 解析セミナー

戦略プログラム分野 4「次世代ものづくり」で開発した解析実行環境「HPC/PF」を利用することで、ポスト処理を含めた UPACS による一連の解析作業を体験していただく、ターボ機械 HPC プロジェクトの WG1, WG5 メンバー向けの非公開セミナーを開催した。UPACSを用いた解析として基礎的な2次元翼列の解析とより具体的な解析(WG1 では遠心圧縮機の解析, WG5 では蒸気タービンの解析)を生研 PC クラスタで実施し、解析結果の可視化処理を手元 PC 端末上で実施した。

開催日: 平成 28 年 2 月 19 日(金) WG1:10:00-13:00 WG5:14:00-17:00

場所: 東京大学生産技術研究所 As 棟中セミナー室 3

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: 14 名

第 2 回東京ハンズオン:ABINIT-MP 講習会

「京」と互換性を持つ高度情報科学技術研究機構所有の利用支援用コンピュータシステム (PRIMEHPC FX10)を用いて, ABINIT-MP/BioStation Viewer による FMO 計算を経験していただく講習会を開催した。

開催日: 平成 27 年 12 月 4 日(金)10:15~17:00

場所: 東京大学生産技術研究所 As 棟中セミナー室 5

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: 12 名

d) 共催・後援・その他

RIKEN AICS HPC Summer School 2015

開催日: 平成 27 年 8 月 17 日(月) ~8 月 21 日(金)

場所: 国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構 6 階講堂

主催: 国立研究開発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, 神戸大学計算科学教育センター
兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科

RIKEN AICS HPC Spring School 2016

開催日: 平成 28 年 3 月 8 日(火)9:00~3 月 10 日(木)

場所: 国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構 6 階講堂

主催: 国立研究開発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, 神戸大学計算科学教育センター
兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科

第 6 回 AICS 国際シンポジウム

開催日: 平成 28 年 2 月 22 日(月)~23 日(火)

場所: 国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構 6 階講堂・1 階セミナー室

主催: 国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2015

開催日: 平成 27 年 11 月 27 日(金)

場所: 学術総合センター 2F 中会議場

主催: 国立研究開発法人物質・材料研究機構理論計算科学ユニット

高効率電子デバイス材料研究コンソーシアム

第 18 回 FrontISTR 研究会

開催日: 平成 27 年 4 月 24 日(金)
場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 3
主 催: FrontISTR 研究会

第 19 回 FrontISTR 研究会

開催日: 平成 27 年 6 月 2 日(火)
場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 3
主 催: FrontISTR 研究会

第 21 回 FrontISTR 研究会

開催日: 平成 27 年 9 月 29 日(火)
場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 1
主 催: FrontISTR 研究会

第 22 回 FrontISTR 研究会

開催日: 平成 27 年 11 月 6 日(金)
場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 3
主 催: FrontISTR 研究会

第 23 回 FrontISTR 研究会

開催日: 平成 27 年 11 月 27 日(金)
場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 3
主 催: FrontISTR 研究会

第 25 回 FrontISTR 研究会

開催日: 平成 28 年 2 月 2 日(火)
場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 3
主 催: FrontISTR 研究会

第 26 回 FrontISTR 研究会

開催日: 平成 28 年 3 月 18 日(金)
場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 2
主 催: FrontISTR 研究会

第 4 回 HPC ものづくりワークショップ

開催日: 平成 27 年 7 月 7 日(火) 13:30~16:45
場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 4
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 5 回 HPC ものづくりワークショップ

開催日： 平成 27 年 11 月 25 日(水) 13:30～17:00

場 所： 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 4

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 8 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 27 年 12 月 17 日(木) 13:00～17:40

場 所： コクヨホール

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 2 回生体分子量子化学計算研究会 ～state of the arts 生体分子シミュレーションの今～

開催日： 平成 27 年 12 月 11 日(金)

主 催： 工学とバイオグループ

2) 国内および海外への研究成果の展開

国際フロンティア産業メッセ 2015

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、パネルの展示、リニア L0 系の 1/50 モデル、マツダ公式モデルカーの展示、ならびにパンフレットの配布を行った。

開催日： 平成 27 年 9 月 3 日(木)・4 日(金)

場 所： 神戸国際展示場 2 号館

国立研究開発法人理化学研究所 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、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： 平成 27 年 10 月 24 日(土)

場 所： 国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究機構 6 階講堂

第 2 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会

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、ポスターで研究成果の展示を行った。

開催日： 平成 27 年 10 月 26 日(月)

場 所： 日本科学未来館

SC15

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： 平成 27 年 11 月 15 日(日)～20 日(金)

場 所： 米国テキサス州オースティン Austin Convention Center

第8回トップセミナー

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、ポスターで研究成果の展示を行った。

開催日：平成28年1月28日(木)

場所：神戸商工会議所 神商ホール

スパコン「京」がひらく科学と社会 シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」

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、講演・ポスターで研究成果の展示を行った。また、ポスト「京」重点課題⑧の記者発表会を行った。

開催日：平成28年1月29日(金)

場所：東京よみうり大手町ホール

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Vol. 21号、Vol. 22号を発行した。

(1) Vol. 21号

発行日：平成27年6月

発行部数：1,000部

内容：1面	巻頭言 「京」の成果の結実とポスト「京」に向けた研究開発に着手
2面－3面	ポスト「京」重点課題⑥⑧合同シンポジウム 開催報告
4面－7面	センターメンバー研究紹介
8面	活動報告およびイベント開催案内

(2) Vol. 22号

発行日：平成28年3月

発行部数：1,000部

内容：1面	巻頭言 「京」からポスト「京」へ ～戦略プログラムの成果の実用化とポスト「京」に向けたアプリ開発を推進～
2面－3面	SC15 Report
4面－5面	センターメンバー研究紹介
6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

新聞・WEB新聞

- (1) 「無機物結晶とたんぱく質 接着解析プログラム」平成27年5月19日(火)、日経産業 先端技術面
- (2) 「ナノバイオ界面での相互作用解析のためのプログラムを開発」平成27年5月25日(月)、科学新聞 WEB版
- (3) 「エアコンや扇風機、交通手段である自動車に至るまで私たちの身の周りの騒音の低減を目指して - 東京大学生産技術研究所」平成27年12月14日(月)、マイナビニュース
- (4) 「界面構造高速化に成功」平成28年3月9日、日刊産業新聞

- (5) 「接着面解析 計算量1／100」平成 28 年 3 月 10 日, 日経産業新聞
- (6) 「物質の界面の構造を決定するスピードを 100 倍以上高速化！」平成 28 年 3 月 11 日, UTokyo Research
- (7) 「100-fold increase in speed of determining interface structure」平成 28 年 3 月 11 日, Science & Technology Research News
- (8) 「100-fold boost in speed of last element interface structure」平成 28 年 3 月 16 日, Weekly Hot News
- (9) 「新材料開発にビッグデータ 東大, 解析を100倍高速化」平成 28 年 3 月 20 日, 朝日新聞 Digital

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、スーパーコンピュータ京を駆使した大規模な数値シミュレーション手法とソフトウェアの研究開発、および、ターボ機械、自動車、船舶などを対象として、企業コンソーシアムプロジェクトや共同研究を介してその実用化を推進しています。また、乱流モデルやキャビテーションモデルに関する基礎研究や低騒音風洞を利用して非定常流れや発生する音に関する基礎研究も実施しています。

(1) 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

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、乱れを伴った風の中で稼働する場合の騒音予測モデルの高度化が望まれている。今年度は乱れの中におかれた二次元翼を対象に風洞実験を実施し、表面圧力変動や境界層の変動などの詳細な計測を実施した。これらのデータを詳細に解析し、乱れを含む翼から音が発生する原理的なメカニズムを解明していく。

(2) 大規模流体解析の実用化のための計算格子の基礎検討

本研究では迎角 9° のレイノルズ数 $Re=2.0 \times 10^5$ の NACA0012 の二次元翼まわりの境界層を対象として、計算格子の種類や格子解像度が異なる LES 計算を実施し、その予測精度を検証した。特に、実用計算においては格子生成の容易さも重要な課題であるため、ここでは従来の LES 計算に多用されていた六面体格子による計算に加えて、格子生成が容易なブリズム格子と四面体格子を併用した LES 計算も実施し、六面体格子による計算の予測精度と比較した。

(3) 自動車の空力・騒音解析

エネルギーの有効利用や CO_2 排出量低減のため、自動車の空気抵抗低減は重要な課題である。しかし、従来の経験や実験に基づく手法による改善は限界になりつつある。本研究では、約 50 億格子を用いた自動車の空力解析を実施し、空力特性に重要な影響を与える渦構造を解明し、その制御を試みた。また、流体・構造振動・騒音の大規模連成解析を実施し、車室内騒音の定量的予測を実現した。

(4) 数値曳航水槽の開発

大型模型を用いた曳航水槽試験と同等の精度と信頼性を有する数値シミュレーションを行う事を目標とし、船体表面の乱流境界層中の縦渦を完全に解像する 320 億格子規模の LES 計算を実施することにより、従来の RANS ベースの手法では実現不可能な高い精度での予測が可能であることを水槽試験と比較することにより確認した。

(5) CFD によるキャビテーション予測手法

フランシス水車を部分負荷で運転した際、フランシスタービンの下流側で発達する渦ロープ(歳差運動するキャビテーション渦)を大規模計算で予測した。フランシスタービンの下流側のドラフトチューブ内に渦ロープが発達し、ランナ回転数の約 1/4 の速度で回転する現象を確認した。

その他、民間企業等の共同研究として、ファンから発生する流体騒音の予測手法に関する研究、ポンプ吸込み水槽の渦の予測、水力機械の不安定現象の数値解析など、大規模数値解析の応用研究を幅広く展開している。

(1)研究成果一覧

国際会議予稿集

- 1) Chisachi Kato:APPLICATIONS OF FULLY-RESOLVED LARGE EDDY SIMULATION TO THE PREDICTIONS OF TURBOMACHINERY FLOWS AND AEROACOUSTICS, 2015 年 7 月, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED)
- 2) Olivier Pacot, Yang GUO, Chisachi KATO, Yoshinobu YAMADE:NUMERICAL PREDICTION OF THE PRESSURE PULSATION IN A DRAFT TUBE FOR PART LOAD AND FULL LOAD CONDITIONS USING THE LES APPROACH, 2015 年 7 月, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED)
- 3) Yang GUO, Chisachi KATO, Yoshinobu YAMADE, Yutaka OHTA, Taku IWASE, Ryo TAKAYAMA:NUMERICAL PREDICTION OF NOISE FROM THE INTERNAL FLOW IN A CENTRIFUGAL BLOWER, 2015 年 7 月, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED)
- 4) ISAO HAGIYA, CHISACHI KATO, YOSHINOBU YAMADE, TAKAHIDE NAGAHARA, MASASHI FUKAYA : CLARIFICATION OF PERFORMANCE CURVE INSTABILITY MECHANISM BY LARGE EDDY SIMULATION OF INTERNAL FLOW IN MIXED-FLOW PUMP, 2015 年 7 月, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED)
- 5) Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato, Akiyoshi Iida, Shinobu Yoshimura, Keiichiro Iida:PREDICTION OF PRESSURE FLUCTUATION ON A VEHICLE BY LARGE EDDY SIMULATION, 2015 年 7 月, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED)
- 6) Akiyoshi Iida, Chisachi Kato, Shinobu Yoshimura, Keiichiro Iida, Yoshimitsu Hashizume, Yoshinobu Yamade, Hiroshi Akiba, Kunizou Onda:LARGE-SCALE COUPLING ANALYSIS OF UNSTEADY FLOW, STRUCTURAL VIBRATION AND ACOUSTICS FOR PREDICTION OF FLOW-INDUCED NOISE OF AUTOMOBILE CABIN, 2015 年 7 月, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED)
- 7) Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato, Takahide NAGAHARA, Jun MATSUI:Larg Eddy Simulation of Unsteady Vortices in a Pump Sump, 2015 年 7 月, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED)
- 8) Taku Iwase, Hideshi Obara, Yoshinobu Yamade, Guo Yang, Chisachi Kato:Prediction of Flow Field and Aerodynamic Noise for Multiblade Fan of Air-conditioner, 2015 年 9 月, Asian International Conference on Fluid Machinery 2015
- 9) Kimihisa Kaneko, Tsutomu Yamamoto, Chisachi Kato:Aerodynamic noise simulation of axial flow

fan with non-axisymmetric structure for power electronics equipment, 2015 年 9 月, Asian International Conference on Fluid Machinery 2015

- 10) Naohiko Homma, Keisuke Takeishi, Chisachi Kato : Prediction of Aero-acoustic Noise of a Semi-Open Type Propeller Fan using Large Eddy Simulation, 2015 年 9 月, Asian International Conference on Fluid Machinery 2015
- 11) Yoshinobu Yamade, Taku Iwase, Yutaka Ohta, Yang Guo, Chisachi Kato: Prediction of Pressure Fluctuation in a Centrifugal Blower by Large Eddy Simulation, 2015 年 9 月, Asian International Conference on Fluid Machinery 2015
- 12) Yang Guo, Chisachi Kato, Yoshinobu Yamade, Yutaka Ohta, Taku Iwase, Ryo Takayama : Computation of Noise from the Internal Flow in a Centrifugal Blower, 2015 年 9 月, Asian International Conference on Fluid Machinery 2015
- 13) Olivier Pacot, Jun Matsui, Toshiaki Suzuki, Kiyoto Tani, Chisachi Kato: LES Computation of the Cavitating Vortex Rope in the Draft Tube of a Francis Turbine, 2015 年 9 月, Asian International Conference on Fluid Machinery 2015
- 14) Takero Mukai, Takuya Yamauchi, Jun Matsui, Toshiaki Suzuki, Kiyoto Tani, Olivier Pacot, Takanori Nakamura, Sho Harada, Yuta Tamura, Chisachi Kato: Experimental Study on Pressure Fluctuations in Draft Tube with Francis Turbine, 2015 年 9 月, Asian International Conference on Fluid Machinery 2015
- 15) Chisachi Kato: INDUSTRIAL APPLICATIONS OF LARGE-SCALE FLUID FLOW ANALYSIS - Present status and future perspectives -, 2015 年 12 月, 3rd International Conference on Computational Design in Engineering

著書・訳書

- 1) 佐藤文俊、加藤千幸: ソフトウェア開発実践, 2015 年 11 月, 東京大学出版会

学会講演論文

- 1) 加藤千幸: 大規模流体解析の現状と今後の展望, 2015 年 4 月, ターボ機械協会第 10 回プロペラ分科会
- 2) 加藤千幸: 京による最新の大規模流体シミュレーション, 2015 年 7 月, 第 47 回流体力学講演会/ 第 33 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム
- 3) 岩瀬 拓, 尾原秀司, 山出吉伸, 郭 陽, 加藤千幸: 空調用多翼ファンにおける流れ場と空力騒音の計算, 2015 年 9 月, 日本機械学会 2015 年度年次大会
- 4) 山出 吉伸, 岩瀬 拓, 太田 有, 郭 陽, 加藤 千幸: スクロールつき遠心送風機内部流れの大規模 LES 解析, 2015 年 9 月, 日本機械学会 2015 年度年次大会

- 5) 加藤千幸:大規模数値シミュレーションが実現する技術革新, 2015 年 11 月, 鉄道総研講演会
- 6) 加藤千幸:大規模流体解析の産業応用事例 Industrial Applications of Large-scale Fluid Flow Simulation, 2015 年 11 月, 日本船舶海洋工学会秋季講演会
- 7) 小野謙二, 加藤千幸:Parareal 法による拡散方程式の時間並列計算, 2015 年 12 月, 日本流体力学会第 29 回数値流体力学シンポジウム
- 8) 加藤千幸:大規模数値シミュレーションによるものづくりの革新～京の成果と今後の展開～, 2016 年 2 月, MI²(情報統合型物質・材料研究)と数学連携による新展開ワークショップ

総説・解説

- 1) 加藤千幸:スパコンの性能向上と流体解析の進展, 2015 年 8 月, 電業社機械, vol.39 No.1, pp.1-3
- 2) 加藤千幸:FrontFlow/blue - Wall-resolving LES Software -, 2015 年 9 月, 日本機械学会計算力学部門ニュースレター, 第 54 号, pp.17-20
- 3) 加藤千幸:「ターボ機械 HPC プロジェクト」の概要, 2015 年 9 月, ターボ機械, 第 43 巻第 9 号, pp.6
- 4) 長原孝英、山出吉伸、加藤千幸、松井純:ポンプ吸込水槽の非定常解析, 2015 年 9 月, ターボ機械, 第 43 巻第 9 号, pp.46-59
- 5) 加藤千幸, 藤井孝蔵:HPC を利用した次世代ものづくりー京を用いた先導事例, 2015 年 11 月, 計算工学, Vol.20, No.4 2015, pp.5
- 6) 加藤千幸:京を用いた大規模流体解析の産業応用, 2015 年 11 月, 計算工学, Vol.20, No.4 2015, pp.6-9
- 7) 加藤千幸:ガスタービン関係の数値シミュレーションの最前線(～現状と今後の展望～), 2015 年 11 月, 日本ガスタービン学会誌, vol.43, No.6, pp.1-2
- 8) 加藤千幸:計算機の進歩と大規模流体シミュレーションの進展, 2015 年 12 月, RRR, vol.72 No.12, pp.4-9
- 9) 郭陽, 加藤千幸:時間領域の有限要素法を用いた音響ソルバーのベンチマークテスト, 2016 年 1 月, 生産研究 68 巻 1 号(2016), pp.75-78
- 10) パコオリビエ, 加藤千幸, 郭陽, 山出吉伸:Computations of cavitating vortex rope by using LES, 2016 年 1 月, 生産研究 68 巻 1 号(2016), pp.66-68
- 11) 山出吉伸, 加藤千幸, 長原孝英, 松井純:ポンプ吸込水槽に発生する水中渦の LES 解析, 2016 年 1 月, 生産研究 68 巻 1 号(2016), pp.69-73
- 12) 萩谷 功, 加藤 千幸, 山出 吉伸, 長原 孝英, 深谷 征史:LES を用いた斜流ポンプ不安定特性の原因特定, 2016 年 2 月, 日本機械学会論文集, Vol.82 No.834

(2)研究プロジェクト

民間等との共同研究：

- 1) 「実測不可能な複雑現象の高フィidelity流体解析技術の開発」
- 2) 「タイヤ回転・地面移動の影響を考慮した車両表面の境界層および剥離せん断層内の乱流構造解明および制御技術開発」
- 3) 「CFDによる船舶性能推定精度向上に関する研究」

受託研究：

①公的資金

- 1) 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」
- 2) 文部科学省 平成27年度科学技術試験研究委託事業 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発
- 3) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構 全体俯瞰設計技術の研究開発

加藤信介研究室 都市・建築環境調整工学

加藤(信)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、都市や建築の環境特性やリスク評価を行うシミュレーション技術の開発や、都市や室内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継続的に行っている。また、建物に関するエネルギー使用を評価するため、時間変動や空間変動を考慮した、建物内のエネルギー使用シミュレーション手法の開発を進めている。

(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くかつ、爆発的な瞬間放出量は推定困難である。当研究室では粒子拡散モデルを活用して、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その有効性を確認した。本研究室で開発した手法は、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。

(2) 再飛散を考慮し長期被ばく線量の評価手法の開発

福島の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をシミュレーションにより行う方法に関して検討を行っている。今回、シミュレーションによる評価は、福島の観測データをよく再現する結果を得た。また、除染後のデータを集め除染計算を行った結果も、福島の観測データをほぼ再現していることを確認した。

(3) 建物内のエネルギー使用に関するシミュレーション手法の開発

建物内のエネルギー使用は、照明、コンセント負荷(建物内の様々な電気機器)、給水、給湯、エレベータ使用、暖冷房、換気など多分野に及ぶが、中でも空調に関わるエネルギー使用は、気象条件や建物内での使用条件により、時間的にも建物内の空間的にも大きく変動し、その正確な予測評価が難しい。これは、建物内の変動する3次元の空気流動によるエネルギー輸送を年間8760時間のすべてに渡り、行うことを必要とするが、これは莫大なシミュレーション量を必要とすることになり、実質的には不可能である。年間にわたるノードモデルによるモデル化されたエネルギーシミュレーションに、3次元の流体シミュレーションにより得られるエネルギー移動の応答係数を組み込み、実現象に良く対応するエネルギーシミュレーション手法の開発を進めている。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Minsik Kim, Ryohji Ohba, Masamichi Oura, Shinsuke Kato, Study on long-term radiation exposure analysis after the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant accident: validation of the EU long-term radiation exposure model (ERMIN), Journal of Nuclear Science and Technology, 2015.12
- 2) Minsik Kim, Ryohji Ohba, Masamichi Oura and Shinsuke Kato, Masayuki Takigawa, Paul E. Bieringer, Bent Lauritzen, Martin Drews, A source term estimation method for a nuclear accident using atmospheric dispersion models, Int. J. Environment and Pollution, Vol. 58, Nos. 1/2, 2015

和文論文

- 1) 寺西翔平, 趙旺熙, 岩本静男, 牧野由佳, 河野仁志, & 加藤信介. (2015). 業務用ビルを対象とした結露リスク評価に関する研究. 日本建築学会環境系論文集, 80(718), 1133-1142.
- 2) 林侃, & 加藤信介. (2015). 壁体内通気住宅の性能向上に関する研究. 日本建築学会環境系論文集, 80(713), 583-590.
- 3) 沼中秀一, 高橋祐樹, 天野健太郎, 加藤信介, 高橋幹雄, & 菊池卓郎. (2015). 知的生産性向上を目指した執務空間におけるコミュニケーションおよび環境要素に関する実態調査. 日本建築学会環境系論文集, 80(713), 609-619.
- 4) 中濱慎司, 加藤信介, 山田常圭, 坂本成弘, 道越真太郎, & 森川泰成. (2015). 実験用実大トンネル火災実験の LES による煙流動解析. 日本建築学会技術報告集, 21(48), 661-666.
- 5) 弘中完典, 小金井真, 樋山恭助, 山下哲生, 湯澤秀樹, 杉原義文, ... & 加藤信介. (2015). 低温再生型吸着材を用いた吸着式冷凍機の開発: 第 1 報-試作機による基本性能の把握及び吸着材熱交換器増設の検討. 空気調和・衛生工学会論文集, (223), 45-53.

国際会議予稿集

- 1) Minsik Kima, Ryohji Ohba, Shinsuke Kato and Shigehiro Nukatsuka, Study on long-term radiation exposure analysis after the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant accident: Validation of the EU long-term radiation exposure model (ERMIN), 2015 International Workshop on Post-Fukushima Challenges on Severe Accident Mitigation and Research Collaboration Daejeon Convention Center, Daejeon, Korea, November 9 – 11, 2015
- 2) Daisuke Kawahara, Shinsuke Kato, Prediction of dew condensation of windows with airflow, IBPC 2015, Oral Presentation, Italy Torino, 2015.6

学会講演論文

- 1) 大森敏明, 加藤信介, 金敏植, & 大浦理路. (2015). 41404 モンテカルロ法による簡易放射線量予測法の開発 (その 1): モンテカルロ法による放射線量の計算方法 (放射性物質, 環境工学 II,

学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 845-846.

- 2) 加藤信介, 大森敏明, 金敏植, & 大浦理路. (2015). 41405 モンテカルロ法による簡易放射線量予測法の開発 (その 2): Meckbach のプレハブ住宅モデルを対象とした放射線量計算 (放射性物質, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 847-848.
- 3) 大角和正, 加藤信介, 柳宇, 井田寛, & 森戸祐幸. (2015). 41425 光触媒 TMiP を用いた空気清浄機による浮遊菌除去性能の評価 (微生物 (2): 評価・対策, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 887-888.
- 4) 寺西翔平, 牧野由佳, 趙旺熙, 岩本静男, 河野仁志, & 加藤信介. (2015). 41146 空調方式の違いによる結露リスク評価に関する研究: 第 3 報 液冷空調システムを設けた事務所ビルにおける結露リスク評価 (湿気とリスク, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 301-302.
- 5) 河原大輔, & 加藤信介. (2015). 41141 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 18): 無次元指標を用いた通気を伴う建材内及び表面の湿害リスク評価手法の開発 (湿気とリスク, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 291-292.
- 6) 王立, 黄孝根, 加藤信介, 張偉榮, 佐藤大樹, & 関根賢太郎. (2015). 41100 CRI を用いたワークステーション周りの温熱環境解析 (その 3): ネットワークシミュレーションモデルにおけるチルドビームと什器蓄熱のモデル化 (温熱制御, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 209-210.
- 7) 二川智吏, 手塚純一, 加藤信介, 樋山恭助, 河原大輔, 李時桓, ... & 小林孝行. (2015). 41078 木造建物の断熱性能診断の普及に向けた技術検証 その 2: 断熱診断技術の活用事例と ZEH 化断熱改修物件への適用 (断熱改修 (2), 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 165-166.
- 8) 大浦理路, 金敏植, & 加藤信介. (2015). 41334 放射線量観測値に基づく放出量推定手法の福島第一原子力発電所事故への適用 (植生キャノピー, 風の道, 大気拡散, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 685-686.
- 9) 山本竜大, 王立, & 加藤信介. (2015). 41389 部品内部から拡散する VOC 測定法に関する数値解析 (化学物質 (1): 発生, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 815-816.
- 10) 金敏植, 加藤信介, & 大浦理路. (2015). 41335 福島第一原子力発電所事故後の沈着速度解析に関する研究 (植生キャノピー, 風の道, 大気拡散, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 687-688.
- 11) 黄孝根, 王立, 加藤信介, & 関根賢太郎. (2015). 41099 液冷空調システムにおける液冷熱回収装置の熱回収性能 (温熱制御, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 689-690.

概集, 2015, 207-208.

- 12) 林侃, & 加藤信介. (2015). 41241 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 4): 夏期における断熱構法との比較 (住宅の温熱性能の実測と解析, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 499-500.
- 13) 小林美子, 加藤信介, & 河原大輔. (2015). 41200 家具等を模擬したパネルによる人体周囲の温熱環境への影響に関する研究 (サーマルマネキン・人体熱モデル, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 409-410.
- 14) 有竹皓平, 小金井真, 樋山恭助, 山下哲生, 弘中完典, 加藤信介, ... & 近藤武士. (2015). 41679 回収熱利用吸着式冷凍機の開発: 変動負荷条件下での性能把握 (熱源機器・燃料電池, 環境工学 II, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 1415-1416.
- 15) 杉崎奈緒子, 高橋幹雄, 天野健太郎, 谷英明, 加藤信介, 沼中秀一, ... & 高橋祐樹. (2015). 40059 インフォーマルコミュニケーションを評価指標とした行動シミュレーションの感度解析 (知的生産環境 (2), 環境工学 I, 学術講演会・建築デザイン発表会). 学術講演梗概集, 2015, 117-118.
- 16) 高橋祐樹、加藤信介、足利誠、高橋幹雄、沼中秀一、天野健太郎、谷英明、(2015) 機械組立工場の研究開発施設における知的生産性に関する研究、(第 10 報) 執務者のコミュニケーション行動と執務環境評価の関係、空気調和・衛生工学会学術講演会講演論文集, 一般講演, 2015.09
- 17) 沼中秀一、加藤信介、足利誠、高橋幹雄、天野健太郎、谷英明、高橋祐樹、(2015)、機械組立工場の研究開発施設における知的生産性に関する研究、(第9報) 執務環境に関する竣工後の継続的な主観的評価の分析、空気調和・衛生工学会学術講演会講演論文集, 一般講演, 2015.09
- 18) 谷英明、加藤信介、足利誠、高橋幹雄、沼中秀一、天野健太郎、菊池卓郎、高橋祐樹、杉崎奈緒子(東京大学)、(2015)、機械組立工場の研究開発施設における知的生産性に関する研究、(第8報) 執務者のコミュニケーション行動調査、空気調和・衛生工学会学術講演会講演論文集, 一般講演, 2015.09
- 19) 西田恵、加藤信介、足利誠、高橋幹雄、沼中秀一、天野健太郎、谷英明、高橋祐樹、(2015)、機械組立工場の研究開発施設における知的生産性に関する研究、(第7報) 心電計を用いた執務者の生理計測、空気調和・衛生工学会学術講演会講演論文集, 一般講演, 2015.09
- 20) 天野健太郎、加藤信介、足利誠、高橋幹雄、沼中秀一、谷英明、高橋祐樹、(2015)、機械組立工場の研究開発施設における知的生産性に関する研究、(第6報) 建物運用時の省CO2アクションに関する実態調査、空気調和・衛生工学会学術講演会講演論文集, 一般講演, 2015.09

総説・解説

- 1) 王立, 加藤信介, & 張偉榮. (2015). チャンバーを用いる車室内装材 VOC 放散試験法に関する CFD 解析. 生産研究, 67(1), 49-53.

- 2) 河原大輔, & 加藤信介. (2015). 寒冷地におけるダイナミックインシュレーション技術を適用した窓の室内温熱環境に関する研究. 生産研究, 67(1), 45-48.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(A)「環境マイクロバイオームの動態計測に基づく集団感染機構の解明と制御」
- 2) 挑戦的萌芽研究「建築設備の健全な技術開発競争を促す BIM の制約条件」

民間等との共同研究

- 1) 液体解析を用いたトラックキャビンの VOC 濃度予測に関する研究

受託研究

① 公的資金

- 1) 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
「ダイナミックストレージシステムを活用する住宅の省エネに関する技術開発」
- 2) 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
「ダイナミックインシュレーションを用いた住宅向け窓システムの開発」

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。

近年、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。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得られる患者個別の血流情報を、病状予測および手術計画にフィードバックする。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) 1次元—0次元全身循環血流解析のための統合システムの開発

迅速な臨床応用を目的とした1次元—0次元(1D-0D)シミュレーションは、3次元解析と比べて、計算格子の生成に時間をかけることなく、短時間で血圧や流量などの主要な結果を得ることができる。そこで、医用画像からの形状抽出、1D-0D血流解析、可視化を一体化させた統合シミュレーションのシステム開発を行っている。今年度は特に、可視化を含めたポストプロセッシングに重点をおいて研究を進めた。医用画像から得られる血管形状は3次元であることから、1D-0D血流解析の結果を3次元幾何形状にリマッピングする手法を開発した。本可視化システムにより、圧力の伝播するダイナミックな様子や脳循環部の血流のバランス機構、脳循環部全体の流れの方向の把握、前および後交通動脈におけるWSS (Wall Shear Stress)の上昇など、診断に有用な情報を確認することができた。また、血管狭窄部の手術前と手術後の可視化を通じて、手術の影響を確認できることも示された。

(2) 医用画像からの血管の3次元形状モデリングシステムの開発

近年の多断面同時撮影CTの発展により、時系列で3次元のCTデータが得られるようになった。また、血管あるいはステントなどの経時変化を定量的に追跡することにより、ステントグラフトのずり上がりなどのメカニズムを解明しようとする試みが成されている。そこで、本研究では時系列の医用画像から血管の3次元形状をモデリングできるシステム(V-Modeler)の研究開発を行っている。今年度は、血管壁変形の時系列データと血圧情報から、医用画像だけでは得られない血管壁の硬さを算出する手法を確立した。また、V-Modelerを腹部大動脈瘤に対するステント留置手術に適用し、血管とステントの経時的な形状分析を行った。

(3) 流体構造連成解析における血管の初期状態の導出のための数値解析手法の開発

医用画像から得られる血管形状は、体内で血圧を受けた状況下のものである。流体構造連成解析を行う際には、初期形状によって血管の変形挙動は変化する。そこで、形状および応力、ひずみの初期状態を導出する数値解析手法の開発を行った。今年度は、頸動脈の流体構造連成解析に適用し、また、3次元流体構造連成解析と1D-0D血流解析をカップリングすることにより、現実の生体状況を再現できる解析手法の開発を行った。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Takafumi Akai, Katsuyuki Hoshina, Sota Yamamoto, Hiroaki Takeuchi, Youkou Nemoto, Marie Ohshima, Kunihiro Shigematsu, Tetsuro Miyata, Haruo Yamauchi, Minoru Ono, Toshiaki Watanabe, “Biomechanical Analysis of an Aortic Aneurysm Model and Its Clinical Application to Thoracic Aortic Aneurysms for Defining “Saccular” Aneurysms”, Journal of the American Heart, doi: 10.1161/JAHA.114.001547 (2015)
- 2) K. Yokoyama, M. Oishi, M. Oshima, “Development of a compact label-free small molecule measurement system using a periodically nanostructured sensor substrate”, RSC Advances, 2015,.5, pp.8014-8021 (2015)
- 3) K. Yokoyama, M. Oishi and M. Oshima, “Development of an enhanced surface plasmon resonance sensor substrate by investigating a periodic nanohole array configuration”, Journal of Applied Physics, vol. 118, 023101 (2015)
- 4) Fuyou Liang, Marie Oshima, Huaxiong Huang, Hao Liu and Shu Takagi, “Numerical Study of Cerebroarterial Hemodynamic Changes Following Carotid Artery Operation: A Comparison Between Multiscale Modeling and Stand-Alone Three-Dimensional Modeling”, Journal of Biomechanical Engineering, vol.137, issue.10 (2015)
- 5) Hao Zhang, Naoya Fujiwara, Masaharu Kobayashi, Shigeki Yamada, Fuyou Liang, Shu Takagi, Marie Oshima, “Development of a numerical method for patient-specific cerebral circulation using 1D-0D simulation of the entire cardiovascular system with SPECT data”, Annals of biomedical engineering, doi:10.1007/s10439-015-1544-8 (2015)
- 6) Yoshihito Ohhara, Marie Oshima, Toshinori Iwai, Hiroaki Kitajima, Yasuharu Yajima, Kenji Mitsudo, Absy Krady, Iwai Tohnai, “Investigation of blood flow in the external carotid artery and its branches with a new 0D peripheral model”, BioMedical Engineering OnLine201615:16, doi:10.1186/s12938-016-0133-x (2016)
- 7) Xiao-Bin Li, Masamichi Oishi, Marie Oshima, Feng-Chen Li, Song-Jing Li, “Measuring Elasticity-induced Unstable Flow Structures in a Curved Microchannel Using Confocal Micro Particle Image Velocimetry”, Experimental Thermal and Fluid Science, vol.75, pp. 118-128, doi:10.1016/j.expthermflusci. (2016)

和文論文

- 1) 大島 まり, 「血液循環系の流体力学」, パリティ, vol.31, No.01, p.33-35 (2016)

国際会議予稿集

- 1) Marie Oshima, “Multi-domain blood flow simulation using multimodal image data”, THMT'15, Turbulence, Heat and Mass Transfer vol.8.(2015)

国際会議アブストラクト

- 1) Shiori Yauchi, Kiyomi Niki, Motoaki Sugawara, Liang Fuyou, Marie Ohshima “Comparison of Blood flows determined by a Computational Model and measured by Ultrasonography”, 15th International Congress of Biorheology (2015)
- 2) Hao Zhang, Masaharu Kobayashi, Shigeki Yamada, Fuyou Liang, Shu Takagi, Marie Oshima, “Patient-specific modeling blood flow in the Circle of Willis to compare the 1D simulation with 3D simulation”, 4th International Conference on Computational and Mathematical Biomedical Engineering (CMBE2015) (2015)
- 3) Xiao-Bin Li, Masamichi Oishi, Marie Oshima, Feng-Chen Li, Song-Jing Li, “On the 3D structure of elasticity-induced unstable flow in the curved microchannel by using confocal micro-PIV and polarized camera”, ASME 2015 International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels, ICNMM2015 (2015)
- 4) Xiao-Bin Li, Masamichi Oishi, Tsukasa Matsuo, Feng-Chen Li, Marie Oshima, “Measurement of 3D flow structure of viscoelastic fluid using digital holographic microscope”, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference (2015)
- 5) Masamichi Oishi, Haruyuki Kinoshita, Teruo Fujii and Marie Oshima, “Investigation of micro droplet formation mechanism using confocal micro-PIV measurement”, 11th International Symposium on Particle Image Velocimetry (2015)
- 6) Masaharu Kobayashi, Atsushi Harada, Hao Zhang, Shigeki Yamada, Masamichi Oishi, Marie Oshima, “Development of an Integrated 1D-0D Simulation System for Patient-Specific Cerebral Circulation”, Interdisciplinary Cerebrovascular Symposium 2015
- 7) Yuya Sato, Sota Yamamoto, Marie Oshima, Katsuyuki Hoshina, “BENDING STIFFNESS OF STENT GRAFT BY 4-POINT BENDING TEST”, 10th seaturc symposium (2015)

学会講演論文

- 1) 矢内紫織, 仁木清美, 大島まり, 菅原基晃, 「全身循環シミュレーションを用いた四肢動脈の血流解析」, 第54回日本生体工学会抄録集 (2015)
- 2) 山田 茂樹, 大島 まり, 小林 匡治, 張 浩, 原田 篤, 渡邊 芳彦, 三宅 英則, 山本 一夫, 「無症候性頸動脈狭窄に対する血行力学的脳梗塞リスク予測」, 第24回日本脳ドック学会総会抄録集 (2015)

- 3) Hao Zhang, Naoya Fujiwara, Masaharu Kobayashi, Shigeki Yamada, Fuyou Liang, Shu Takagi, Marie Oshima, 「Investigation of Cerebral Circulation Using a 1D-0D Simulation with the SPECT data」, 日本流体力学会年会2015予稿集 (2015)
- 4) 大石 正道, 木下 晴之, 藤井 輝夫, 大島 まり, 「共焦点マイクロPIV 計測によるマイクロ液滴生成機構の力学的考察」, 日本流体力学会年会2015予稿集 (2015)
- 5) 森田佳士之, 大石正道, 松尾司, 大島まり, 藤井輝夫, 「Digital Holographic Microscopyによる位相情報を用いた粒子位置の三次元計測」, 可視化情報全国講演会(京都2015)可視化情報学会論文集 vol.35, suppl. No.2, pp.47-48 (2015)
- 6) 木下晴之, 榊原隆, 大島まり, 藤井輝夫, 「マイクロハイドロリックソフトアクチュエータの基盤技術の構築」, 第16回公益社団法人計測自動制御学会システムインテグレーション部門講演会(SI2015)予稿集 (2015)

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

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」

民間等との共同研究

「共焦点マイクロPIVによる流体内部流動の可視化」

吉川暢宏研究室 マルチスケール固体力学

連続体力学に基礎をおく有限要素法は、機械・構造物の設計に多大な貢献をしてきた。鋼に代表される金属材料では、試験片を用いた試験により許容応力が設定可能で、均質等方弾性体としてモデル化して行う応力解析により、応力規準を満足するか否かを判定できたことに依る。軽量化の観点から将来性が高い炭素繊維強化プラスチック(CFRP)材料に関しては、炭素繊維と樹脂で構成されるマイクロ構造に起因して、局所的な応力・ひずみの上昇が起り、そのスケールで正確な応力・ひずみ評価をしない限り、許容応力を設定する設計方法論を適用できない。その問題点を解決する有力な手法が、「京」に代表される大規模並列計算を援用して行う、炭素繊維と樹脂を明確に区分するマイクロあるいはメゾスケールシミュレーションである。シミュレーションを活用した、CFRP 部材の設計および製造高度化を目的に以下の研究開発を行っている。

(1) CFRP 製ファンブレードの動的強度評価法の開発

CFRP 製ファンブレードの実用化においては、飛来物に対する動的強度を確保することが最重要課題となる。その強度発現機構を明らかにするため、ミクロスケールシミュレーションおよびメゾスケールシミュレーションの適用可能性を検討している。実部品の解析は、直交異方性体モデルで行うものとし、ミクロからマクロスケールに繋がるマルチスケール動的損傷力学の方法論を考究している。

(2) CFRP 製高圧水素容器の最適設計

燃料電池自動車用燃料タンクや水素スタンド用蓄圧器で活用される炭素繊維強化複合容器の最適設計のため、メゾスケールモデルを用いた強度評価法を検討した。繊維束と樹脂を区別した有限要素モデルをフィラメントワインディングの手順に従い作成するソフトウェアを開発し、実証解析を通じて強度評価シミュレーションの妥当性を検討した。繊維束の巻き経路や、100 本程度の繊維束を同時に巻きつける多給糸フィラメントワインディングに関して、メゾスケールパラメータを直接的に扱う最適設計手法を検討している。

(3) 熱硬化 CFRP 製造プロセスシミュレーターの研究開発

強度信頼性評価を、製造プロセス段階にまで立ち入って行うため、熱硬化 CFRP 製造プロセスシミュレーションを実行するソフトウェアを開発した。炭素繊維束と樹脂の複合システムとしてメゾスケールモデル化することにより、樹脂の熱硬化特性を直接的に導入でき、硬化プロセス中の過昇温現象や、応力・ひずみ値を精度よく評価可能になった。開発したソフトウェアが、製造コスト(時間)と強度信頼性のトレードオフ問題を解決する強力なツールになり得ることを示した。

(4) 熱可塑 CFRP 製造プロセスシミュレーターの研究開発

熱可塑 CFRP プリプレグシートを利用して製造する大面積板状部材の強度信頼性と加工効率化の両立を目指して、熱可塑 CFRP 製造プロセスシミュレーターを開発している。ミクロスケールモデル化により、熱可塑樹脂特性の温度依存性を直接的に導入し、実部品スケールでの製造シミュレーションを行うため、マルチスケール展開の方法論を検討している。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Yoshinori Shiihara, M Sato, Y. Hara, I. Iwai, Nobuhiro Yoshikawa: Microrelief suppresses large wrinkling appearance, May 2015, Skin Research & Technology, Vol.21, No.2, pp.184-191.
- 2) Yoshihiko Hangai, Naoyuki Kubota, Takao Utsunomiya, Hisanobu Kawashima, Osamu Kuwazuru and Nobuhiro Yoshikawa: Drop weight impact behavior of functionally graded aluminum foam consisting of A1050 and A6061 aluminum alloys, July 2015, Materials Science & Engineering A, Vol.639, pp.597-603.
- 3) Yoshihiko Hangai, Yukiko Nakano, Shinji Koyama, Osamu Kuwazuru, Soichiro Kitahara, Nobuhiro Yoshikawa: Fabrication of Aluminum Tubes Filled with Aluminium Alloy Foam by Friction Welding, October 2015, Materials, Vol.8, No.10, pp.7180-7190.
- 4) Yoshihiko Hangai, Takao Utsunomiya, Osamu Kuwazuru, Soichiro Kitahara, Nobuhiro Yoshikawa: Deformation and Plateau Region of Functionally Graded Aluminum Foam by Amount Combinations of Added Blowing Agent, October 2015, Materials, Vol.8, No.10, pp.7161-7168.

和文論文

- 1) 半谷禎彦, 圖子田幸佑, 桑水流理, 吉川暢宏: マルチパス摩擦粉末焼結法によるポーラスアルミニウム板の作製, 2015 年 4 月, 日本機械学会論文集, 第 81 巻, 第 824 号, p.14-00600.

学会講演論文

- 1) 中野ゆき子, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏:スリット入りポーラス Al コア充填パイプの圧縮変形挙動観察, 2015 年 5 月, 軽金属学会第 128 回春期大会講演概要, pp.373-374.
- 2) 森田知朗, 半谷禎彦, 藤井英俊, 上路林太郎, 桑水流理, 吉川暢宏:摩擦粉末焼結法による Cu 添加ポーラス Al の作製の検討, 2015 年 5 月, 軽金属学会第 128 回春期大会講演概要, pp.217-218.
- 3) 石原綾乃, 半谷禎彦, 藤井英俊, 桑水流理, 吉川暢宏:摩擦粉末焼結法により作製した ADC12 ポーラス Al における圧縮特性の検討, 2015 年 5 月, 日本鑄造工学会第 166 回全国講演大会講演概要集, p.98.
- 4) 須藤俊, 久保田直之, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏, 北原総一郎:気孔形態制御による傾斜機能ポーラス Al の衝撃圧縮特性と気孔形態の評価, 2015 年 5 月, 日本鑄造工学会第 166 回全国講演大会講演概要集, p.97.
- 5) キムサンウォン, 吉川暢宏, 吉田剛, 中妻孝行, 岡崎順二, 石本裕保, 川又和憲:CFRP 製超高压

容器の詳細積層構成 FEM モデル作成ソフトウェアの開発, 2015 年 5 月, 一般社団法人日本高圧力技術協会平成 27 年度春季講演会, pp.27-30.

- 6) Yoshihiko Hangai, Takao Utsunomiya, Osamu Kuwazuru and Nobuhiro Yoshikawa, Fabrication and mechanical properties of functionally graded aluminum foam by friction based processing route, August 2015, Metfoam 2015.
- 7) ビダハルスジット, 椎原良典, 吉川暢宏, 黒木博史, 北條正弘: 衝撃負荷を受けるジェットエンジンファンブレードの動的挙動評価シミュレーション, 2015 年 9 月, 日本機学会 2015 年度年次大会 DVD 論文集.
- 8) キムサンウォン, 吉川暢宏, 吉田 剛, 中妻孝行, 岡崎順二, 石本裕保, 川又和憲: 炭素繊維強化プラスチック製圧力容器の詳細積層構成有限要素モデル作成ソフトウェアの開発 2015 年 9 月, 日本機学会 2015 年度年次大会 DVD 論文集.
- 9) 針谷耕太, 吉川暢宏, 山中忠佳, 青野昌弘, 岡田直樹: フィラメントワインディング CFRP 圧力容器の合理化設計のためのメゾスケールシミュレーション, 2015 年 9 月 日本機学会 2015 年度年次大会 DVD 論文集.
- 10) 竹本真一郎, 上原茂高, 吉川暢宏: FW 工法による CFRP 積層構造のメゾスケール強度解析 2015 年 9 月, 日本機学会 2015 年度年次大会 DVD 論文集.
- 11) 須藤 俊, 半谷禎彦, 川島久宜, 吉川暢宏, 北原総一郎: 気孔形態制御による傾斜機能ポーラス Al の機械的特性の評価, 2015 年 9 月, 日本機学会 2015 年度年次大会 DVD 論文集.
- 12) 森田知朗, 半谷禎彦, 桑水流理, 吉川暢宏: ツール走査型摩擦粉末焼結法による傾斜機能ポーラス Al の創製, 2015 年 9 月, 日本機学会 2015 年度年次大会 DVD 論文集.
- 13) 宇都宮登雄, 久保田直之, 半谷禎彦, 吉川暢宏: 複合化ポーラスアルミニウムの衝撃試験におけるプラトー応力推定, 2015 年 9 月, 日本機学会 2015 年度年次大会 DVD 論文集.
- 14) 中野ゆき子, 半谷禎彦, 北原総一郎, 吉川暢宏: ADC12 ポーラスアルミニウム・SUS304 パイプ複合部材の圧縮特性評価, 2015 年 9 月, 日本機学会 2015 年度年次大会 DVD 論文集.
- 15) キム サンウォン, 吉川暢宏, 吉田剛, 中妻孝之, 岡崎順二, 石本裕保, 川又和憲: 製造誤差補正モデルによる CFRP 製超高压水素容器の詳細応力評価, 2015 年 10 月, 構造物の安全性および信頼性 Vol.8 JCOSSAR2015 論文集.
- 16) 針谷耕太, 吉川暢宏, 山中忠佳, 青野昌弘, 岡田直樹: 炭素繊維強化プラスチック製高压容器の合理的設計のためのメゾスケールシミュレーション, 2015 年 10 月, 構造物の安全性および信頼性 Vol.8 JCOSSAR2015 論文集.
- 17) 中野ゆき子, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏: 傾斜機能ポーラス Al コア充填パイプ複合部材の作製, 2015 年 10 月, 第 66 回塑性加工連合講演会講演論文集, pp.97-98.

- 18) 織田澤俊介, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: 摩擦圧接を利用した ADC12 ポーラスアルミニウム充填 A1050 緻密パイプの作製, 2015 年 10 月, 第 66 回塑性加工連合講演会講演論文集, pp.101-102.
- 19) 石原綾乃, 半谷禎彦, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦粉末焼結法により作製した A6061 ポーラス Al における圧縮特性の検討, 2015 年 10 月, 第 66 回塑性加工連合講演会講演論文集, pp.103-104.
- 20) 須藤俊, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏, 北原総一郎: ADC12 ポーラス Al/A1050 Al 板からなるサンドイッチパネルの曲げ特性の評価, 2015 年 11 月, M&M2015 材料力学カンファレンス講演論文集.
- 21) 池田裕樹, 半谷禎彦, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏: ADC12 アルミニウム合金粉末添加による ポーラスアルミニウム高強度化の検討, 2015 年 11 月, M&M2015 材料力学カンファレンス講演論文集.
- 22) 田中彰己, 椎原良典, 吉川暢宏: Peridynamics 粒子法を用いた界面強度同定法の基礎的検討, 2015 年 11 月, M&M2015 材料力学カンファレンス講演論文集.
- 23) キムサンウォン, 吉川暢宏, 吉田剛, 中妻孝之, 岡崎順二, 川又和憲: TYPE3 CFRP1 製蓄圧器の ライナー形状最適化に関する研究, 2015 年 11 月, M&M2015 材料力学カンファレンス講演論文集.
- 24) 森田知朗, 半谷禎彦, 藤井英俊, 桑水流理, 吉川暢宏: Cu-Al 系金属間化合物/純 Al からなるネットワーク組織によるポーラス Al の圧縮特性向上, 2015 年 11 月, 軽金属学会第 129 回秋季大会講演概要, pp.351-352.
- 25) 松下駿人, 森田知朗, 半谷禎彦, 鈴木良祐, 松原雅昭, 桑水流理, 吉川暢宏: 発泡法による圧潰したポーラスアルミニウムの発泡挙動, 2015 年 11 月, 軽金属学会第 129 回秋季大会講演概要, pp.97-98.
- 26) 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏: 摩擦攪拌接合を利用した高機能ポーラス金属の開発, 2015 年 11 月, 第 1 回日本機械学会イノベーション講演会, pp.78-79.
- 27) 森田知朗, 半谷禎彦, 桑水流理, 吉川暢宏: ツール走査型摩擦粉末焼結法により作製した傾斜機能ポーラスアルミニウムの圧縮特性, 2015 年 11 月, 日本機械学会第 23 回機械材料・材料加工技術講演会.
- 28) 須藤俊, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 北原総一郎, 桑水流理, 吉川暢宏: A6061-ADC12 傾斜機能ポーラス Al と A1050 板材からなるサンドイッチパネルの作製, 2015 年 11 月, 日本機械学会第 23 回機械材料・材料加工技術講演会.
- 29) Yoshihiko Hangai, Ayano Ishihara, Osamu Kuwazuru and Nobuhiro Yoshikawa: Mechanical Properties of Functional Gradient Porous Aluminum Fabricated by Friction Stir Welding, December 2015, The 6th TSME International Conference on Mechanical Engineering.

- 30) 池田裕樹, 半谷禎彦, 藤井英俊, 上路林太郎, 桑水流理, 吉川暢宏:ADC12 アルミニウム合金粉末添加ポーラスアルミニウムの気孔観察および組織観察, 2016 年 3 月, 日本機械学会関東学生会第 55 回学生員卒業研究発表講演会.
- 31) 森田知朗, 半谷禎彦, 藤井英俊, 上路林太郎, 桑水流理, 吉川暢宏:摩擦粉末焼結法による Cu 添加ポーラス Al の作製, 2016 年 3 月, 日本金属学会 2016 年春期大会.
- 32) 織田澤俊介, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏:摩擦圧接を利用した ADC12 ポーラスコア A1050 緻密パイプの界面観察, 2016 年 3 月, 日本金属学会 2016 年春期大会.
- 33) 松下駿人, 半谷禎彦, 鈴木良祐, 松原雅昭, 桑水流理, 吉川暢宏:圧潰したポーラスアルミニウムの塑性流動によるプリカーサ作製とその発泡挙動, 2016 年 3 月, 日本金属学会 2016 年春期大会.
- 34) 須藤俊, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏:A6061-ADC12 傾斜機能ポーラス Al と A1050 Al 板材からなるサンドイッチパネルの変形挙動の評価, 2016 年 3 月, 日本金属学会 2016 年春期大会.

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 第一原理局所解析によるシンクロ型 LPSO 構造における欠陥間相互作用の解明

民間等との共同研究

- 1) 超高压水素容器の強度評価に関する研究
- 2) CFRP 製高压水素容器の熱硬化プロセス最適化に関する研究
- 3) 圧力容器等の減肉部安全評価に関する研究
- 4) ポーラス材料を活用したパイプの高機能化に関する研究
- 5) 超高压ガス用 FRP 容器の適用性に関する研究
- 6) 軽量ファンブレード衝撃解析技術の開発

受託研究

①公的資金

- 1) (独)新エネルギー・産業技術総合開発機構「複合圧力容器蓄圧器の基準整備等に関する研究開発」
- 2) (独)新エネルギー・産業技術総合開発機構「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」

- 3) (独)新エネルギー・産業技術総合開発機構「自動車用圧縮水素容器の基準整備・国際基準調和に関する研究開発」
- 4) (独)新エネルギー・産業技術総合開発機構「多給糸フィラメントワインディングによる複合容器の設計高度化に関する研究開発」
- 5) 科学技術振興機構「「鋼材/潤滑油」界面における機能性ヘテロナノ構造制御に基づく転動疲労高特性化のための指導原理の確立」

佐藤文俊研究室 計算生体分子科学

佐藤文俊研究室では、タンパク質などのナノ分子をターゲットに、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/QCLO 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、新規材料設計などの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第3世代密度汎関数法の研究開発

昨年度、本研究室が開発した全ての計算が解析的に行なえる第3世代密度汎関数法アルゴリズムを提案した。本年度は、分子積分計算の高次元化対応と第3世代法のスキームをベースとした解析的エネルギー勾配計算法を研究した。来年度も引き続き実施する。

(2) QCLO の改良

自動計算プログラム QCLO 法の新コードを整備するとともに、任意のボンドで計算分子構造を拡張することができる機能を拡張した。来年度も引き続き実施する。

(3) ProteinDF のオープンソース化

昨年度、GPL v3 ライセンスに基づくオープンソース化を実施した。本年度は、随時アップデート版を更新した。来年度も引き続き実施する。

(4) グルコースオキシダーゼの電子状態研究

第3世代法と新 QCLO を用いて、グルコースオキシダーゼの活性中心モデルによる計算検証を実施した。

(5) タンパク質 RESP 電荷の研究

現在、タンパク質の分子力学シミュレーションに使用されている静電ポテンシャル (ESP) を再現する原子電荷、RESP 電荷は、タンパク質ではなくアミノ酸残基の価数拘束条件付き RESP 電荷である。昨年度は、これを本来の定義によるタンパク質の RESP 電荷をタンパク質カノニカル分子軌道計算に基づき見積もる研究を実施した。今年度は、電荷の決定に汎用性の高い機械学習法を導入し、タンパク質の ESP を再現しつつ様々な特徴を持つ新しい原子電荷を提案した。来年度も引き続き実施する。

(6) タンパク質構造最適化計算の研究

タンパク質のような巨大分子の量子化学計算による構造最適化は、最適化ステップに極めて多くの回数が必要となることが知られている。その原因が、多井戸かつ各井戸が極めてフラットなエネルギーポテンシャル形状を持つことにあることを具体的に示した。

(7) 絶縁材料における電荷輸送特性の研究

MD 法、電子移動計算、キネティック MC 法などの各種シミュレーションを組み合わせ、絶縁材料や液体ベンゼンにおける電荷輸送特性の電子状態解析を実施した。本研究は、本学工学部日高・熊田

研究室との共同研究である。来年度も引き続き実施する。

(8) 酵素設計の研究

酸素耐性の高い [Ni-Fe-Se] 型ヒドロゲナーゼのガスキャビティ立体構造と DNA 構造との間の関係を調べるために、未知 [Ni-Fe-Se] 型ヒドロゲナーゼ種の複数同定・系統樹作成・ホモロジーモデリング・金属を持つ活性中心力場の作成ならびに MD を実行。系統樹とガスキャビティ立体構造との間に相関があることを明らかにした。また、同時期に進行したパンゲア分裂がヒドロゲナーゼの進化に影響を及ぼしたことも示唆された。本研究は、岡山大学田村研究室との共同研究である。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) T. Tamura, N. Tsunekawa, M. Nemoto, K. Inagaki, T. Hirano, F. Sato: Molecular evolution of gas cavity in [NiFeSe] hydrogenases resurrected in silico, 2016, Scientific Reports, 6,19742.
- 2) M. Sato, A. Kumada, K. Hidaka, T. Hirano, F. Sato: Computational study of excess electron mobility in high-pressure liquid benzene, 2016, J. Phys. Chem. C, 120, 8490.

和文論文

- 1) 佐藤正寛、熊田亜紀子、日高邦彦、平野敏行、佐藤文俊: 第一原理計算を用いた結晶ポリエチレン中の正孔移動度の評価, 2016 年, 電気学会論文誌 A, in press.

国際会議予稿集

- 1) F. Sato, T. Hirano: Development of a new algorithm of canonical molecular orbitals calculation based on density functional theory for massively distributed memory parallel computers, 2015 年 10 月, ISM HPCCON 2015.
- 2) M. Sato, A. Kumada, K. Hidaka, T. Hirano, F. Sato: Determination of Hole Mobility in Polyethylene: First Principle Calculation Based on Marcus Theory, 2015 年 10 月, IEEE Conf. on Electr. Insul. Dielectr. Phenomena.
- 3) T. Hirano, F. Sato: A Third-generation Density Functional Calculation Program: ProteinDF, 2015 年 12 月, Pacifichem 2015.
- 4) T. Hirano, F. Sato: An effective grid-free approach based on the third-generation density-functional-theory calculation method, 2016 年 2 月, Sanibel Symposium 2016.

著書・訳書

- 1) 佐藤文俊, 加藤千幸監修: ソフトウェア開発実践 科学技術シミュレーションソフトの設計, 2015 年 11 月, 東京大学出版会.
- 2) 佐藤文俊: 序文, ソフトウェア開発実践 科学技術シミュレーションソフトの設計, 2015 年 11 月, 東

京大学出版会.

学会講演論文

- 1) 金泰煥, 平野敏行, 佐藤文俊: 機械学習を用いたカノニカル分子軌道計算に基づく新規タンパク質形式電荷に関する研究, 2015 年 5 月, 第 18 回 理論化学討論会.
- 2) 平野敏行, 佐藤文俊: 自由なフラグメント分割可能な QCLO 法プログラムの開発, 2015 年 5 月, 第 18 回 理論化学討論会.
- 3) 佐藤文俊, 平野敏行: 量子分子生物学 春秋に富む, 2015 年 6 月, 第 15 回 東京大学生命科学シンポジウム.
- 4) 佐藤正寛, 熊田亜紀子, 日高邦彦, 平野敏行, 佐藤文俊: 量子化学計算を用いたポリエチレン中のホール輸送特性の一検討, 2015 年 9 月, 第 46 回電気電子絶縁材料システムシンポジウム.
- 5) 金泰煥, 平野敏行, 佐藤文俊: 線形回帰法を用いたタンパク質原子電荷に関する研究, 2015 年 9 月, 第 9 回 分子科学討論会.
- 6) 紀平昌吾, 平野敏行, 佐藤文俊: 大規模分子の構造最適化の収束法に関する研究, 2015 年 9 月, 第 9 回 分子科学討論会.
- 7) 平野敏行, 王笛申, 佐藤文俊: 第三世代密度汎関数計算法の進展, 2015 年 9 月, 第 9 回 分子科学討論会.
- 8) 佐藤正寛, 熊田亜紀子, 日高邦彦, 平野敏行, 佐藤文俊: 密度汎関数法を用いたポリエチレン中の正孔移動度の一検討, 2015 年 9 月, 第 9 回 分子科学討論会.
- 9) 平野敏行: 量子化学シミュレーションで 観察するタンパク質, 2015 年 10 月, 東海コンファレンス.
- 10) 平野敏行, 佐藤文俊: グルコースオキシダーゼ反応機構の理論研究, 2015 年 10 月, HPCI 成果報告会.
- 11) 佐藤文俊: 計算生命科学のための量子化学基礎, 2015 年 11 月, 計算生命科学の基礎講義.
- 12) 平野敏行: 分散メモリ型超並列計算機に向けた 大規模カノニカル分子軌道計算法の開発, 2015 年 12 月, High Performance Computing Chemistry.
- 13) 金泰煥, 平野敏行, 佐藤文俊: 線形回帰法を用いた新規タンパク質原子電荷に関する研究, 2015 年 12 月, 第 7 回 ProteinDF, ABINIT-MP ユーザ会.
- 14) 平野敏行, 佐藤文俊: 効率的なタンパク質カノニカル分子軌道計算を目指して, 2015 年 12 月, 第 7 回 ProteinDF, ABINIT-MP ユーザ会.
- 15) 佐藤文俊: ここまで来たタンパク質の量子化学計算, 2015 年 12 月, 東大精研会 ビジネス研究会.
- 16) 佐藤正寛, 熊田亜紀子, 日高邦彦, 平野敏行, 佐藤文俊: 液体ベンゼンにおける過剰電子移動度の見積り, 2016 年 3 月, 平成 28 年 電気学会全国大会.

総説・解説

- 1) 佐藤文俊: 工学とバイオ研究特集に際して, 2015 年 5 月, 生産研究, 67 巻, 3 号, p.245.
- 2) 吉田洵也, 平野敏行, 佐藤文俊: QCLO 法によるグルコースオキシダーゼ活性中心の電子状態計算, 2015 年 5 月, 生産研究, 67 巻, 3 号, p.265-272.
- 3) 佐藤文俊: 教育利用講義報告:「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」, 2015 年 9 月, スーパーコンピューティングニュース, Vol. 17, No. 5, p.47-49.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 佐藤文俊, 基盤研究(A)「第 3 世代密度汎関数法の展開とタンパク質ボルン・オープンハイマー分子動力学法の研究」
- 2) 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」
- 2) 「高電圧技術・絶縁材料技術の量子化学計算による研究」

国内および海外への研究成果の展開

- 1) 第 15 回 東京大学生命科学シンポジウム, 2015 年 6 月 27 日
- 2) 2015 東海コンファレンス, 2015 年 10 月 7 日
- 3) ISM HPCCON 2015, 2015 年 10 月 9 日
- 4) HPCC 2015, 2015 年 12 月 1 日
- 5) ビジネス研究会, 2015 年 12 月 8 日
- 6) Pacifichem 2015, 2015 年 12 月 18 日
- 7) The 56th Sanibel Symposium, 2016 年 2 月 16 日

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2点速度相関に着目して波数空間に替わるスケール空間での乱流エネルギー密度を定式化し、RANS の輸送方程式を考察した。また乱流ヘリシティに着目し、回転乱流の数値計算データを用いて RANS モデルについて調べた。

(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) Taketo Arika: Covariance of fluid-turbulence theory, May 2015, Physical Review E, Vol. 91, pp. 053001 1-11.
- 2) Fujihiro Hamba: Turbulent energy density and its transport equation in scale space, August 2015, Physics of Fluids, Vol. 27, pp. 085108 1-18.
- 3) Nobumitsu Yokoi, Axel Brandenburg: Large-scale flow generation by inhomogeneous helicity, March 2016, Physical Review E, Vol. 3, pp. 033125 1-14.

国際会議予稿集

- 1) Nobumitsu Yokoi, Dieter Schmitt: A new simple dynamo model for solar activity cycle, April 2015, Proceedings of European Geosciences Union General Assembly 2015, ST4.1-EGU2015-6745.
- 2) Nobumitsu Yokoi: Effects of flow inhomogeneity in turbulent dynamo, June 2015, GdR Dynamo 2015: Experimental, computational and theoretical investigations, II-4-7.
- 3) Fujihiro Hamba: Turbulent energy density in scale space based on two-point velocity correlation, July 2015, Proceedings of Ninth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, P-19.
- 4) Nobumitsu Yokoi: Turbulence modeling approach to fast reconnection, August 2015, NORDITA Program on Magnetic Reconnection in Plasmas, FD5-346.
- 5) Nobumitsu Yokoi: Density-variance effects in turbulent magnetic reconnection, August 2015, European Turbulence Conference (ETC15), MHD2-4.
- 6) Nobumitsu Yokoi: Turbulence modelling approach to geophysical and astrophysical phenomena, November 2015, Institute for Space and Earth Environmental Research (ISEE) Founding Symposium, P1.
- 7) Nobumitsu Yokoi: Large-scale flow generation in inhomogeneous hydrodynamic and magnetohydrodynamic turbulence, December 2015, The Dynamo Effects in Astrophysical and Laboratory Plasmas, 2-2.
- 8) Nobumitsu Yokoi, Axel Brandenburg: Large-scale flow generation due to inhomogeneous turbulent helicity, December 2015, Proceedings of American Geophysical Union Fall Meeting, NG33A-1847.
- 9) Fujihiro Hamba: Scale energy of turbulence based on two-point velocity correlation, February 2016, Progress in Turbulence VI, Springer Proceedings in Physics 165, pp. 33-36.
- 10) Nobumitsu Yokoi: Modelling helicity dissipation rate equation, February 2016, Progress in

Turbulence VI, Springer Proceedings in Physics 165, pp.93-96.

- 11) Nobumitsu Yokoi: A closure approach to inhomogeneous turbulent magnetic reconnection, March 2016, Proceedings of the US-Japan Workshop on Magnetic Reconnection (MR2016), 4-17.

学会講演論文

- 1) 半場藤弘: チャネル流におけるスケール空間の乱流エネルギー密度の解析, 2015 年 9 月, 日本物理学会 2015 年秋季大会講演概要集, p.2800.
- 2) 稲垣和寛, 半場藤弘: 回転系非一様乱流における乱流ヘリシティと平均流生成, 2015 年 9 月, 日本流体力学会年会 2015 論文集, 082.
- 3) 半場藤弘: スケール空間の乱流エネルギー密度を用いたチャネル流の解析, 2015 年 12 月, 第 29 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, E11-4.
- 4) 半場藤弘: 回転乱流のレイノルズ応力に対する履歴効果, 2016 年 3 月, 日本物理学会第 71 回年次大会概要集, p.3105.
- 5) 稲垣和寛, 横井喜充, 半場藤弘: 回転系非一様ヘリカル乱流における平均流生成, 2016 年 3 月, 日本物理学会第 71 回年次大会概要集, p.3065.
- 6) Nobumitsu Yokoi, Axel Brandenburg: Flow induction by inhomogeneous turbulent helicity, 2016 年 3 月, 日本天文学会 2016 年春季年会, Z216b.

小野謙二研究室 大規模計算機工学

高い信頼性をもつ流体シミュレーションには、大規模な計算格子と大規模並列計算機の有効利用技術、たとえば、計算機アーキテクチャを考慮した高性能なアルゴリズム開発、8万ノードを超える「京」コンピュータの性能を引き出す超並列化技術などが要求される。加えて、これらの大規模計算を設計現場で活用するためには、シミュレータ開発だけではなく、大規模な計算格子の自動生成、生成される多数のファイルから迅速にイメージを描画する可視化技術、流体解析を構成する全プロセスにわたる自動化などが必要となる。計算科学と計算機科学の融合技術により、先進的なシミュレーションシステムを構築し、産業分野への実応用と多方面への展開を図ることを目指している。本年度は、文部科学省 HPCI 戦略プログラム、および重点課題8, SIP プロジェクトに関連して、以下の活動を実施した。

(1) ステンシル計算における大規模反復法の行列積低 B/F 実装による高速化

計算機ハードウェアの B/F (演算能力に対するデータ供給能力の比) が小さい場合、高性能計算のためには低 B/F 計算アルゴリズムにもが要求される。流体解析などに現れる圧力ポアソン方程式や陰解法から導出される連立一次方程式の係数行列は疎であるため、行列ベクトル積のループ処理内の B/F は大きくなる傾向である。そこで、同一の係数行列に対し複数の解ベクトルを同時に解くことを想定し、行列ベクトル積を行列行列積として解く。FX10 を用いたテストでは、提案方法の最大性能は 66.3GFLOPS で FX10 理論性能 (211.2GFLOPS) の 31% を達成した。

(2) 大規模並列計算環境の構築

実務での流体計算は、プロジェクト管理、格子生成、パラメータ自動生成、並列ファイルの管理、データベース、ポスト処理、可視化など、様々な処理の組み合わせにより実現される。特に大規模になると、ファイル数の増大により管理に破綻を来す。そこで、大規模並列計算の実行を支援する実行環境 HPC/PF の整備を実施している。今年度は、事例創出を推進し、国プロ開発のアプリを HPC/PF へ実装し、利活用が可能なように整備、および事例データベースの充実に努めた。

(3) 上流設計システムの設計

設計上流における製品開発方向の最適化は、ものづくりプロセスの中で最も重要であり、開発コストや期間に大きく影響する。この段階で HPC 技術を最大限活用できる設計方法として、アンサンブル計算や多目的設計探索、不確定性評価技術、超短時間解析などの支援シナリオを検討し、その実現のためのシステム検討を実施した。

(4) 全体俯瞰システムの構築

ものづくりの企画検討時には、製品性能・コスト・機能・法令などの様々な境界条件や目標をにらみながら、魅力的な製品に向けて開発を進める。これらの「俯瞰」作業を支援するソフトウェア群の設計と開発をすすめる。風車開発や焼酎の品質管理などの実証事例への適用検討を実施した。また、様々なマテリアルを用いた議論を促進するために、タイルドウォールディスプレイ上での協調動作を行うアプリケーションの整備を実施した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Jorji Nonaka, Masahiro Fujita, and Kenji Ono. Multi-step image composition approach for sort-last massively parallel rendering. *Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering*, Vol. 2, No. 1, pp. 108–125, 2015.
- 2) Kenji Ono, Shuichi Chiba, Shunsuke Inoue, and Kazuo Minami. Low byte/flop implementation of iterative solver for sparse matrices derived from stencil computations. *High Performance Computing for Computational Science – VECPAR 2014*, Vol. 8969 of *Lecture Notes in Computer Science*, pp. 192–205. Springer International Publishing, 2015.

和文論文

- 1) 磯部光基, 木村祐介, 木村真也, 世良俊博, 横田秀夫, 小野謙二, 田中学. 鼻腔内熱流動ボクセル解析における横断面医療画像二次元補間の有効性. *生体医工学*, Vol. 53, No. 3, pp. 160–167, 2015.
- 2) 赤坂啓, 荒木敏弘, 石原裕二, 小野謙二. Immersed boundary 法および局所細分化格子を用いた実車形状周りの流れの短時間シミュレーション手法. *自動車技術会論文集*, Vol. 46, No. 5, pp. 963–968, 2015.

国際会議予稿集

- 1) Yucong Chris Ye, Yang Wang, Robert Miller, Kwan-Liu Ma, and Kenji Ono. In situ depth maps based feature extraction and tracking. In *5th IEEE Symposium on Large Data Analysis and Visualization, LDAV 2015*, Chicago, IL, USA, October 25-26, 2015, pp. 1–8, 2015.
- 2) Jorji Nonaka, Masahiro Fujita, and Kenji Ono. 234 scheduling of 3-2 and 2-1 eliminations for parallel image compositing using non-power-of-two number of processes. In *The 2015 International Conference on High Performance Computing & Simulation (HPCS 2015)*, p. 17, 23th July 2015.

国際会議アブストラクト

- 1) Seigo Imamura, Kenji Ono, and Mitsuo Yokokawa. Performance evaluation of iterative solver for multiple vectors associated with a large-scale sparse matrix. In *27th International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics Conference Abstract*, pp. 124–125, May 17-20 2015.
- 2) Jorji Nonaka and Kenji Ono. Big data visual analytics. In *NII Shonan Meeting Report No. 2015-7*. National Institute of Informatics, Nov. 11 2015.
- 3) Jorji Nonaka and Kenji Ono. Ubiquitous and sustainable high-performance visualization. In *Panel: Top Computation Visualization R&D Problems 2015*. SIGGRAPH Asia, Nov. 4 2015.
- 4) Jyunya Onishi, Kenji Ono, and Soichiro Suzuki. Parallelization of a block-based hierarchical

cartesian cfd code. In Proceedings of the ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015 AJK2015-FED, pp. AJK2015-29581, July 26-31 2015.

- 5) Ken Uzawa and Kenji Ono. Validation of local sgs models implemented in high-performance cfd solver: Ffv- c. In Proceedings of the ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015 AJK2015-FED, pp. AJK2015-29634, July 26-31 2015.

学会講演論文

- 1) Kenji Ono and Mikio Iizuka. A novel approach for visualizing and enhancing pint computation. 日本応用 数理学会 環瀬戸内応用数理研究部会第 19 回シンポジウム講演予稿集, pp. 18-19, 1 月 8 日-10 日 2016.
- 2) Mikio Iizuka and Kenji Ono. Parallel-in-time integration framework for building simulations. 日本応用数 理学会 環瀬戸内応用数理研究部会第 19 回シンポジウム講演予稿集, pp. 16-17, 1 月 8 日-10 日 2016.
- 3) Kenji Ono. 大規模データの可視化・分析環境の構築と展開. 第 21 回ビジュアライゼーションカンファレンス, Nov. 6 2015.
- 4) 今村成吾, 小野謙二, 横川三津夫. 共通の係数行列を持つ複数の連立一次方程式のための反復ソルバの実装と性能評価. 第 29 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, 12 月 15 日-17 日 2015.
- 5) 飯塚幹夫, 小野謙二, 加藤千幸. Parareal 法による拡散方程式の時間並列計算. 第 29 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, 12 月 15 日-17 日 2015.
- 6) 鶴沢憲, 小野謙二. 壁法則に基づく動的な les 壁面モデルの検討. 第 29 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, 12 月 15 日-17 日 2015.
- 7) 小野謙二. よりよい超大規模並列 cfd コード開発にむけて. 第 29 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, 12 月 15 日-17 日 2015.
- 8) 飯塚幹夫, 小野謙二, 加藤千幸. 時間並列計算法の研究開発動向及び将来展望. 日本機械学会第 28 回計算力学講演会(CMD2015), 10 月 10 日 12 日 2015.
- 9) Kenji Ono and Mikio Iizuka. エクサ級スパコンが導く新しい設計手法への期待. 第 47 回流体力学講演会/第 33 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウムアブストラクト集, p. 17, 7 月 2 日 2015.
- 10) 野中丈士, 藤田将洋, 小野謙二. Rank reordering and data padding for optimizing large-scale parallel image composition. 2015 年ハイパフォーマンスコМПユーティングと計算科学シンポジウム, pp. 64-72, 5 月, 2015.
- 11) 小野謙二. 大規模並列計算におけるポスト処理. 第 1 回名古屋大学情報基盤センター ネットワ

ーク型共同研究シンポジウム, 1 2015.

総説・解説

- 1) 小野謙二. HPC を利用したものづくり、その普及における課題と新しい試み. 計算工学, Vol. 20, No. 4, pp. 23–26, 2015.
- 2) 小野謙二. 可視化技術の進展と計算科学への貢献. 計算工学, Vol. 21, No. 1, 2015. 20 周年記念号(Vol.21, No.1)特別企画「計算工学の 20 年,これからの 20 年」.
- 3) 小野謙二. 係数行列のビット表現による疎行列反復解法的高速化. ながれ, Vol. 34, pp. 119–123, 2015. 特集 注目研究 in CFD28.

畑田敏夫研究室 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

畑田研究室では、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する大規模な産官学連携プロジェクトにおける研究開発マネ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した先端シミュレーションソフトウェアの産業界等への普及を促進するためのソフトウェア上の仕組みの構築である。特に、ユーザが同上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構築とそれを内蔵するソフトウェアプラットフォームの開発ならびにその普及を、関連研究室及び他研究機関と連携して実施することに力点を置いている。

平成27年度の主な活動は、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」(本格研究最終年度)と、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発「重点課題⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」(調査研究・準備研究)に関するプロジェクトマネジメントである。

(1) 「HPCI戦略プログラム 分野4 次世代ものづくり」に関するプロジェクトマネジメント

本プログラムは、京速コンピュータ「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きた。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」の代表機関として、他の連携機関((独)日本原子力研究開発機能、(独)宇宙航空研究開発機構)などとともに本格研究5年目(最終年度)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、プロダクトイノベーション、プロセスイノベーション、安心・安全社会構築の3つのカテゴリーで括られる先導的テーマを推進中で、平成27年度(最終年度)はスパコン「京」によるインパクトのある活用事例を数多く創出してデータベース化を推進した。後者については、「京」を中心とするHPCIで作動するアプリケーション群の利活用促進に資するソフトウェアプラットフォーム(HPC/PF)を完成させて有用なコンテンツの実装を行うとともに、当分野の専用サイト(計算工学ナビ)よりそれらの情報の社会への発信を実施した。

(2) 「重点課題⑧ 近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」(調査研究・準備研究)に関するプロジェクトマネジメント

本プロジェクトは、「京」の後継となるポスト「京」の開発計画(2020年頃完成予定)と連動し、その環境で利用できるアプリケーションソフトウェアを研究開発するプロジェクトである。当センターを中核として関連大学・研究機関、企業等によって構成されるグループは、9個の重点課題の内、標題の重点課題⑧を担当しており、平成26～27年度は調査研究・準備研究を実施してきた(平成28～31年度が本格研究予定期間。本年度は、特に設計プロセスの革新に関するサブ課題4つと製造プロセスの革新に関するサブ課題2つ(合計6つ)の研究内容に関して吟味(ベースかストレッチか等)を行った。その結果、一部サブ課題名の変更も含めた研究内容・実施計画を確定させた。また、サブ課題別のチーム編成の見直し・追加等を行い、重点課題⑧全体の研究開発推進体制を策定した。一方、効果的・効率的な研究開発の推進を図るための諸会議・委員会等についても目的・審議内容等の再検討を実施した。

梅野宜崇研究室 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ィジックス解析、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様々な問題に取り組んでいる。

(1) 拡張型原子間ポテンシャルモデルの開発

半導体デバイス、エネルギーデバイス、磁気デバイスなど、様々なデバイス材料の高性能化・構造緻密化が求められ、原子モデル解析による設計支援技術の確立が急務となっているが、そのためには高度な原子間ポテンシャルモデルの構築が必須である。このような材料では通常、ある限られた特性だけでなく幅広い材料物性を精度よく表現するモデルが必要となる。そこで、デバイス材料の原子シミュレーションに対して求められる原子間ポテンシャルの特性をデバイスごとに分類し、それに応じた原子間ポテンシャル構築法を選択することを提案するとともに、幅広いデバイス材料に対してポテンシャル構築と妥当性検証を行っている。本年度は、パワー半導体デバイス(SiC)や固体酸化物形燃料電池燃料極(Ni/YSZ)に対して環境非依存性に優れたポテンシャルモデルを開発し、変形・破壊・拡散などのメカニズムを解明した。

(2) ナノチューブ座屈変形の原子モデル解析

ナノチューブの座屈変形を利用することにより、小さいひずみ幅で急激な物性変化を起こす新しいナノデバイスの創製が期待できる。我々はカーボンナノチューブや窒化ホウ素ナノチューブを対象に、軸方向圧縮や径方向圧縮による座屈現象のメカニズムの解明に取り組んだ。我々の提唱する原子レベル構造不安定モード解析法を活用することで、潜在的な不安定変形モードが外力増加によって変化する様相を明らかにし、構造パラメータ(径、軸長、層数等)によって座屈モードが変化するメカニズムの解明に成功した。連続体モデルによって予測されている径方向圧縮下での高波数座屈モード発現(皺状座屈変形)について上記の原子モデル解析を実施し、皺状座屈が生じる構造パラメータの同定を行った。

(3) Ni/YSZ サーメット焼結現象の分子動力学解析

固体酸化物形燃料電池(SOFC)はエネルギー効率の高さや燃料の多様性などから次世代の主力電源の一つとして注目されているが、高温での運転による電極材料の微視構造変化に起因する性能低下などが問題となっているため、微視構造変化メカニズムの解明が急務となっている。我々は、典型的な燃料極材料である Ni/YSZ サーメットに対して反応分子動力学解析を可能とするボンドオーダーポテンシャル関数の開発に取り組み、高精度な原子間ポテンシャルを構築するとともに、拡散や蒸発による Ni 拡散メカニズムを明らかにすることに成功した。さらに、様々なカチオンを添加物として界面に導入することによる Ni 界面拡散抑制効果についての第一原理解析を行い、拡散抑制効果とカチオン半径に相関があることを明らかにした。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) A.M. Iskandarov, A. Kubo and Y. Umeno: Development of a new dipole model: interatomic potential for yttria-stabilized zirconia for bulk and surface, 2015, Journal of Physics: Condensed Matter Vol. 27, 015005
- 2) J. Pokluda, M. Cerny, M. Sob and Y. Umeno: Ab initio calculations of mechanical properties: Methods and applications, 2015, Progress in Materials Science Vol. 73, pp.127-158
- 3) Y. Umeno, A. Kubo and S. Nagao: Density functional theory calculation of ideal strength of SiC and GaN: Effect of multi-axial stress, 2015, Computational Materials Science Vol. 109, pp.105-110
- 4) A.M. Iskandarov and Y. Umeno: Atomistic modeling study of surface effect on oxide ion diffusion in yttria-stabilized zirconia, 2015, Solid State Ionics Vol. 279, pp.46-52

国際会議予稿集

- 1) A.M. Iskandarov and Y. Umeno: Molecular dynamics study of Ni/YSZ systems based on improved interatomic model, 2015, ECS Transactions Vol. 68-1, pp.2919-2925
- 2) L.C. Saha, A. Iskandarov, K. Nakao, T. Ishimoto, Y. Umeno and M. Koyama: Reactive force-field developement for metal/ceramic SOFC anode modeling, 2015, ECS Transactions Vol. 68-1, pp.2943-2949

国際会議アブストラクト

- 1) Y. Umeno, A. Kubo and S. Nagao: Ab initio-based atomistic model simulation of deformation and fracture in SiC power device (ICM12: International Conference on Mechanical Behavior of Materials, 2015.05.10-14, Karlsruhe Convention Center, Germany)
- 2) Y. Umeno and A. Kubo: Atomistic modeling of mechanical reliability of device materials (PACAM15: Fifteenth Pan-American Congress of Applied Mechanics, 2015.05.18-21, I Hotel and Conference Center, Champaign, IL, USA)
- 3) Y. Umeno and A. Kubo: Effect of defect and electric field on stress-induced domain switching in PbTiO₃: A molecular dynamics study (ACE-X 2015: The 9th International Conference on Advanced Computational Engineering and Experimenting, 2015.06.29-07.02, NH Muenchen Messe, Munich, Germany)
- 4) Y. Umeno and A. Kubo: Ab initio calculation and molecular dynamics simulation of mechanical reliability of SiC power device (ICSMA17: 17th International Conference on the Strength of Materials, 2015.08.09-14, Brno, Czech Republic)
- 5) Y. Kamimura, K. Edagawa, A. Iskandarov, M. Osawa, Y. Umeno and S. Takeuchi: Estimation of

Peierls stress by the Peierls-Nabarro model using the G-surface determined by ab-initio calculation, and the comparison with experiments (ICSMA17: 17th International Conference on the Strength of Materials, 2015.08.09-14, Brno, Czech Republic)

- 6) Y. Umeno, A. Kubo and N. Yoshikawa: Computational approach at different scales to fracture problems in polymers (IWACOM-III: The 3rd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, 2015.10.12-14, Tokyo, Japan)
- 7) A. Kubo and Y. Umeno: Bottom-up multiscale modeling for fracture problems (IWACOM-III: The 3rd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, 2015.10.12-14, Tokyo, Japan)
- 8) I. Koike, Y. Yachi, Y. Umeno, H. Shima and M. Sato: Verification of the accuracy of analytical models of hydrostatically pressurized buckling of single and multi-walled carbon nanotubes (ICCAE: The 11th International Conference on Civil and Architectural Engineering, 2016.01.22, Singapore)
- 9) Yoshitaka Umeno, Masanobu Sato, Hiroyuki Shima and Motohiro Sato: Atomistic modeling of buckling behavior of pressurized carbon nanotubes (EMN (Energy Materials Nanotechnology) Meeting on Carbon Nanostructures, 2016.03.27-31, Double Tree by Hilton Alana-Waikiki Beach, Hawaii, USA)

学会講演論文

- 1) 久保淳, 長尾至成, 梅野宜崇: SiC の変形・破壊解析のための原子間ポテンシャル作成と分子動力学シミュレーション, 第 20 回分子動力学シンポジウム, 2015 年 5 月 22 日, 山形大学, 講演論文集 USB
- 2) 佐藤誠修, 久保淳, 梅野宜崇: 圧縮荷重を受ける多層ナノチューブ座屈の分子動力学シミュレーション, 第 20 回分子動力学シンポジウム, 2015 年 5 月 22 日, 山形大学, 講演論文集 USB
- 3) 梅野宜崇, 久保淳: 拡張型原子間ポテンシャルによるデバイス材料信頼性の原子モデリング, 第 20 回計算工学講演会, 2015 年 6 月 8 日～10 日, つくば国際会議場, 講演論文集 CD-ROM
- 4) 久保淳, 長尾至成, 梅野宜崇: 密度汎関数理論に基づく SiC および GaN の理想強度解析, 第 20 回計算工学講演会, 2015 年 6 月 8 日～10 日, つくば国際会議場, 講演論文集 CD-ROM
- 5) 佐藤太裕, 草野彩子, 小池育代, 島弘幸, 梅野宜崇: 分子動力学法を用いたカーボンナノチューブに生じる特異な断面座屈モードの解析, 第 20 回計算工学講演会, 2015 年 6 月 8 日～10 日, つくば国際会議場, 講演論文集 CD-ROM
- 6) 丁瑩娜, A. Iskandarov, 梅野宜崇: Ni/YSZ サーメットの焼結現象についての原子レベルシミュレーション (Atomistic study of nickel sintering mechanisms), 日本機械学会第 28 回計算力学講演会, 2015 年 10 月 10 日～12 日, 横浜国立大学, 講演論文集 USB
- 7) 佐藤誠修, 久保淳, 梅野宜崇, ナノ構造体の座屈変形に関する分子動力学計算と原子レベル不安

定モード解析, 日本機械学会第 28 回計算力学講演会, 2015 年 10 月 10 日～12 日, 横浜国立大学, 講演論文集 USB

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(B)「ナノ構造体の座屈変形を積極利用した革新的ナノデバイスの最適設計」

受託研究

① 公的資金

- 1) 内閣府 SIP(戦略的イノベーション創造プログラム), 課題名「革新的構造材料」, 研究開発課題「耐環境セラミックスコーティングの構造最適化及び信頼性向上」, 研究項目「EBC の熱機械的負荷損傷シミュレーション」
- 2) 内閣府 ImPACT(革新的研究開発推進プログラム), 課題名「超薄膜化・強靱化『しなやかなタフポリマー』の実現」, 研究項目「構造用樹脂材料と複合材料の強靱化のためのボトムアップ型マルチスケール解析」

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、情報科学的手法(インフォマティクス)により統計的に解析することで、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指した研究を行っている。2015 年度においては、太陽電池材料、イオン液体、人工超格子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) 第一原理シミュレーションによる格子欠陥の原子・電子構造解析

点欠陥やドーパント、さらに転位や粒界のような格子欠陥は材料機能に決定的な役割を果たしている。そのような格子欠陥近傍の局所構造や化学結合を理解するためには、計算機を用いたシミュレーションが強力な研究ツールとなる。溝口研究室ではそのような格子欠陥に対して、シミュレーションに加えて、X 線吸収端近傍微細構造(XANES)や電子線エネルギー損失吸収端微細構造(ELNES)の実験も行い、機能材料や生体材料の格子欠陥近傍の局所構造を調べた。

具体的には、ペロブスカイト型酸化物における転位近傍に偏析する空孔を調べた。転位と転位の間の領域における欠陥形成は明らかになってなかった。今回、転位間から ELNES を測定するとともに ELNES のシミュレーションも行い、転位の間において酸素空孔が形成していることを突き止めた。

また高温構造材料として用いられている酸化アルミニウムでは、その構造の複雑さから変形時に導入する積層欠陥の構造は明らかになってない。そこで、走査透過型電子顕微鏡(STEM)と第一原理シミュレーションから、積層欠陥の構造と形成エネルギーを明らかにした。

近年ペロブスカイト型化合物とは異なる結晶構造を有するにおいても強誘電特性がわかりつつあり、物質探索が盛んに行われている。高圧合成によりコランダム構造を有する ZnPbO_3 の作製に成功し、その電子構造を第一原理計算により調べた。その結果、実験で観測されたメタリックな伝導特性は点欠陥の形成などによって導入されたキャリアが関与していることが明らかとなった。

さらに、骨粗しょう症治療薬の投薬時に生じる BRONJ という病気について、その起源を明らかにすることを目的として、BRONJ にかかわる金属イオンの存在状態を XANES とシミュレーションにより調べた。その結果、金属イオンがリン酸塩の状態として存在していることが明らかになり、その発生機構の端尾を知ることが出来た。

(2) ビッグデータ解析法を用いて物質の界面の構造を決定するスピードを高速化

物質の界面は、電池や触媒など様々な機能と密接に関係している。一方で、その構造を決定するには数千～数万回という膨大な数の理論計算が必要であった。研究グループは、資源探索の分野のビッグデータ活用技術であるクリギング(Kriging)という空間補間法を活用し、100 回程度の計算で界面構造を決定することに成功した。従来の方法では界面の構造を決定するのに一か月程度かかることもあったが、今回開発した手法では数時間で済む。加えて、今回開発した手法が様々な物質に適用できることも明らかにした。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) "Acceleration of stable interface structure searching using a kriging approach", S. Kiyohara, H. Oda, K. Tsuda, and T. Mizoguchi, Jpn. J. Appl. Phys., 55 (2016) 045502-1-4.
- 2) "Characterization of Vanadium in Oil Sands Fluid Petroleum Coke", J. E. Zuliani, T. Miyata, T. Mizoguchi, J. Feng, D. W. Kirk, and C. Jia, Fuel, 178 (2016) 124-128.
- 3) "First principles calculation of oxygen K edge absorption spectrum of acetic acid: Relationship between the spectrum and molecular dynamics", Y. Matsui and T. Mizoguchi, Chem. Phys. Lett., 649 (2016) 92-96.
- 4) G. A. Rosales, A. Masuno, Y. Higo, H. Inoue, Y. Yanaba, T. Mizoguchi, T. Umada, K. Okamura, K. Kato, Y. Watanabe "High Elastic Moduli of a 54Al₂O₃-46Ta₂O₅ Glass Fabricated via Containerless Processing" Sci. Rep., 5 (2015) 15233-1-8.
- 5) R. Yu, H. Hojo, T. Mizoguchi and M. Azuma, "A new LiNbO₃-type polar oxides with closed-shell cations: ZnPbO₃", J. Appl. Phys., 118 (2015) 094103-1-5
- 6) T. Sugiyama, M. Uo, T. Mizoguchi, T. Wada, D. Omagari, K. Komiyama, Y. Mori, "Copper accumulation in the sequestrum of medication-related osteonecrosis of the jaw", Bone Reports, 3 (2015) 40-47
- 7) H. Masai, T. Yanagida, T. Mizoguchi, T. Ina, T. Miyazaki, N. Kawaguti, and K. Fukuda, "Local coordination state of rare earth in eutectic scintillators for neutron detector applications", Scientific Reports, 5 (2015) 13332-1-8
- 8) S-Y. Choi, S-D Kim, M Choi, J. Ryu, N. Shibata, T. Mizoguchi, E. Tochigi, T. Yamamoto, S-J L. Kang, and Y. Ikuhara, "Assessment of strain-generated oxygen vacancies using SrTiO₃ bicrystals", Nano Lett., 15 (2015) 4129-4134.
- 9) E. Tochigi, A. Nakamura, T. Mizoguchi, N. Shibata, and Y. Ikuhara, "Dissociation of the 1/3 Dislocation and Formation of the Anion Stacking Fault on the Basal Plane in α -Al₂O₃", Act. Mater., 91 (2015) 152-161.

国際会議予稿集

- 1) (Invited) Teruyasu Mizoguchi, "Prediction of crystal interface structure using informatics approach", SNU-UTokyo Workshop on Advanced Materials Science and Engineering, Tokyo, 2/1. 2016
- 2) (Invited) T. Mizoguchi, "Vibrational information in EELS", East Asia Microscopy Society-Satellite meeting for Young Scientist (EAMC2-YS) 2015, Awaji, Hyogo, Nov. 27th, 2015
- 3) (Invited) T. Mizoguchi, "Individual dopant and nano-scale phase separation in glass investigated

using STEM, EELS and theoretical calculations", 2nd International symposium on Frontiers in Materials Science (FMS 2015), Waseda, Tokyo, Nov. 20th, 2015

- 4) (Invited) T. Mizoguchi, "Atomic-scale Investigation of Glass using STEM-EELS", International Union of MRS (IUMRS) 2015, Jeju, Korea, Oct. 28th, 2015
- 5) (Invited) T. Mizoguchi, "Theoretical ELNES: Excitonic and Vibrational calculations", Frontier of electron microscopy for materials science (FEMMS) 2015, Lake Tahoe, USA, 2015, 9/18
- 6) (Invited) T. Mizoguchi, "Investigation of material interface using abinitio calculation, microscopy, and informatics", Pacific-Rim Ceramics conference (PacRim), Jeju, Korea, 2015, 9/1
- 7) (Plenary) T. Mizoguchi, "Atomic-scale investigation of amorphous materials using STEM, ELNES, and theoretical calculations", International conference on Electron Microscopy and 36th Annual Meeting of Electron Microscopy Society of India (EMSI), Mumbai, India, 2015, 7/10
- 8) H. Katsukura, K. Tomita, T. Miyata and T. Mizoguchi, "Effect of van der waalsinteractions fortheoretical calculation of liquid ELNES", 2nd International symposium on Frontiers in Materials Science (FMS 2015), Waseda, Tokyo, Nov. 20th, 2015
- 9) H. Oda, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi, "Prediction of Structure and Energy of BCC Grain Boundaries Using Informatics Approach", 2nd International symposium on Frontiers in Materials Science (FMS 2015), Waseda, Tokyo, Nov. 20th, 2015
- 10) S. Kiyohara and T. Mizoguchi, "Application of Non-linear Regression to predict Grain Boundary Structure and Energy", 2nd International symposium on Frontiers in Materials Science (FMS 2015), Waseda, Tokyo, Nov. 20th, 2015
- 11) K. Tomita and T. Mizoguchi, "Excitonic effect on Na-L_{2,3} edge XANES", 2nd International symposium on Frontiers in Materials Science (FMS 2015), Waseda, Tokyo, Nov. 20th, 2015
- 12) T. Miyata and T. Mizoguchi, "Molecular Vibrational Measurement of Localized Areas in a Liquid", 2nd International symposium on Frontiers in Materials Science (FMS 2015), Waseda, Tokyo, Nov. 20th, 2015
- 13) K. Tomita and T. Mizoguchi, "Excitonic effect on ELNES calculation", IUMRS 2015, 2015, Oct. 27th, Jeju, Korea
- 14) S. Kiyohara and T. Mizoguchi, "Effective Search for Grain Boundary Structure with Data Mining", IUMRS 2015, 2015, Oct. 27th, Jeju, Korea
- 15) K. Tomita and T. Mizoguchi, "Excitonic Calculations of ELNES: Low Energy and High Energy Spectra", Microscopy and Microanalysis 2015, 2015, Aug. 6, Portland, USA.
- 16) T. Mizoguchi, A. Masuno, H. Inoue, "Atomic scale investigation of dopant in glass using aberration

corrected STEM-EELS", GOMD-DGG 2015, 2015, May 19, Miami, USA..

著書・訳書

- 1) "産業応用を目指した無機・有機新材料創製のための構造解析技術", シーエムシー(2015)ISBN 978-4-7813-1070-1, 第 7 章1節「数値解析:第一原理計算の基礎と構造解析への応用」執筆担当

学会講演論文

- 1) 【招待講演】溝口照康, "第一原理計算による XANES 計算の基礎", SPring-8 講習会 産業利用に役立つ XAFS による先端材料の局所状態解析 2016, 東京, 1/28, 2016
- 2) 【招待講演】溝口照康, "情報科学手法を用いた物質界面構造決定の高速化", NIMS 情報統合型物質・材料研究拠点 ミーティング, 東京, 1/5 2016
- 3) 【招待講演】溝口照康, "ELNES/XANES 第一原理計算の基礎と応用", 新化学技術推進協会, 東京, 12/11 2015
- 4) 【招待講演】溝口照康, "原子と電子を観る・知る・はかる", 高崎高校, 群馬, 高崎, 12/2, 2015
- 5) 【招待講演】溝口照康, "電子顕微鏡観察と計算科学", セラミックス大学, 東京大学, 本郷, 2015, 10/10
- 6) 【招待講演】溝口照康, "電子エネルギー損失分光法(EELS)による酸化物の原子分解能解析", 応用物理学会 2015 年度秋季大会, 名古屋, 2015, 9/14
- 7) 【招待講演】溝口照康, "顕微鏡ユーザーのための第一原理計算～基礎と実例～", 顕微鏡学会 電子顕微鏡解析技術, 熱海, 2015, 8/22
- 8) 【招待講演】溝口照康, "最新の第一原理計算とその応用 I", 第 15 回 ナノ構造研究所 材料計算セミナー, JFCC, 名古屋, 2015, 4/9
- 9) 【招待講演】溝口照康, "最新の第一原理計算とその応用 II", 第 15 回 ナノ構造研究所 材料計算セミナー, JFCC, 名古屋, 2015, 4/9
- 10) 小田尋美, 清原慎, 溝口照康, "情報科学手法に基づく酸化マグネシウム及び鉄粒界構造の決定", 日本セラミックス協会, 2016/3/16, 東京, 早稲田大学
- 11) 清原慎, 小田尋美, 溝口照康, "情報科学手法を用いた結晶粒界構造探索の高速化", 日本セラミックス協会, 2016/3/16, 東京, 早稲田大学
- 12) 宮田智衆, 溝口照康, "走査型 TEM によるイオン液体中の単原子観察および構造解析", イオン液体討論会, 2015/10/26, 京都, 同志社大学
- 13) 清原慎, 溝口照康, "マテリアルズインフォマティクスに基づいた結晶粒界構造およびエネルギーの効率的探索", エレクトロセラミックス研究討論会, 2015/10/23, 東京

- 14) 溝口照康, "球面収差補正 STEM-EELS を用いた機能性セラミックスの原子分解能解析:アモルファスおよびフォノン", エレクトロセラミックス研究討論会, 2015/10/22, 東京
- 15) 富田皓太, 溝口照康, "Na 化合物の Na-L2,3 ELNES におけるエキシトン効果", 日本金属学会秋季大会, 2015/9/16, 九州大学, 伊都
- 16) 清原慎, 溝口照康, "情報科学手法を利用した結晶粒界インフォマティクス", 日本金属学会秋季大会, 2015/9/17, 九州大学, 伊都
- 17) 勝倉裕貴, 宮田智衆, 溝口照康, "液体 XANES 理論計算におけるファンデルワールス力の影響", 第 18 回 XAFS 討論会, 2015/7/30, つくば, 高エネルギー加速器研究所
- 18) 富田皓太, 溝口照康, "Na 化合物の XANES 理論計算における Exciton 効果", 第 18 回 XAFS 討論会, 2015/7/30, つくば
- 19) 溝口照康, 宮田智衆, 松井良樹, "第一原理バンド計算を用いた液体 XANES の理論計算", 第 18 回 XAFS 討論会, 2015/7/30, つくば
- 20) 富田皓太, 溝口照康, "ELNES/XANES 理論計算の Exciton 効果", 新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 2015/7/27, 北海道
- 21) 勝倉裕貴, 宮田智衆, 溝口照康, "ELNES/ELNES 理論計算におけるファンデルワールス力の影響", 新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 2015/7/27, 北海道
- 22) 清原慎, 溝口照康, "機械学習による粒界構造探索の高速化", 新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 2015/7/27, 北海道
- 23) 宮田智衆, 溝口照康, "STEM-EELS による液体の電子・振動状態解析", 新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 2015/7/27, 北海道
- 24) 小田尋美, 清原慎, 溝口照康, "情報科学手法による BCC 金属の粒界構造およびエネルギー予測", 新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 2015/7/27, 北海道
- 25) J. Zuliani, 宮田智衆, 溝口照康, D. Kirk, C. Jia, "Characterization of nanoscale structure porous carbon materials using TEM analyzing", 新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 2015/7/27, 北海道
- 26) 清原慎, 溝口照康, "情報科学的手法を用いた粒界構造およびエネルギーの予測", 第 71 回顕微鏡学会, 2015/5/13, 京都
- 27) 富田皓太, 溝口照康, "ELNES 理論計算におけるエキシトン効果", 第 71 回顕微鏡学会, 2015/5/15, 京都

総説・解説

- 1) 池野豪一, 溝口照康, 「第一原理計算の基礎と EELS 計算への応用」, 顕微鏡, Vol 50, No. 1

(2015) 16-22)

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 科学研究費:基盤研究(A)・代表,「全構造・全元素・全吸収端内殻励起スペクトル計算法の確立による物質計測の新展開」
- 2) 科学研究費:挑戦的萌芽研究・代表,「原子分解能計測による非晶質物質設計」

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 2015 年度
- 2) 「電池材料に関する研究」 国内分析メーカー 2015 年度
- 3) 「新規エネルギーデバイスに関する研究」 国内電機メーカー 2015 年度

長谷川洋介研究室 界面輸送工学

本研究では、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。2015年度は、乱流摩擦抵抗低減を目的として、空間発達を伴う乱流境界層での制御効果の検証を進めた。また、乱流中のスカラー源推定のためのアルゴリズムの構築を進めた。更に、製造プロセスに関わる熱流体力学として、粒子を含んだ懸濁液の塗布乾燥、及びその後生成される粒子の堆積パターンに関する研究を行った。

従来、多くの乱流摩擦抵抗低減に関する研究例では、その計算と解析の容易さから、完全発達流を対象として、制御則が提案されてきた。一方で、現実の多くの流れは、空間発達を伴う乱流境界層である。そのため、完全発達流で提案されてきた制御則を空間発達流に適用した場合、どの程度の制御効果が得られるかについては不明な点が多く残されていた。そこで、本研究では、最も古典的な制御手法である **opposition control** を乱流境界層に適用し、完全発達流における制御効果との比較を行った。その結果、幅広いレイノルズ数域において、乱流境界層と完全発達流でほぼ同等の抵抗低減率が確認された。この事実は、壁面近傍のダイナミクスには普遍性があり、完全発達流で開発された制御則を空間発達流へ応用可能であることを示唆している。一方、壁面摩擦をそれに寄与する様々な力学的因子に分解し、抵抗低減機構を詳細に調べたところ、空間発達流では、流れの空間発達に特有な寄与項の影響が大きいことが分かった。この結果は、空間発達流では、完全発達流とは異なる抵抗低減制御のアプローチがあり得ることを意味している。この知見に基づき、空間発達の効果を積極的に利用した制御則の開発も行った。具体的には、部分的に壁から吹き出しを与えて、その下流域における流れの変化を調査した。この場合、壁面吹き出しによって、制御領域において抵抗低減が生じるだけでなく、その下流域においても、抵抗低減効果が長い区間継続することが明らかになった。これは、吹き出しによって、その下流域の境界層が厚くなるためである。一方、吹き出し以外の制御を部分的に加えると、その下流では必ず境界層が薄くなり摩擦が増加するため、全体の制御効率が下がることが分かった。

乱流中に何らかの物質が放出される場合、濃度プルームは乱流運動によって大きく変形、分断される。その結果、これを下流の濃度センサーで計測すると極めて間欠的なシグナルが得られる。このような複雑なシグナルから、如何に物質の放出源を特定するかは、極めて重要、かつ挑戦的な課題である。本研究では、乱流の直接数値シミュレーションによって、計算機上に乱流場を再現し、その中に仮想的なスカラー源を配置することにより、スカラー拡散を再現した。更に、スカラー源の下流にセンサを配置し、それらの点における濃度シグナルのみを用いて、随伴解析に基づきスカラー源の位置や強度を推定する手法を提案した。本研究で開発した推定手法では、計算負荷はセンサの数に依存しない一方、センサーが増えることによってより推定性能が向上することが確認できた。また、推定性能は放出源の位置にも影響を受けることが明らかになった。具体的には、放出源が壁面近傍に近づくにつれて、スカラー場の散逸が大きくなり、スカラー放出源強度の細かい変動を再現することが難しくなることが分かった。但し、このような状況下においても、本研究で開発した推定法は、平均の放出量については、高い精度で定量的に推定できることが分かった。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Kenshiro Muramatsu, Youngjik Youn, Youngbae Han, Yosuke Hasegawa, Naoki Shikazono, "Numerical Study on the effect of initial flow velocity on liquid film thickness of accelerated slug flow in a micro tube" *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 54, 77-86 (2015)
- 2) Alexander Stroh, Bettina Frohnappfel, Philipp Schlatter, Yosuke Hasegawa "A comparison of opposition control in turbulent boundary layer and turbulent channel flow" *Physics of Fluids*, 27, 075101 (2015)
- 3) Maurizio Quadrio, Bettina Frohnappfel, Yosuke Hasegawa, "Does the choice of forcing term affect flow statistics in DNS of turbulent channel flow ?", *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 55(2): 286-293 (2015).

国際会議予稿集

- 1) Alexander Stroh, Yosuke Hasegawa, Jochen Kriegseis, Bettina Frohnappfel, "Wave-Length-Dependent Rearrangement of Secondary Vortices over Superhydrophobic Surfaces with Streamwise Grooves" *9th International Symposium on Turbulent and Shear Flow Phenomena (TSFP-9)*, Melbourne, Australia, June 30-July 3 (2015)
- 2) Davide Cerizza, Wataru Sekiguchi, Takahiro Tsukahara, Yosuke Hasegawa, "Reconstruction of time-varying scalar source intensity based on sensing signal in turbulent channel flow", *8th International Symposium on Turbulent Heat and Mass Transfer 8 (THMT15)*, Sarajevo, Bosnia and Herzegovina, Sept. 15-18 (2015)
- 3) Wataru Sekiguchi, Davide Cerizza, Takahiro Tsukahara, Yosuke Hasegawa, "Estimation of Scalar Source Strength Based on Sensor Information by Adjoint Analysis in Turbulence", *the Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT015)*, Busan, Korea, Nov. 22-25 (2015)
- 4) Davide Cerizza, Tamer Zaki, Yosuke Hasegawa, "Effects of Velocity and Measurement Uncertainties on Estimation of Scalar Source Intensity in Turbulent Channel Flow", *Proceedings of The First Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC)*, Mar. 13-17, 2016, Hawaii's Big Island, US.

著書・訳書

- 1) Yosuke Hasegawa, "Optimal Control of Heat and Fluid Flow for Efficient Energy Utilization" in *"Multiple Shooting and Time Domain Decomposition Methods"*, Springer, editors: Carraro, T., Geiger, M., Koerkel, S., Rennacher, R. (2015)

学会講演論文

- 1) 長谷川洋介, Stroh A, Schlatter, P., Frohnäpfel, B., 「乱流境界層における局所制御の大域的抵抗低減効果」, 日本流体力学会 年会2015, 東京, 平成27年9月26日～9月28日
- 2) 関口航, Davide Cerizza, 塚原隆裕, 長谷川洋介「随伴解析を用いたセンサー情報に基づくスカラー源強度推定」日本伝熱シンポジウム, 福岡, 平成27年6月3日～6月5日
- 3) 山口 裕吾, 長谷川洋介「多成分溶媒の乾燥プロセスにおけるマイクロ粒子の堆積パターン」日本伝熱シンポジウム, 福岡, 平成27年6月3日～6月5日

総説・解説

- 1) 長谷川洋介, 「乱流輸送現象への最適制御理論の応用」, システム／制御／情報, 59(7), 256-261 (2015)

(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)

民間等との共同研究

- 1) 「フィン形状最適化計算によるウエーブフィン性能向上検討」
- 2) 「ガスタービン冷却翼の形状最適化研究」c) 受託研究

受託研究

① 公的資金

- 1) 科学技術振興機構(JST)国際科学技術共同研究推進事業(SICORP)“ビッグデータと災害”「乱流中におけるスカラー源探索アルゴリズム最適化のためのビッグデータ数値実験室」(研究代表者)

革新的シミュレーション研究センター 平成 27 年度 活動報告 Vol. 8

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

