



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 28 年度
活動報告

Vol. 9

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すが、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、これまでに研究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ます。また、平成 26 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」上で活用されるアプリケーションの研究開発を推進しています。今後も、HPC(ハイ・パフォーマンス・コンピューティング)環境を利用したシミュレーションの実用化と新たな設計論の研究開発を進めていく所存です。

「京」や「ポスト京」、さらにはそれらのコモディティウェアによるクラスタ型スーパーコンピューティングによるものづくりの変革を目指し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でき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 29 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 28 年度 活動報告

Vol. 9

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『「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

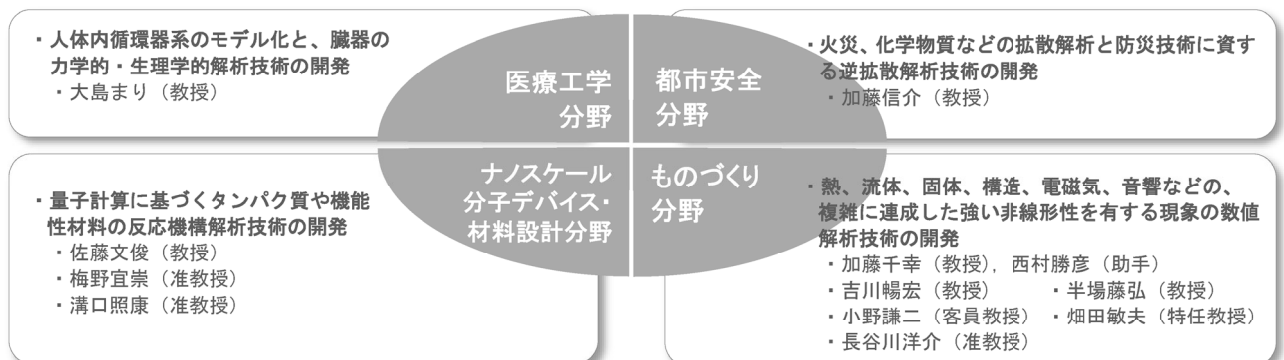
1. 革新的シミュレーション研究センターの概要

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・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・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ーパーコンピュータ「京」および将来のエクサフロップスクラスの超高速スーパーコンピュータまでを視野に入れ, 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『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:2014～2019 年度)を代表機関として推進し, 重点課題⑥単新的クリーンエネルギーシステムの実用化(実施期間:2014～2019 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



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



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



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

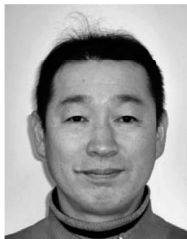
Fujihiko HAMBA, Professor

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



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

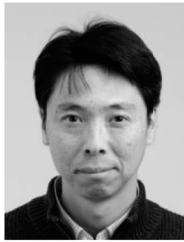
Teruyasu MIZOGUCHI, Associate Professor

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



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『「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埋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

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を多数の制約条件を持つ問題に適用するための技術の開発、多目的設計探索に必要な多目的設計最適化手法のターンアラウンドタイム削減技術の開発、および製品の企画検討時における設計パラメータの曖昧さを含む製品性能の定量評価を可能とする不確定性評価技術(UQ)を開発することを目的とする。これらの技術を上流設計プラットフォームとして整備し、メーカーやJAXA、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。また、開発した設計プラットフォームはポスト京マシン以外でも使えるように整備して産業界に展開し、産業競争力強化に貢献する。

本年度は、昨年度までに実施したフィージビリティスタディーの結果に基づき、コアとなる下記の要

素技術等を研究開発した。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

a) 多目的設計探査技術

a)-1 ターンアラウンドタイムを短縮する多目的設計最適化手法の試作と簡単なテスト問題での評価に関しては、ターンアラウンドタイムを短縮する多目的設計最適化手法の設計と試作、簡単なテスト問題での評価を、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および国立大学法人東北大学が実施した。

a)-2 多目的設計最適化手法の制約条件取扱い手法の試作と簡単なテスト問題での評価に関しては、既存の制約条件取扱い手法のベンチマーキングと新たなベンチマーク問題の構築を、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および国立大学法人東北大学が実施した。

b) 高速計算技術

b)-1 時間領域並列化法の基礎技術検討とプラットフォーム設計に関しては、放物型偏微分方程式に対する時間領域並列化法の大規模性能評価を、国立研究開発法人理化学研究所が実施した。

b)-2 ステンシル計算の低 B/F 実装の性能評価に関しては、多ベクトルの同時計算手法の性能評価を、国立大学法人九州大学が実施した。

c) 上流設計技術

c)-1 上流設計プラットフォームの設計に関しては、Capacity Computing に向けたワークフローの再設計を、国立研究開発法人理化学研究所および国立大学法人九州大学が実施した。

(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

新素材や新たな動力を用いた次世代自動車を早急にかつ高い品質で実現するためには、既存の実験代替を目的とした CAE を活用した設計手法に対して、より高次元で CAE を利用した設計プロセスの革新が必要である。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 HPC 環境を活用することで、設計上流側でデザイナーと技術者が協調した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変化を考慮した(リアルワールド)シミュレーションを実現することで予測精度・信頼性向上を実現する。リアルタイムシミュレーションでは、格子作成を含む解析ターンアラウンドタイムを、ストロングスケール計算技術とポスト京アーキテクチャとのコデザインにより抜本的に短縮し、実験・実測に匹敵する速度を実現する。リアルワールドシミュレーションでは、ウィークスケール技術による解像度向上と共に、企業の有する膨大な実験・実走行データを活用し、既存のシステムに対して、操縦安定性や乗り心地、快適性まで含めたより高次元の製品性能評価を可能とするシステムの実現を目指す。このシステムが実現すれば、開発期間のさらなる短縮化と製品の性能向上の支援が可能となり、日本の自動車産業の国際競争力強化に貢献することができる。

本年度は、昨年度までに実施したフィージビリティスタディーの結果に基づき、コアとなる下記の要

素技術等を研究開発した。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

- a) 流体・構造統一連成解析の実装と検証に関しては、ラグランジュ粒子法とオイラー法のカップリングに基づく流体・構造統一解法を用いて、実自動車空力問題に適用可能とするためフレームワークを再実装し、検証例を用いて定性的に妥当な結果を得た。これらを国立大学法人神戸大学が実施した。
- b) エクサスケールを想定したソルバーカーネルの高速化と流体・構造界面モデルの構築に関しては、非圧縮流れ解法のアルゴリズムを再設計し、また Multigrid, RANS 解法の開発により、2015 年度時点から約 5 倍の計算時間短縮を達成した。また、オイラー構造解析手法との連成に必要な、流体・構造界面モデルを実装した。これらを国立研究開発法人理化学研究所が実施した。
- c) オイラー構造解析手法の実装と検証に関しては、直接時間積分法に基づく構造-流体の統一化運動方程式を CUBE に実装し、基礎的な流体-構造連成問題および振動問題でその妥当性を検証した。さらに、本手法を用いたエンジンブロックモデルの振動解析を実施した。これらを国立大学法人山梨大学が実施した。

(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、既存のターボ機械設計の高度化に資する設計システムを開発するとともに、これをターボ機械設計に適用しその有効性を実証する。具体的には、エクサスケールの計算機を活用し、最大 1 兆グリッドの計算により、ほぼ全てのターボ機械の製品性能を実験と同じ精度で予測する大規模流体解析技術を開発するとともに、大規模解析で取得した結果をリファレンスデータとして活用することにより既存の RANS ベースのターボ機械製品評価技術を高度化し、これを用いた多目的最適化計算をサポートするターボ機械設計システムを研究開発する。これまでの乱流の大規模解析に関する研究は、計算の大規模化・高速化を実現することにより、RANS 解析では予測が不可能な現象の予測に主眼が向けられてきたが、本サブ課題では、この乱流の大規模計算技術をベースとし、現在ターボ機械設計の主要解析ツールと位置づけられる RANS 解析自体を高精度化し、これを多目的最適化設計に適用する。これにより、開発する設計ツールが、単なる実験の代替ツールという枠を超え、ターボ機械設計にとって従来より飛躍的に有用な情報を提供することを目指す。

本年度は、昨年度までに実施したフィージビリティスタディーの結果に基づき、コアとなる下記の要素技術等を研究開発した。

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の開発
 - a)-1 複数ベクトル利用による計算コスト低減方法の検討に関しては、複数ベクトルを含むコアルーチンの流れソルバーへの実装検討を実施した。
 - a)-2 1 兆グリッド規模大規模解析を実現するデータハンドリングシステムの詳細設計に関しては、コードの高速化技術、局所時間刻み計算機能等大規模解析を実現するための解析機能を統合した流れソルバーの作成を実施した。

b) 大規模流体解析における収束性改善のための乱流解析手法の研究開発

b)-1 圧縮性解析手法の基礎検証に関しては、乱流境界層中の渦のダイナミクスと音場を同時に計算する検証計算を実施した。

b)-2 準直接計算結果をリファレンスデータとする乱流解析手法の高度化の検討に関しては、乱流の構造および非定常特性の詳細分析およびこれらのモデル化手法の検討を実施した。

c) 格子ボルツマン法 (LBM) 用レイヤー格子の研究開発

c)-1 メッシュレス LBM 導入に関する詳細設計に関しては、高速化並びに、計算精度に及ぼすスキームおよび離散点配置の影響に関する検討を、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。

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検証に関しては、質量保存に及ぼすインターフェースでの物理量補間の精度に関する調査を、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) 航空機的设计・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、航空機的设计・開発および運用・運航における重大な課題を解決し、格段の高性能化、安全性向上、さらには利用者サービスとしての質の向上を実現するコア技術を確立する。設計・開発においては、これまでは実機試験など開発の下流段階でしか評価できなかった設計課題を、設計初期段階で評価可能とするため、実機フライト環境を高忠実度に再現でき、また、高速に解析を実施できる革新的解析プログラムを、「京」での成果をベースとして研究開発する。また、運用・運航に関しては、危険な状況下での航空機の安定性・安全性向上のキー技術である失速特性の高精度予測技術を研究開発し、非線形制御の導入など航空機の飛行制御技術の抜本的な改善を目指す。また、個別最適な現状の航空機運用を更に高度化し、統合的に最適な運航計画の策定を実現するために、ビッグデータとシミュレーションを融合した新しい運用・運航プロセス技術を研究開発する。特に、緊急時の計画変更の影響最小化、サービスの質の向上などの実現を目指す。

本年度は、昨年度までに実施したフィジビリティースタディーの結果に基づき、コアとなる下記の要素技術等を研究開発した。

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の研究開発

a)-1 直交格子ベース基盤ソルバーのプロトタイプ開発に関しては、FFV-HC をベースに圧縮性解析手法および IB 法を導入したプロトタイプ版の開発を、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構が実施した。

a)-2 壁面モデルの基礎検討に関しては、既存プログラムを用いて LES 壁モデルの開発を、国立大学法人東北大学が国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構と連携して実施した。

b) 設計評価技術の研究開発

b)-1 バフエット解析手法の検討に関しては、風洞試験スケールでの解析試行を、国立大学法人

東北大学が国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構と連携して実施した。

c) 飛行安全性向上技術の研究開発

c)-1 非線形飛行力学モデルの基礎検討に関しては、既存プログラムを用いた検討を、学校法人東京理科大学が連携して実施した。

d) 新しい運航モデルの研究開発

d)-1 運航モデルの基礎検討に関しては、単純なエージェントモデルを用いた検討を、国立大学法人東京大学(7月11日以前)および学校法人東京理科大学(7月12日以降)が実施した。

(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

自動車をはじめ、圧力容器、タービンなどの製造には、様々な鋼板のプレス成形や溶接が行われている。近年は、環境負荷低減や燃費向上への要請から、超高張力鋼などの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に基づく「ものづくり基盤工程の高度化」が必須となっている。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、新材料に対応した高度成形・溶接シミュレータを開発する。ポスト「京」コンピュータを用いれば、従来は不可能であった、寸法精度評価に十分な解析メッシュを使用でき、熱伝導 (接触熱伝達を含む)・焼入れ効果 (熱による材料特性の変化) との連成解析手法を構築することも可能となる。溶接では、熱・相変態・塑性流動の連成解析、ハイテン溶接部の水素脆化、m スケールの製品 (自動車、圧力容器など) に対する数 μ m スケールの溶融条件の制御、摩擦攪拌溶接やハイブリッド溶接に代表される次世代溶接法、の評価を可能とする。

本年度は、昨年度までに実施したフィージビリティスタディーの結果に基づき、コアとなる下記の要素技術等を研究開発した。

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反復法ソルバーのコード検証に関しては、MPC 条件付きの大規模接触問題 (40,502,286 自由度) に対して、並列直接法との計算時間比較を実施した。
- b) 並列領域分割法のコード検証に関しては、これまで不可能であった大規模モデル (1,033,416,303 自由度) の領域分割を実施可能とした。
- c) 熱弾塑性・相変態の強連成解析手法のコード検証に関しては、熱・構造一体型連成の定式化に基づくコードを例題に適用し、その動作確認および精度検証を実施した。
- d) 材料構成則の設計・実装に関しては、変位場と温度場の連成現象を考慮するために材料構成則 (熱応力や物性値変化) ルーチンと応力解析ルーチンとのインターフェースを設計し、プログラム実装を実施した。
- e) プリポストの実装・仕様見直しに関しては、開発環境「Electron」を使用してウェブブラウザで動作するプリポスト開発を実施し、溶接線・溶接条件の設定機能の仕様を見直した。

(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

本サブ課題では、ジェットエンジンファンブレードや自動車ボディの CFRP(炭素繊維強化プラスチック)化において実用が期待されている、熱可塑プリプレグシートを積層し加熱成形する製造手法を合理化するシミュレータの開発を行う。実用化に際しての最重要課題が合理的強度評価手法の確立であるが、そのためには、成形後の繊維配置が不明であるという根本的な問題の解決が必要である。加熱成形後の繊維配置を正確に予測し合理的な強度評価に基づく高度な最適設計を実施可能とするため、プリプレグシート 1 枚ずつを正確に有限要素モデル化し、加熱成形プロセスを精密に辿る成形シミュレータを開発する。開発項目の中核を占めるのは 1)炭素繊維と樹脂を区分したミクロスケールでの成形シミュレータと、2)ミクロスケールシミュレーションの結果を直交異方性連続体へマルチスケール展開する方法論、3)熱と接触大変形の強連成解析シミュレータである。

本年度は、昨年度までに実施したフィージビリティスタディーの結果に基づき、コアとなる下記の要素技術等を研究開発した。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

- a) 樹脂と繊維を区分したマイクロモデル設定による熱可塑成形シミュレータの開発に関しては、結晶性樹脂および非晶性樹脂それぞれに対する温度依存ならびに結晶化度依存材料特性モデルを決定しシミュレータの動作確認試験を実施した。
- b) 「京」による、試験片レベルの計算の実施と試験結果との照合による検証に関しては、温度勾配を発生させて硬化させた熱可塑樹脂単体のそり試験を実施し、シミュレーション結果との照合のための予備解析を実施した。
- c) 一方向強化プリプレグの熱可塑成形マクロモデルの材料パラメータの決定に関しては、複合則あるいは半経験式に基づいた手法を中心に材料パラメータ決定方法を調査し、熱伝導解析に対して 1 次元的ではあるが複合則を適用した検討を実施した。

(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、本格実施フェーズの初年度として、アプリケーション連携開発会議を初めて開催するなど、上記の各施策を順次開催しながら研究開発全体を軌道に乗せるとともに、特に重点課題間、サブ課題間の有効な連携研究活動の実現に向けての調整に力点を置いた支援を実施した。

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『水素利用技術研究開発事業／燃料電池自動車及び水素ステーション用低コスト機器・システム等に関する研究開発／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』

(実施期間:平成 27～29 年度)課題責任者:吉川暢宏(東京大学生産技術研究所)

[概 要]

「エネルギー基本計画」(2010年閣議決定)では、エネルギー源のベストミックスの確保のため、2015年からの燃料電池自動車(FCV)の普及開始に向け、日米欧、関連地域、民間企業等と協力・連携し、供給インフラを含めた実証的取組を強化するとしている。また、「Cool Earth—エネルギー革新技术計画」(2008年経済産業省策定)では、FCV及び水素製造・輸送・貯蔵技術を2050年に世界のCO₂排出量を半減する上での重要技術と位置づけている。

また、2010年7月には燃料電池実用化推進協議会によって、産業界の総意として、2015年にFCVの一般ユーザーへの普及開始に向けたシナリオが提案された。さらに、2011年1月には自動車メーカー及び水素供給事業者13社が共同声明を発表し、自動車メーカーがFCV量産車を2015年に4大都市圏を中心とした国内市場への導入と一般ユーザーへの販売開始を目指し、開発を進めていることや、水素供給事業者が2015年までにFCV量産車の販売台数の見通しに応じて100箇所程度の水素供給インフラの先行整備を目指すこと等が示された。

欧米においても、国家レベルで基礎研究から技術開発、実証研究の取り組みが行われ、さらに、我が国同様に2015年以降からのFCV及び水素供給インフラの一般普及を目指している等我が国の国際競争力強化の観点から引き続き戦略的・重点的な取り組みが不可欠である。

このような環境の下、2020年以降の燃料電池自動車(FCV)及び水素供給インフラの本格普及に向け、FCV及び水素ステーション用低コスト機器・部品等の研究開発を行い、一連の機器及びシステムのコスト低減、FCVの普及展開及び国際競争力確保に資するため、研究開発を実施する。

現状では蓄圧器市場の大部分を占めている、アルミ合金ライナーに炭素繊維強化プラスチック(CFRP)をフルラップしたタイプ3容器においては、アルミ合金ライナーの疲労強度を確保するため、CFRPをライナーの分担する荷重を低減させる補助的役割でしか使用しておらず、結果としてCFRPを余剰に巻いて、CFRP自体としては破断強度の数分の1の低負荷で使用せざるを得ない状況となっている。素材のコストを勘案すれば、蓄圧器のコストダウンには余剰CFRPを減らすことが最も効果的である。CFRPの強度をフルに活用することでその使用量を低減でき、低コスト化が可能であると考えられる。その効果が顕著に現れるのが、炭素繊維強度により支配される容器の破裂強度の確保が設計要件となるタイプ4容器である。炭素繊維の強度をフルに活用するためには、炭素繊維への負荷の偏りをできるだけ小さくすることが有効である。本研究開発では、炭素繊維への負荷の偏りを小さくすることが可能な多給糸フィラメントワインディング製造技術を活用し、炭素繊維使用量を大幅に低減した革新的なタイプ4容器の開発を実施する。その最適設計の探索にあたっては、「京」に代表される超並列計算技術が必須である。最適設計を実施するための容器モデル化においては、炭素繊維束と樹脂を明確に区分するメゾスケールモデルを基軸とし、実験的手法の限界を大規模シミュレーションにより打開する。この方法論に基づけば、炭素繊維束の交差による応力集中を的確に評価できるので、ワインディング経路や繊維束寸法および繊維束剛性などのメゾスケールパラメータが容器破裂強度を律則する程度を定量的に評価でき、多給糸フィラメントワインディングの効果を定量的に示すことが可能になり、ひいてはそれらを設計変数

とした高度な最適設計が可能となる。本研究開発では、その最適設計の実現可能性を検証し、超軽量タイプ4蓄圧器を具現化するために、東京大学、村田機械株式会社、帝人株式会社の3者により以下の研究開発を実施する。

[詳 細]

①「メゾスケールシミュレーションに基づく最適設計手法の開発」(担当:東京大学)

1)メゾスケールモデル作成技術の開発

過去のプロジェクトにて開発済みの、単給糸によるヘリカル巻きおよびフープ巻きの経路を忠実にたどり、炭素繊維束と樹脂を明確に区分した三次元有限要素モデルを作成するソフトウェアである FrontCOMP_mold を、多給糸フィラメントワインディング技術に対応可能のように改良し、有限要素シミュレーションによる効果検証を可能にする。

2)強度予測技術の開発

多給糸フィラメントワインディング技術により試作された小型容器の破裂試験およびサイクル試験結果と、有限要素シミュレーション結果と照合することにより、破裂強度クライテリアは繊維ひずみにより、サイクル強度クライテリアは繊維間樹脂の応力により与えられることを検証する。この検証を通じて、改良された FrontCOMP_mold と、こちらも過去のプロジェクトにて開発済みの強度評価シミュレーションソフトウェア FrontCOMP_damage を連動させたシステムを構築し、多給糸フィラメントワインディング手法による容器設計向けの強度評価ディファクトツールとする。

3)メゾスケールパラメータを設計変数とする最適化アルゴリズムの開発

多給糸フィラメントワインディング技術を利用した最適設計を探索するアルゴリズムを開発する。設計パラメータは、繊維束の寸法、多給糸での繊維束種の組み合わせ方法、フィラメントワインディングの経路、鏡部の形等とする。

②「多給糸フィラメントワインディング技術の開発」(担当:村田機械, 帝人)

1)多給糸フィラメントワインディング装置の技術課題の抽出

実蓄圧器を想定して、外径 200 mm クラスの容器について、1ストロークで全体をカバーする多給糸ヘリカル巻き技術の要件を精査する。有限要素シミュレーションにより探索された最適設計は離散的な点の集まり(デジタルデータ)として与えられるので、最適設計を実現するための最適な機械の制御パラメータの設定方法およびデジタルデータから制御パラメータへの変換方法を検討する。

2)最適設計を実現するワインディング技術の開発

メゾスケールシミュレーションにより探索された最適設計で設計変数としている繊維束の寸法、多給糸での繊維束種の組み合わせ方法、フィラメントワインディングの経路、鏡部の形等に対応できるワインディング技術の要件を検討する。ワインディングの進行により発生する滑りや繊維束の断面形状の変化および逐次変化する表面形状に対応する制御技術の要件を検討する。

3)製造誤差低減技術の開発

製造誤差に関する制約を満足させる多給糸フィラメントワインディング制御技術を開発する。

③「多給糸フィラメントワインディングにより製造された容器の製造誤差評価技術の開発」(担当: 帝人)

1) タイプ3小型試験体容器の破裂試験を通じた製造誤差要因の調査

単給糸フィラメントワインディングおよび多給糸フィラメントワインディングにより製造された内容積 10L クラスのタイプ3小型試験体容器の破裂試験により、メソスケールモデルの観点からの誤差要因の調査を行う。

2) タイプ3試作容器を用いた製造誤差評価手法の開発

多給糸フィラメントワインディング技術により試作された、常用圧力 45MPa、内容積 50L クラスのタイプ3容器の破裂試験・サイクル試験を実施し、製造誤差の要因を明らかにし、製造誤差と容器強度の相関を記述するための誤差モデル化技術を開発する。

3) タイプ4最適設計容器を用いた製造誤差評価手法の検証

有限要素シミュレーションにより探索された最適設計に基づき作製された常用圧力 45MPa、内容積 50L クラスのタイプ4容器の破裂試験・サイクル試験を実施し、開発した製造誤差手法を検証する。製造誤差と破裂強度およびサイクル寿命の相関から、強度を保証するための製造管理方法を検討する。

④「多給糸フィラメントワインディング製法による最適設計容器の実証」(担当: 東京大学, 村田機械, 帝人)

1) 多給糸フィラメントワインディング製造装置の製作

製造装置の基本設計を検討し多給糸フィラメントワインディング装置を作製する。

2) タイプ3容器の試作

最適設計手法と製造誤差評価手法の検証のため、常用圧力 45MPa、内容積 50L クラスのタイプ3容器を試作し、多給糸フィラメントワインディング装置の性能を確認する。

3) タイプ4最適設計容器の製作

開発した最適設計手法および誤差管理手法により設計された常用圧力 45MPa、内容積 50L クラスのタイプ4容器を試作し多給糸フィラメントワインディング製造技術を確立するとともに、10 万回以上の 0 - 45 MPa 圧力サイクルテストに耐える長期信頼性を確保し、かつ既往の単給糸フィラメントワインディング製法による容器に比して十分な軽量化(炭素繊維の削減)が可能であることを実証する。

(2) 他研究機関との連携

国立研究開発法人理化学研究所

上記(1)に記載された文部科学省『「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』はスーパーコンピュータ「京」の次のスーパーコンピュータであるポスト「京」の開発プロジェクト「フラッグシップ 2020 プロジェクト」の一環として実施されているア

アプリケーションプログラムの研究開発プロジェクトである。「フラッグシップ 2020 プロジェクト」全体の目標は、社会的・科学的課題を解決することができるアプリケーションプログラムにおいて、「京」の 100 倍の実行性能を達成することである。この目標を達成するために、各重点課題がそれぞれ一つのターゲットアプリケーションプログラムを選定し、ポスト「京」の開発主体である国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構と連携して、計算機システム(ハードウェア)の研究開発とアプリケーションプログラムの研究開発を協調して推進している。当センターが課題責任者を担当している、重点課題⑧「近未来型のづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」に関しては、準直接計算に基づく汎用大規模乱流解析プログラム FrontFlow/blue(通称, FFB)がターゲットアプリケーションとして選定されている。平成 28 年度は、コデザインにより決定されたポスト「京」においてターゲットアプリケーションの性能を最大化するように、さらなる最適化やアルゴリズムの改良を続けるとともに、重点課題⑧における主要なアプリケーションプログラムである、国立大学法人神戸大学、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構、国立大学法人東京大学大学院新領域創成科学研究科等と連携し開発している CUBE(サブ課題 B)、UPACS-Lite(サブ課題 D)、FrontISTR(サブ課題 E, サブ課題 F)に対してターゲットアプリケーションのコデザインの成果を展開した。以下、ターゲットアプリケーション FFB に対して得られた主要な成果を記す。

<FrontFlow/blue>

FFB はいわゆるメモリバンド幅律速の計算プログラムであるため、コデザインにあたってはポスト「京」のメモリ性能を最大限発揮できるようにプログラムの最適化を進めた。具体的には FFB の 4 本のホット・カーネルを中心としてポスト「京」のメモリ性能を最大限発揮できるように最適化を進めるとともに、内 1 本のカーネルに対して計算のループ構成を変更することにより、約 1.8 倍、プログラム全体で約 1.5 倍の高速化を達成した。また、さらなる高速化を実現するために計算アルゴリズムの抜本的な改良を進め、約 4.9 倍の高速化を達成できる目途が得られた。これは予測値であるが、現在はポスト「京」のコンパイラならびにシミュレータを用いて FFB の実行性能を評価するとともに、前記の他の主要なアプリケーションプログラムに対してもポスト「京」向けに最適化を進めている。

(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」

シミュレーションソフトウェアの利用者と開発者への系統的な教育は、我が国が本分野を拡大・発展する人材を継続的に創出するための根幹である。本センターでは、センターならではの特色をもった利用者・開発者教育を展開している。本項では本学大学院における開発者教育の取り組みを報告する。

科学技術や先端産業を牽引する新しい基盤として、計算科学分野のさらなる進展に大きな期待が寄せられている。計算機システムの能力向上は日進月歩であるが、計算科学ソフトウェア(本項ではシミュレーションソフトウェアと呼ぶ)の開発教育は極めて少ない。これに対応するためには、高速なシミュレーションソフトウェアの構築には計算機工学に基づく HPC 教育が、数万～数 10 万ラインにもおよぶソフトウェアの開発には複数人によるソフトウェア工学に基づくチーム開発の訓練が必須である。様々な計算機構成で性能を出したり新規研究アイデアの参入を許容したりするコードと、分かり易く保守管理が容

易で移植性・拡張性の高いコードを両立させるための基本技術教育といってもよい。

残念なことに、高度に発達するソフトウェア工学の成果を、先端的な機能を持つシミュレーションソフトウェア開発の現場へ適切に消化・展開する担い手がないため、大学院教育においてはますます 2 極分化が顕在化している。過去にその役割を果たしてきたソフトウェア業界も弱体化を余儀なくされている。そこで、本センターでは大学・研究機関・産業界との間の積極的な連携による、独自の開発者教育に取り組んだ。

本教育活動は、先端ソフト開発人材の育成を目的とした教育を新たに構築し、東大大学院工学系研究科の演習講義として推進するというものである。2009 年度冬学期に試験的に導入し、2010 年度から夏学期に移行して本格始動させ、2016 年度現在 8 年目を迎えた。演習講義内容は、「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」、「東大情報基盤センターFX10 システムの利用」である。本教育活動全体の年間を通しての実施項目は、演習内容の構築、演習を行う環境の構築、ドキュメント作成、大学院演習講義、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、本教育活動を毎年ブラッシュアップしている。受講者は、例年様々な専攻から受講があり、2016 年度までに延べ 100 名以上の受講生を輩出した。

本教育活動と同時進行で、これまでに得られた経験・成果を全国的に展開すべく、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)、さらに応用編「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。これらは、それぞれ本演習講義の教科書、参考書として利用している。

なお、本教育活動(「非情報系学生を対象としたソフトウェア開発演習の設計と継続的改善」: 居駒幹夫, 高橋英男, 西村勝彦, 平野敏行, 恒川直樹, 佐藤文俊)は ISECON2016 において優秀賞が授与された。

以上の活動により、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構築に成功した。

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.
- ・居駒幹夫, 高橋英男, 西村勝彦, 平野敏行, 恒川直樹, 佐藤文俊, “非情報系の学生を対象としたソフトウェア開発演習の設計と改善”, 2016 日本情報処理学会 第 137 回情報システムと社会環境研究発表会, 2016 年 8 月.
- ・佐藤文俊, 居駒幹夫, “2016 年度「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.18, No.5, 2016 年 9 月.
- ・ISECON(情報システム教育コンテスト)2016 については、以下を参照：
<http://miyagawa.si.aoyama.ac.jp/wiki/isecon2016>

2) HPC 産業利用スクール

HPC 産業応用サマースクール 16

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：2016 年 10 月 14 日(金)～15 日(土)

場 所：クリアビューホテル

主 催：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

協 力：(株)SPH 研究所, 東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, 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

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』

第 2 回ポスト「京」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」シンポジウム

2 年間の調査研究・準備研究フェーズに実施した研究開発計画を紹介するとともに、今年度より開始した本格研究フェーズの最新の成果を紹介した。ポスト「京」を駆使することによって開ける新しい可能性を広く議論することにより、課題の成果目標を、よりニーズに合った期待度の高いものにすることを狙いとして開催した。

開催日：平成 29 年 3 月 17 日(金) 10:00～17:30

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革新的シミュレーション研究センター

共 催：東京大学生産技術研究所

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：可視化情報学会，自動車技術会情報処理学会，ターボ機械協会，
日本応用数理学会，日本ガスタービン学会，日本機械学会，日本計算工学会，
日本航空宇宙学会，日本シミュレーション学会，日本船舶海洋工学会，
日本流体力学会(50 音順)

参加者数：272 名

資料作成：予稿集 104 頁

○プログラム

司会 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授 高木亮治

開会の挨拶

工藤 雄之 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

小林 広明 重点課題⑧諮問委員長/東北大学教授

安井 宏 公益財団法人計算科学振興財団 専務理事

招待講演

「スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協)活動状況の紹介～シミュレーションの更なる産業利活用に向けて～」

金澤 宏幸 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 産業シミュレーション・ロードマップ
TF 主査(富士通株式会社 テクニカルコンピューティングソリューション事業本部
TC フロンティアセンター マネージャー)

重点課題⑧ 全体概要

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・教授/課題⑧責任者

次世代最適化・高速化技術開発戦略

(サブ課題 A) 設計を革新する多目的設計探査・高速計算技術の研究開発

「設計を革新する多目的設計探査の研究開発」

大山 聖 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授

「キャパシティコンピューティングの実現に向けた要素技術開発」

小野 謙二 九州大学 情報基盤研究開発センター 教授

司会 九州大学 情報基盤研究開発センター 教授 小野謙二

(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

「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～システムの概要と開発の現状について～」

坪倉 誠 神戸大学 教授

「Honda におけるポスト「京」を活用した自動車統合設計システムへの期待」

寺村 実 株式会社本田技術研究所 四輪 R&D センター 第 11 技術開発室 第 5 ブロック
主任研究員

(サブ課題 C) 準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの研究開発

「(サブ課題 C) 準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの研究開発」

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・教授/課題
⑧責任者

「準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの研究開発～（一社）ターボ機械協会「HPC 実用化分科会」での取り組み～」

後藤 彰 株式会社荏原製作所 理事/風水力機械カンパニー 企画管理技術統括
技術開発統括部 部長

(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

「(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」

高木 亮治 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授

「航空機開発における大規模 CFD のメリットとポスト「京」への期待」

竹中 啓三 三菱重工業株式会社 総合研究所 流体研究部 空力研究室 室長

司会 東京大学生産技術研究所 特任教授 畑田敏夫

(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

「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— 要素技術の開発状況 および ターゲット問題 —」

奥田 洋司 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授

「成形・溶接シミュレータの高度化を期待する新材料としての鉄鋼材料」

樋渡 俊二 新日鐵住金株式会社 技術開発本部 鉄鋼研究所 利用技術研究部 部長

(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

「FrontCOMP_TP を基軸とした熱可塑 CFRP 製品開発の高度化」

吉川 暢宏 東京大学生産技術研究所 教授

「航空機用エンジンにおける複合材部品の適用について」

穂坂 俊彦 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 主査

【パネルディスカッション】「重点課題の狙いとその実用化に向けた課題」

司 会: 高木 亮治 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授

パネリスト: 吉村 忍 東京大学大学院工学系研究科 副研究科長・教授/課題⑥責任者

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・教授/
課題⑧責任者

竹中 啓三 三菱重工業株式会社 総合研究所 流体研究部 空力研究室 室長

寺村 実 株式会社本田技術研究所 四輪 R&D センター 第 11 技術開発室 第 5
ブロック 主任研究員

樋渡 俊二 新日鐵住金株式会社 技術開発本部 鉄鋼研究所 利用技術研究部 部
長

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・教授/
課題⑧責任者

第 32 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 ―数値計算による熱流体现象の理解、予測、制御―」

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 32 回目となり、基礎から応用まで理工学の広い分野から 10 件の講演を行った。

開 催 日:平成 29 年 3 月 22 日(水) 9:45～17:20

場 所:東京大学生産技術研究所 大会議室 (An301)

主 催:東京大学生産技術研究所 TSFD グループ

参加者数:42 名

○プログラム

9:45 開会のご挨拶 長谷川洋介(東大生研)

9:50～11:50 セッション 1 司会 長谷川洋介(東大生研)

招待講演 “Hierarchical Wavelet-based Modeling of Turbulent Flows”

Prof. Oleg V. Vasilyev (Center for Design, Manufacturing and Materials at Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia)

Energy Transfer Rates in Turbulent Channels with Drag Reduction at Constant Power Input

Davide Gatti (東大生研, Karlsruhe Institute of Technology), Bettina Frohnafel (Karlsruhe Institute of Technology), 長谷川洋介(東大生研), Andera Cimorelli (Universita degli Studi di Modena e Reggio Emilia), Maurizio Quadrio (Polytechnique Milano)

固気液三相流解析のための MPS-MAC 法カップリング手法の開発

高橋亮平, 守裕也, 福島直哉, 山本誠(東京理科大学)

13:30～15:30 セッション 2 司会 北澤大輔(東大生研)

四輪ミラー空.力騒.音の数値予測とその評価

吉野崇, 安保慧, 森下和也, 寺村実(本田技術研究所)

非一様な土地利用が大気接地層の抗力係数へ及ぼす影響

中尾圭佑, 服部康男(電力中央研究所)

スカラー混合を伴う平面乱流噴流の Implicit Large-Eddy Simulation

松山新吾(宇宙航空研究開発機構)

随伴解析に基づく熱流動乱流場における複雑伝熱面形状最適化

亀谷幸憲, 長谷川洋介(東大生研)

15:50～17:20 セッション 3 司会 大岡龍三(東大生研)

準第一原理計算に基づく壁モデル構築への試み

鵜沢憲, 加藤千幸(東大生研)

A Structure-based Model for the Transport of Scalars in Homogeneous Turbulent Flows

Konstantinos Panagiotou (東大生研), Stavros Kassinos (Univ. Cyprus), 長谷川洋介(東大生研)
円管内旋回乱流におけるレイノルズ応力の履歴効果

半場藤弘(東大生研)

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 40 回 LES 研究会

日時 2016 年 5 月 10 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)

「キャビティ空間における汚染物質濃度変動に関する高解像度 LES」

菊本 英紀(東京大学)

「ポンプ吸込み水槽の吸込渦の起源および発生メカニズム」

山出 吉伸(みずほ情報総研)

第 41 回 LES 研究会

日時 2016 年 7 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 5 (As313)

「空間フィルタリング・リスケーリング手法による WRF-LES 解析結果への高周波風速変動成分の付加」

河合 英徳(東京工業大学)

「埋め込み境界法に基づく壁法則併用型 LES 壁面モデル」

鵜沢 憲(東京大学)

第 42 回 LES 研究会

日時 2016 年 9 月 20 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)

「トンネル内走行時の高速列車に生じる変動空気力を解明するための LES」

中出 孝次(鉄道総合技術研究所)

「HDD 内乱流の LES と複雑乱流のテストケースについて」

小尾 晋之介(慶應義塾大学)

第 43 回 LES 研究会

日時 2016 年 11 月 11 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)

「壁面一様吹出し／吸込みの空間発達乱流境界層への影響」

亀谷 幸憲(東大生研)

「乱流フラックスのコレスキー分解によるスカラー変動を含む変動風生成法の開発」

大風 翼(東京工業大学)

第 44 回 LES 研究会

日時 2017 年 1 月 10 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)

「T 型流路内における乱流温度混合の数値解析に関する研究」

服部 博文(名古屋工業大学)

「様々なヘリシティを通して構造効果を組み入れたサブグリッド・スケール・モデリング」

横井 喜充(東大生研)

c) セミナー・講習会

第 7 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 28 年 7 月 1 日(金) 9:30-17:25

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： 20 名

第 7 回 PHASE/0 利用講習会:基礎編

電子状態計算(バンド計算)に初めて取り組む方を対象に、講義と実習を組み合わせ、理解しやすいように工夫したプログラムを用意した、通算 7 回目の基礎編の利用講習会を開催した。

開催日： 平成 29 年 3 月 1 日(水) 10:00-17:00

場所： 東京大学生産技術研究所 As 棟中セミナー室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

d) 共催・後援・その他

KOBE HPC Summer School 2016

開催日： 平成 28 年 8 月 1 日(月) ～ 8 月 5 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： 神戸大学計算科学教育センター，
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，兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科
公益財団法人計算科学振興財団

KOBE HPC Spring School 2017

開催日： 平成 29 年 3 月 13 日(月) ～ 3 月 15 日(水)
場 所： 神戸大学計算科学教育センター セミナー室 208
主 催： 戸大学計算科学教育センター，
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，兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科
公益財団法人計算科学振興財団

第 7 回 AICS 国際シンポジウム

開催日： 平成 29 年 2 月 23 日(木)～24 日(金)
場 所： 神戸大学 先端融合研究環境統合研究拠点コンベンションホール
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 2016

開催日： 平成 28 年 11 月 2 日(水)
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
PHASE システム研究会，特定非営利活動法人 物質材料科学ソフトウェア研究会
高効率電子デバイス材料研究コンソーシアム

第 27 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 28 年 4 月 22 日(金)
場 所： 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 4
主 催： FrontISTR 研究会

第 28 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 28 年 6 月 10 日(金)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 84 講義室
主 催： FrontISTR 研究会

第 29 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 28 年 7 月 22 日(金)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 83 講義室
主 催： FrontISTR 研究会

第 30 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 28 年 9 月 16 日(金)
場 所： 東京大学柏キャンパス環境棟 2 階講義室 2
主 催： FrontISTR 研究会

第 31 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 28 年 10 月 17 日(月)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 84 講義室
主 催： FrontISTR 研究会

第 32 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 28 年 11 月 28 日(月)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 84 講義室
主 催： FrontISTR 研究会

第 33 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 29 年 1 月 30 日(月)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 84 講義室
主 催： FrontISTR 研究会

第 34 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 29 年 2 月 27 日(月)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 83 講義室
主 催： FrontISTR 研究会

第 6 回 HPC ものづくりワークショップ

開催日： 平成 28 年 6 月 8 日(水) 13:30～17:15
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 7 回 HPC ものづくりワークショップ

開 催 日： 平成 29 年 2 月 13 日(月) 13:30～17:30

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 9 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

産業応用の拡がり ～身近になったスーパーコンピューティング技術～

開 催 日： 平成 28 年 12 月 21 日(水) 13:00～17:35

場 所： イイノカンファレンスセンター RoomA

主 催： スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

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 2016

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、センターの PV や HPCI 戦略プログラム分野4の成果を映し、パネル展示では革新的シミュレーションデモンストラ神戸拠点の活動紹介とポスト「京」重点課題⑧の実施概要の展示、ならびにパンフレットの配布を行った。

開催日： 平成 28 年 9 月 8 日(木)・9 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

重点課題⑧のプロジェクトを推進する代表機関として「科学の広場」に出展し、プロジェクトの紹介として、流体に関するミニ実験や研究成果のパネル展示、ならびにパンフレットの配布を行った。

開催日： 平成 28 年 11 月 5 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 3 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 28 年 10 月 21 日(金)

場 所： コクヨホール

SC16

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、zSpace 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28年11月13日(日)～18日(金)

場 所：米国 ユタ州ソルトレイクシティー ソルトパレスコンベンションセンター

第9回トップセミナー ～ビジネスチャンスを生み出し産業の未来を拓くスーパーコンピュータ～

本センターの活動の紹介を行うため、スライドの展示を行った。

開催日：平成29年1月25日(水)

場 所：神戸商工会議所 神商ホール

見える化シンポジウム2017 ～シミュレーションの価値

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、zSpaceによる計算成果の展示、研究成果のポスター展示を行った。

開催日：平成29年3月11日(土)

場 所：東京・日本橋ライフサイエンスハブ

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. 23号、Vol. 24号を発行した。

(1) Vol. 23号

発行日：平成28年6月

発行部数：1,000部

内容：1面	巻頭言 「京」の成果の総括、今後の実用化を加速
2面～3面	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— 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. 24号

発行日：平成29年3月

発行部数：1,000部

内容：1面	巻頭言 ポスト「京」が運用される時代に向けたアプリケーションの開発を着実に推進
2面～3面	SC16 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) 「病気に潜む脳の異常(8) 脳動脈瘤 血管の形がコブの破裂に関係する 血流が滞る場所が

動脈硬化」平成 28 年 7 月 12 日(火), 日刊ゲンダイ(朝刊) 15 面

- (2) 「脳動脈瘤の破裂 新技術で防ぐ 薄膜ステント治験 大きな瘤の血流遮断 立体画像撮影 患者ごとの効果予測」平成 28 年 7 月 24 日(日), 日本経済新聞(朝刊) 14 面
- (3) 「東京大学生産技術研究所 中高生対象に飛行機ワークショップ 2016」平成 28 年 10 月 10 日(月), 文教ニュース第 2414 号 24 面
- (4) 「東大とコラボして、中高生向けワークショップを開催！」平成 28 年 12 月, JAL Skyward 2016 年 12 月号 19 ページ

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、大規模な熱・流体・音響解析のためのアルゴリズムやアプリケーションプログラムの研究開発、開発したプログラムや風洞実験を利用した、翼などの基本的物体まわりの非定常流れや発生する音との関係の解明、自動車、船舶、ターボ機械等の非定常流れや発生する音の予測と複雑な現象の解明、製品の性能や信頼性の向上を目指した研究を行っている。なお、以下の記載の一部は 3. センターの活動実績 (1) 大型研究プロジェクトの推進に記載した成果と重複するものである。

(1) 大規模な熱・流体・音響解析のためのアルゴリズムやアプリケーションプログラムの研究開発

スーパーコンピュータを利用した大規模な流体解析の実用化を加速するために、Large Eddy Simulation (LES) による汎用乱流解析プログラム、FrontFlow/blue (FFB) の高速化と機能強化を実施した。基本的なアルゴリズムのさらなる最適化により 1.5 倍の高速化を達成するとともに、複数のケースを同時に計算することによりメモリー利用効率の向上を図り 4.9 倍の高速化を達成した。今後は約 30 倍程度と見込まれる次世代 CPU の性能向上と合わせて、最終的に 100 倍の高速化を達成すべく研究開発を続ける。機能強化に関しては、FFB に圧縮性流れ解析機能を実装し、基礎的な流れ場に対して検証計算を実施し、妥当な結果を得た。また、実際の自動車のような複雑な形状の物体まわりの流れ解析のための計算格子を完全に自動で生成することを可能にするために、直交格子系と Lattice Boltzmann 法をベースにした新たな流体音響解析プログラム(仮称 FFX)の基本的なアルゴリズムの検討を行い、プロトタイププログラムを開発した。キャビティ流れなどの基本的な流れ場に対して検証計算を行い、妥当な結果を得た。

(2) 基本的な流れ場の数値計算や風洞実験に関する基礎研究

翼に流入する流れに変動があると、翼の揚力が大きく変動したり、翼から発生する騒音が大幅に増大したりすることが知られているが、特に、騒音が増大する理由に関してはいくつかの仮説はあるものの解明は進んでいない。そこで、単独翼の上流側に円柱を設置し、円柱から発生するカルマン渦が翼に衝突した場合の流れや騒音に関して、風洞実験と数値計算を用いて調査した。特に、円柱の直径や設置位置を変化させることにより、これらが音に与える影響について調査した。また、ファンや飛行機の翼(「よく」あるいは「つばさ」)の先端には翼端渦とよばれる渦が形成され、空力性能や騒音に大きな影響を及ぼすことが知られているが、翼端渦の非定常特性や発生する音との関係に関しては明らかになっていない点が多い。そこで、翼に対する流れの迎え角が時間的に変化する場合の、翼端を有する単独翼まわりの流れを数値計算し、翼端渦の挙動がどのように変化するかを調査した。さらに、大気境界層中の乱れや風上側に配置された風車の後流の影響を受ける大型風車まわりの流れを高精度に解析するために、単独翼まわりの流れの Detached Eddy Simulation (DES) を実施するとともに、風洞実験も行い基礎的な検証を行った。その結果、現状の DES モデルでも、翼まわりの境界層に関しては流れが層流である部分を除いて高精度な予測が可能であるが、後流の予測に関しては乱れの発達が遅れるために、乱れ強度や乱流拡散が過小評価されることが明らかとなった。

(3) 自動車・船舶・ターボ機械などに関する応用研究

【船舶】

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実施し、曳航水槽試験に取って代わり得る数値曳航水槽の実現を目指して研究開発を行っている。これまでに、船体まわりの乱流境界層中の主要な渦を全て直接計算することにより、水槽試験と同程度の誤差である1%以内の誤差により推進抵抗の予測が可能であることが明らかとなっていた。平成28年度は境界層の計算に加えて、自航試験に対応するプロペラ回転や造波抵抗の予測のための自由表面の解析を同時に行い、これらの同時計算を実現できる目途を得ることができた。

【自動車】

スーパーコンピュータ京を用いて、車両表面および床下における境界層の発達と側面や背面からはく離した流れによる渦の形成を高精度に捉えた解析を実現し、車両形状、渦の構造、車両表面の静圧、および、空気抵抗との因果関係を明らかにするための研究開発を継続的にを行っている。平成28年度は特に車両背面のスラント角および車両床下のディフューザ切り上げ角の変化が渦の構造や空気抵抗に与える影響を明らかにした。

【ターボ機械】

ボックスファンやプロペラファンのように比較的低圧のファンの製品開発においては空力性能を向上させることとともに、空力騒音の低減が重要な技術課題となっているが、空力騒音の定量的な予測は実現されていない。そこで、ボックスファン、プロペラファン、および多翼ファンを対象として、性能と騒音予測ベンチマークのための産学官連携のワークグループを設置した。千葉実験所の無響室に設置した負荷騒音試験装置を用いて、何種類かのボックスファンに対して性能・騒音の検証用データを取得した。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Takafumi Makihara, Takahiro Kitamura, Taro Yamashita, Kazuhiro Maeda, Chisachi Kato, Tsutomu Takayama, Kohei Yamamoto, Yoshinobu Yamade, Yasumasa Suzuki: Identification of Vortical Structure that Drastically Worsens Aerodynamic Drag on a 2-Box Vehicle using Large-scale Simulations, June 2016, SAE Int. J. Passeng. Cars - Mech. Syst. 9 (2): 2016, doi:10.4271/2016-01-1585.
- 2) Olivier Pacot, Chisachi Kato, Yang Guo, Yoshinobu Yamade, François Avellan: Large Eddy Simulation of the Rotating Stall in a Pump-Turbine Operated in Pumping Mode at a Part-Load Condition, Journal of Fluids Engineering Volume138(Issue11), 111102 (Jul 15, 2016) Paper No: FE-15-1803; doi: 10.1115/1.4033423.

国際会議予稿集

- 1) Takafumi Makihara, Takahiro Kitamura, Taro Yamashita, Kazuhiro Maeda, Chisachi Kato, Tsutomu Takayama, Kohei Yamamoto, Yoshinobu Yamade, Yasumasa Suzuki: Identification of Vortical Structure that Drastically Worsens Aerodynamic Drag on a 2-Box Vehicle using Large-scale Simulations, April 2016, SAE 2016 World Congress and Exhibition, April 12-14, 2016, Cobo Center, Detroit, Michigan, USA.
- 2) Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato, Shinobu Yoshimura, Akiyoshi Iida, Keiichiro Iida, Kunizo Onda, Yoshimitsu Hashizume, Yang Gou: Prediction of Aeroacoustical Interior Noise of a Car, Part-1 Prediction of Pressure Fluctuations on External Surfaces of a Car, April 2016, SAE 2016 World Congress and Exhibition, April 12-14, 2016, Cobo Center, Detroit, Michigan, USA.
- 3) Keiichiro Iida, Kunizo Onda, Akiyoshi Iida, Chisachi Kato, Shinobu Yoshimura, Yoshinobu Yamade, Yoshimitsu Hashizume, Yang Guo: Prediction of Aeroacoustical Interior Noise of a Car, Part-2 Structural and Acoustical Analyses, April 2016, SAE 2016 World Congress and Exhibition, April 12-14, 2016, Cobo Center, Detroit, Michigan, USA.

学会講演論文

- 1) 飯島直輝, 鈴木康方, 岡部淳司, 加藤拓海, 松田大輔, 小林典彰, 加藤千幸: 流入乱れが翼周りと翼騒音へ及ぼす影響の解明, 2016年11月, 日本機械学会第94期流体力学部門講演会, (山口大学).
- 2) 小林典彰, 飯島直輝, 鈴木康方, 西村勝彦, 加藤千幸: カルマン渦が干渉する場合の翼騒音特性, 2016年11月, 日本機械学会第94期流体力学部門講演会, (山口大学).

総説・解説

- 1) 加藤千幸: IDCAEのための流体力学の基礎的事項(流れの重要な性質と乱流の基礎) Fundamental Principles of Fluid Mechanics for 1-D CAE (Essential Properties of Fluid Flows and Basic Understanding on Turbulence), 設計工学第51巻第6号(2016年6月), pp. 381-388.

(2) 研究プロジェクト

民間等との共同研究

- 1) 「空気抵抗を大幅に低減する車両周りの流れ構造解明」
- 2) 「CFD による船舶性能推定精度向上に関する研究」
- 3) 「バイオミメティクスによる材料高機能化」
- 4) 「流体機械実機の評価を目的とした、変動流れ場の高度評価手法開発」
- 5) 「遠心ポンプの部分流量域における内部流れの研究1」

受託研究

① 公的資金

- 1) 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

吉川暢宏研究室 マルチスケール固体力学

炭素繊維強化プラスチック(CFRP)の実用化には多大な労力と時間を必要とする。ボーイング 787 の開発には、素材メーカーである東レも巻き込んだ 20 年の期間を要した。ロールスロイスは CFRP 製ジェットエンジンファンブレードの開発に失敗し、あわや会社消滅の危機にさらされた。これまでの CFRP 製品開発の歴史は、試作と破壊試験を繰り返す試行錯誤の積み重ねであった。その状況を一変させるべく、「京」に代表される大規模並列計算の援用による CFRP 製品の設計合理化を目標に、シミュレーションソフトウェアの開発と強度評価問題への活用を中核として、以下の研究開発を実施している。

(1) 複合材料強度信頼性評価シミュレータの開発

炭素繊維と樹脂、あるいは繊維束と樹脂を明確に区分して、形状と配置を正確に表現する、ミクロスケールあるいは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、シミュレーションソフトウェアの開発を行っている。炭素繊維単体の破壊則と樹脂単体の非線形挙動および破壊則を独立に導入できるため、実態を正確に表す材料モデル化が可能になる。強度に影響を与える因子を特定し定量化できることで、試作と破壊を繰り返す試行錯誤的設計に陥っている現状を打開できる。本年度は特に短繊維 CFRP の強度評価に関する検討を進めた。

(2) 超高圧水素容器の開発

燃料電池自動車普及を下支えする、水素燃料タンクや水素スタンド用蓄圧器の開発において、強度信頼性を確保したうえで炭素繊維の軽量を図る最適設計を実現するため、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。またマクロスケールベースの容器解析ソフトウェアも開発し、ライナーの疲労強度が主たる破壊モードとなる Type3 容器に対しては有効な解析ツールとなることを実証した。

(3) 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。ミクロスケールモデルに関して、樹脂単体の構成則にひずみ速度依存性を導入する手法の検討を行った。実部品の解析は、直交異方性体モデルで行うとの想定で、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。

(4) 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、熱硬化および熱可塑 CFRP の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、樹脂の熱特性を直接的に導入でき、製造プロセス後の残留応力・ひずみ値を精度よく評価できることを示した。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Yoshihiko Hangai, Kousuke Zushida, Osamu Kuwazuru and Nobuhiro Yoshikawa: Functionally graded Al foam fabricated by sintering and dissolution process with remaining spacers, April 2016, Materials Transactions, Vol. 57, pp. 748-750.
- 2) Yoshihiko Hangai, Tomoaki Morita, Shinji Koyama, Osamu Kuwazuru and Nobuhiro Yoshikawa: Functionally graded aluminum foam fabricated by friction powder sintering process with traversing tool, September 2016, Journal of Materials Engineering and Performance, Vol. 25, Issue9, pp. 3691-3696.
- 3) Takao UTSUNOMIYA, Yoshihiko HANGAI, Naoyuki KUBOTA, Osamu KUWAZURU and Nobuhiro YOSHIKAWA: Plateau stress estimation of impact compression test on aluminum foam using X-ray computed tomography observation, December 2016, Bulletin of the JSME, Mechanical Engineering Journal, Vol.3, No.6, DOI: 10.1299/mej.16-00149.
- 4) Yoshihiko Hangai, Yukiko Nakano, Takao Utsunomiya, Osamu Kuwazuru and Nobuhiro Yoshikawa: Drop Weight Impact Behavior of Al-Si-Cu Alloy Foam-Filled Thin-Walled Stress Pipe Fabricated by Friction Stir Back Extrusion, February 2017, Journal of Materials Engineering and Performance, ASM International, Vol.26(2), pp.894-900.

和文論文

- 1) 半谷禎彦, 中野ゆき子, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: 板材から作製した薄肉アルミニウムパイプを用いたポーラスアルミニウム充填パイプ, 2016 年 6 月, 日本金属学会誌, Vol. 80, No. 6, pp. 386-389.
- 2) 半谷禎彦, 石原綾乃, 宇都宮登雄, 桑水流理, 吉川暢宏: 気孔率を変化させた 2 層構造ポーラスアルミニウムの摩擦粉末焼結法による作製とその圧縮特性, 2016 年 6 月, 日本金属学会誌, Vol.80, No.6, pp.390-393.
- 3) 半谷禎彦, 中野ゆき子, 宇都宮登雄, 桑水流理, 北原総一郎, 吉川暢宏: ポーラスアルミニウム充填パイプへのスリット導入による変形制御の検討, 2016 年 11 月, 日本金属学会誌, Vol. 80, No.11, pp. 707-712.

- 4) キムサンウォン, 吉川暢宏, 東條千太, 鈴木純三: TYPEⅢ蓄圧器のドーム部形状最適化, 2017 年 1 月, 圧力技術, 第 55 巻, 第 1 号, pp.3-11.

国際会議アブストラクト

- 1) Yoshinori Shiuhara, Shoki Tanaka and Nobuhiro Yoshikawa: Peridynamic simulation of interface fracture between carbon fiber and resin, September 2016, APCFS2016, The 10th Asian-Pacific Conference on Fracture and Strength, pp. 355-356.
- 2) Shinichiro Takemoto and Nobuhiro Yoshikawa: Fracture Evaluation using Mesoscale Model for Filament Wound CFRP Structure, September 2016, APCFS2016, The 10th Asian-Pacific Conference on Fracture and Strength, pp. 363-364.
- 3) Nobuhiro Yoshikawa and Kohta Hariya: Geometry-based Algorithm for Evaluating Strain Distribution in Carbon Fiber-reinforce Plastic Pressure Vessel, September 2016, APCFS2016, The 10th Asian-Pacific Conference on Fracture and Strength, pp. 365-366.

学会講演論文

- 1) 吉川暢宏: 炭素繊維強化プラスチック製高圧水素容器の開発, 2016 年 5 月, 日本高圧力技術協会平成 28 年度春季講演会概要集, pp.9-12.
- 2) 竹本真一郎, 宮原 護, 吉川暢宏: CFRP 容器ヘリカル層のメゾスケール強度解析, 2016 年 10 月, M&M2016 材料力学カンファレンス講演論文集, pp. 607-609.
- 3) 松田哲也, 村山 隼, 久保凱, 佐藤仁彦, 竹田 智, 福重進也, 吉川暢宏: マルチスケール有限要素解析に基づく CFRP 積層板の DCB 試験シミュレーション, 2017 年 3 月, 第 57 回航空原動機・宇宙推進講演会講演論文集, JSASS-2017-0098.
- 4) 横山卓矢, 吉川暢宏, 福重進也, 竹田 智, 松田哲也: 衝撃負荷を受ける CFRP 積層板の動的シミュレーション, 2017 年 3 月, 第 57 回航空原動機・宇宙推進講演会講演論文集, JSASS-2017-0099.

(2) 研究プロジェクト

民間等との共同研究

- 1) CFRP 構造体の強度評価に関する研究
- 2) 軽量ファンブレード衝撃解析技術の研究(その 2)
- 3) ポリエチレン管の動的強度モデルに関する研究

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「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」
- 3) (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」
- 4) (独)新エネルギー・産業技術総合開発機構「ミクロスケール強度規準に基づく熱可塑性 CFRP 部材の製造プロセス最適化基盤技術開発」

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が、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、長期被ばく線量の評価手法の開発、建物内のエネルギー使用シミュレーション手法の開発及び BIM データの再利用による最適建築設計支援手法の開発に取り組んだ。

(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。そのため、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。

(4) BIM データの再利用による最適建築設計支援手法の開発

近年、建築設計のデジタルエンジニアリング化を目指した3次元CADとオブジェクト指向データベースに基づくBuilding Information Modeling (BIM)の導入が本格的に検討され始めている一方で、その利用方法には議論が残る。BIMの利用が建築設計の効率化と高度化に寄与するためには、設計におけるフロントローディングの実現とBIMデータの再利用性の向上が鍵となる。本研究は、設計の初期

段階で実施するシミュレーションに利用するデフォルト設定を、これまでに蓄積された建物データベースから自動的に構築・最適化し、フロントローディングによる設計の効率化と建築性能の向上に寄与するシステムを提案する。このデフォルト設定は、設計事務所等で蓄積された既存の建築設計データベースを基に生成する。このため、設計事務所毎、施主毎等々、設計目標・条件に合わせて自動的にその形態を最適化することを、その特徴とする。本システムは、フロントローディングに必要な設計初期段階のシミュレーションの精度向上と、BIM データの再利用を促進する効果を持ち、延いては BIM の普及に寄与することが期待できる。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Minsik Kim, Ryohji Ohba, Masamichi Oura, and Shinsuke Kato: Study on long-term radiation exposure analysis after the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant, May 2016, Journal of Nuclear Science and Technology, on-line issue, pp. 774-782.
- 2) Wanghee Cho, Shizuo Iwamoto, Shinsuke Kato: Condensation Risk Due to Variations in Airtightness and Thermal Insulation of an Office Building in Warm and Wet Climate: October 2016, Energies 2016, Vol. 9 Issue11, pp. 875.
- 3) Hideaki Nagano, Kenji Tomita, Yasuhiro Tanoue, Yuji Kobayashi, Itsuhei Kohri, Shinsuke Kato: Analysis of Defogging Pattern on Windshield and Ventilation Load Reduction based on Humidity Distribution Control, April 2016, SAE Technical Paper.
- 4) Beungyong Parka, Sihwan Lee, Shinsuke Kato: Technical feasibility study of a compact desiccant-based outdoor air system using cogenerated hot water, August 2016, Applied Thermal Engineering, Volume 106, pp. 968–980.
- 5) Sihwan Lee, Beungyong Park, Jeongil Kim, Shinsuke Kato: Evaluation of thermal characteristics on a multi-sheet-type radiant panel heating system, December 2016, Journal of Building Engineering, Volume 8, pp. 48–57.

和文論文

- 1) 沼中秀一, 高橋祐, 天野健太郎, 谷英明, 加藤信介, 高橋幹雄: 知的生産性向上を目指した執務空間における外部の自然環境の導入効果に関する実態調査(第 2 報)竣工後の継続的な主観的評価に関する分析と執務者のコミュニケーション行動と執務環境の関係に関する調査, 2016.4, 空気調和・衛生工学会論文集(229), 1-14.
- 2) 吉富透悟, 加藤信介, 張偉榮, 関根賢太郎, 佐藤大樹, 黄孝根: PMV の空間分布・時間変動特性に着目した従来型空調との比較 2016.5, 日本建築学会環境系論文集, Vol. 81 (2016) No. 723.
- 3) 沼中秀一, 高橋祐樹, 杉崎奈緒子, 菊池卓郎, 加藤信介, 天野健太郎, 谷英明, 高橋幹雄: コミュニケーション環境の最適化に向けた実態調査とシミュレーションによる評価, 2016.5, 日本建築学会環境系論文集, Vol. 81 (2016) No. 723.

ニケーションとタスクの実態調査の分析とインフォーマルコミュニケーションを予測する行動シミュレーションへの応用, 2016.7, 日本建築学会環境系論文集, Vol. 81 (2016) No. 725.

- 4) 菊本英紀, 大岡龍三, 加藤信介: 反転流れ場におけるトレーサー拡散に基づく環境汚染物質の発生源同定 2016.7, 日本建築学会環境系論文集, Vol. 81 (2016) No. 725.
- 5) 大森敏明, 加藤信介, 金敏植, 糠塚重裕: モンテカルロ法による放射線量の簡易計算法, 2016.9, 日本建築学会環境系論文集, Vol. 81 (2016) No. 727.
- 6) 沼中秀一, 高橋幹雄, 天野健太郎, 菊池卓郎, 西田恵, 谷英明, 安藤邦明, 高橋祐樹, 加藤信介, 前林隆宏, 足利誠: パーパス富士宮エコベストファームテクニカルセンターにおける知的生産性向上を目指した設計と検証, 2016.7, 空気調和衛生工学, 第 90 巻第 7 号.
- 7) 王立, 加藤信介, 張偉栄, 黄孝根, 佐藤大樹, 関根賢太郎: 空調機器の発停制御・性能変動を考慮した PMV の空間分布・時間変動特性の評価 内部発熱直接処理型空調における冷房期オフィス室内の温熱環境評価その 2, 2017.3, 日本建築学会環境系論文集, Vol. 82, No. 733, pp237-247.

国際会議予稿集

- 1) 王立, 加藤信介, 黄孝根, 張偉栄, 関根賢太郎, 佐藤大樹: 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 4) 空調システム発停温度幅が室内の PMV 空間分布、時間変動特性に与える影響の検討, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 2) 河原大輔, 加藤信介: 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 19) 住宅の気密性能を考慮した冬季の省エネ性能に関する検証, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 3) 二川智吏, 手塚純一, 加藤信介, 樋山恭助, 河原大輔, 李時桓, 佐々木博明, 柴田和朗: 木造建物の断熱性能診断の普及に向けた技術検証(その 3) 断熱診断システムの温度条件緩和の検証と改良, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 4) 加藤信介, 手塚純一, 二川智吏, 河原大輔: ダイナミック・ストレージ・システムを適用した住宅(その 1) 通気による熱回収壁体の断熱性能の仕様に関する検証, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 5) 黄孝根, 王立, 加藤信介, 関根賢太郎: オフィス空間における高発熱機器の熱負荷処理方法に関する検討, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 6) 呉元錫(東京大), 加藤信介: 等価温度によりエアコン気流にさらされる人体の温冷感効果に関する研究, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 7) 岩本静男, 趙旺熙, 河野仁志, 加藤信介: 業務用ビルを対象とした結露抑制のための設計・計画指針に関する研究第 1 報断熱性能の違いによる結露リスク評価, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 8) 柳宇, 加藤信介, 永野秀明: 外気中の微生物による室内への影響生菌からマイクロバイームまで, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 9) 光岡真知子, 柳宇, 藤井結那, 永野秀明, 井田寛, 加藤信介: 病院待合室におけるマイクロバイオ

ームの実態に関する調査研究第 1 報 室内・屋外の細菌叢, 2016.8, 日本建築学会大会.

- 10) 藤井結那(工学院大), 柳宇, 永野秀明, 井田寛, 加藤信介:病院待合室におけるマイクロバイームの実態に関する調査研究第 2 報細菌叢の解析結果, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 11) 畑中未来, 柳宇, 永野秀明, 加藤信介:学校環境におけるマイクロバイームの実態に関する調査研究第 1 報秋季における大学教室環境の測定結果, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 12) 瀬戸啓太, 柳宇, 永野秀明, 井沢圭, 鍵直樹, 大澤元毅, 金勲, 東賢一、加藤信介:オフィスビルにおけるマイクロバイームの実態の解明に関する研究第 1 報室内、屋外細の細菌叢, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 13) 井沢圭, 柳宇, 永野秀明, 鍵直樹, 大澤元毅, 金勲, 東賢一, 加藤信介:オフィスビルにおけるマイクロバイームの実態の解明に関する研究第 2 報 空調方式別の細菌叢の比較, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 14) 高橋雄大, 加藤信介, 柳宇, 永野秀明, 松野重夫:環境マイクロバイームのサンプリング手法の検討, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 15) 永野秀明, 加藤信介, 柳宇:行動シミュレーションによる感染リスク評価第 1 報建築計画および行動パターンが接触機会へ及ぼす影響, 2016.8, 日本建築学会大会.
- 16) 金敏植, 加藤信介, 大森敏明, 糠塚重裕:標準粉体を使った再飛散実験に関する研究(その 1), 2016.8, 日本建築学会大会.
- 17) 河野仁志, 生田紀夫, 関根賢太郎, 近藤武士, 湯澤秀樹, 小金井真, 岩本静男, 加藤信介:次世代空調システム実現に向けた「8 つのトライ」ー業務用ビル液冷空調システムの開発ー, 2016.9, 公益社団法人空気調和衛生・工学会平成 28 年度大会.
- 18) 岩本静男, 趙旺熙, 河野仁志, 加藤信介, 寺西翔平:業務用ビルを対象とした結露抑制のための設計、計画指針に関する研究, 2016.9, 公益社団法人空気調和衛生・工学会平成 28 年度大会.
- 19) 呉元錫, 加藤信介:等価温度によるエアコンの直接気流が人体の温冷感に及ぼす影響に関する研究, 2016.9, 公益社団法人空気調和衛生・工学会平成 28 年度大会.
- 20) 王立, 加藤信介, 黄孝根:省エネルギーに最適化した空調方式の事務所ビルの室内空気質評価, 2016.9, 公益社団法人空気調和衛生・工学会平成 28 年度大会.
- 21) 千葉友樹, 加藤信介, 足利誠, 高橋幹雄, 沼中秀一, 高橋祐樹, 谷英明, 天野健太郎, 西田恵: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11報)執務者の自然換気行動と温熱環境の関連性の検討, 2016.9, 公益社団法人空気調和衛生・工学会平成 28 年度大会.
- 22) 沼中秀一, 加藤信介, 足利誠, 高橋幹雄, 黒木友裕, 天野健太郎, 菊池卓郎, 谷英明, 高橋祐樹: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 12 報)ウェアラブル端末

を用いた執務者の滞在場所、発話量の定量的評価, 2016.9, 公益社団法人空気調和衛生・工学会平成 28 年度大会.

- 23) 高橋祐樹, 加藤信介, 足利誠, 高橋幹雄, 沼中秀一, 黒木友裕, 天野健太郎, 菊池卓郎, 谷英明: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 13 報)ウェアラブル端末を用いた部署間コミュニケーションの定量的評価, 2016.9, 公益社団法人空気調和衛生・工学会平成 28 年度大会.

- 24) 高橋雄大, 加藤信介, 柳宇, 永野秀明:環境マイクロバイオームのサンプリング及び核酸抽出過程での菌数減衰の把握, 2016.9, 公益社団法人空気調和衛生・工学会平成 28 年度大会

総説・解説

- 1) 加藤信介:建築環境分野における CFD (ComputationalFluidDynamics) 技術の開発および活用, 2016.4, 建築雑誌.
- 2) 加藤信介:健全な競争による技術開発を可能にする性能検証, 建材試験センター8月号巻頭言.
- 3) 加藤信介:いざという時、頼りになるホスピタルエンジニアリングー感染対策としての紫外線殺菌の活用ー, 2016.10, 日本医療福祉設備学会.

(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・マイクロ流体工学

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。

(1) 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、3次元に時系列の 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。

(2) 全身循環を考慮したマルチスケール血流解析システムの開発

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(1D-0D)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1D-0D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。

(3) 予測医療のための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

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ケーススタディが有効と考えられる。迅速なケーススタディを実行するためには、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、1D-0D解析が3次元解析と比較して良いと考えられる。ここでは、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。

可視化を含めたポストプロセッシングにおいては、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。

(4) 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 1D-0D 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 1D-0D 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 Shear 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。

(5) 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。本手法を、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) 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).
- 2) Xiao-Bin Li, Masamichi Oishi, Tsukasa Matsuo, Marie Oshima, Feng-Chen Li, "Measurement of viscoelastic fluid flow in the curved microchannel using digital holographic microscope (DHM) and polarized camera", ASME Journal of Fluids Engineering, vol.138, Issue 9, doi: 10.1115/1.4033319 (2016).
- 3) Milan Toma, Marie Oshima, Shu Takagi, "Decomposition and parallelization of strongly coupled fluid-structure interaction linear subsystems based on the Q1/P0 discretization", Computers and

Structures vol. 173, pp. 84-94, doi:10.1016/j.compstruc.2016.06.001 (2016).

- 4) 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, vol. 44, No. 8, pp. 2351-2363, doi:10.1007/s10439-015-1544-8 (2016).
- 5) Soma Kita, Marie Oshima, Kazuo Shimazaki, Toshinori Iwai, Susumu Omura, Takashi Ono, "Computational fluid dynamic study of nasal respiratory function before and after bimaxillary orthognathic surgery with bone trimming at the inferior edge of the pyriform aperture", Journal of oral and maxillofacial surgery, DOI: 10.1016/j.joms.2016.06.171 (2016).

国際会議予稿集

- 1) M. Oishi, T. Matsuo, H. Kinoshita, T. Fujii, M. Oshima, "Three-dimensional measurement of micro- multiphase flow using digital holographic microscopy", Proceedings of the 18th International Symposium on the Application of Laser and Imaging Techniques to Fluid Mechanics (2016).

国際会議アブストラクト

- 1) Marie Oshima, Hao Zhang, Masaharu Kobayashi, Shigeki Yamada, Fuyou Liang, Shu Takagi, "Development of an integrated Multi-Scale Simulation System with Multi-model Data for Cerebral Circulation", 2016 Summer Biomechanics, Bioengineering and Biotransport Conference (SB3C) (2016).
- 2) Hao Zhang, Masaharu Kobayashi, Shigeki Yamada, Fuyou Liang, Shu Takagi, Marie Oshima, "Numerical study on CHS using 1D-0D model of the cardiovascular system", 12th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XII) and 6th Asia-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM VI) (2016).
- 3) Yoshiyuki Morita, Masamichi Oishi, Tsukasa Matsuo, Marie Oshima, "Phase Image-based Particle Tracking Velocimetry Using Digital Holographic Microscopy", Imaging and Applied Optics Optics Congress (OSA) (2016).
- 4) M. Oishi, T. Matsuo, H. Kinoshita, T. Fujii, M. Oshima, "Three-dimensional measurement of micro-multiphase flow using digital holographic microscopy", 18th International Symposium on the Application of Laser and Imaging Techniques to Fluid Mechanics (2016).
- 5) Masaharu Kobayashi, Masaaki Shojima, Katsuyuki Hoshina, Marie Oshima, "Development of an image-based modeling method to investigate the effects of vascular geometry on intracranial aneurysms", 13th International Intracranial Stent Meeting Interdisciplinary Cerebrovascular Symposium (ICS2016) (2016).

学会講演論文

- 1) 赤間祐介, 萱沼大, 矢内紫織, 平山貢大, 大島まり, 菅原基晃, 仁木清美, 「全身循環シミュレー

ションを用いた下肢の末梢血管抵抗変化時の上肢血圧の検討」, 第55回日本生体医工学会大会 (富山国際会議場)(ポスターセッション)(2016).

- 2) 大島まり, 「血流シミュレーションの最前線ーシミュレーションは何ができるのか?ー」, 第36回日本静脈学会総会特別講演 (2016).
- 3) 大島まり, 小林匡治, 張浩, 庄島正明, 「動脈瘤の形状と血流の流体シミュレーション」, 第57回日本脈管学会総会 (2016).
- 4) 夏川理央, 余明, 山本創太, 大島まり, 「血圧無負荷時の血管形状を考慮した患者固有の流体構造連成解析」, 第27回バイオフィロンティア講演会 (2016).
- 5) 大島まり, 「血流シミュレーションから見た多胎児」, 第4回新胎児学研究会 (2016).

総説・解説

- 1) 松尾司, 木下晴之, 大島まり, 藤井輝夫「デジタルフォログラフィを用いたリアルタイム 3 次元計測機の開発とその応用」, 光アライアンス, Vol.28, No.2, pp.30-34 (2016) .

(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」

民間等との共同研究

- 1) 「デジタルホログラフィックPTVによる液体内部流動の可視化」

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

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基に、解析的エネルギー勾配計算法を研究した。これらを分子動力学法と組み合わせた構造最適化、ボルン・オープンハイマー分子動力学法を研究した。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、任意のフラグメントが定義できる方法の開発とフレキシブルな計算分子構造拡張シナリオのサポートを行った。来年度も引き続き実施する。

(3) ProteinDF/QCLO のオープンソース化

GPL v3 ライセンスに基づくオープンソース化を実施した ProteinDF/QCLO のアップデート版を随時更新した。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全電子計算を実施した。

(5) タンパク質の原子電荷の研究

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。本研究では、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 を再現しつつユニークな特徴を持つ新しい原子電荷を研究した。来年度も引き続き実施する。

(6) 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。本年度は、ダイナミクス, モルフォロジー, 不純物や欠陥などが及ぼす影響を研究した。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。

(7) 酵素設計の研究

RNAP, DNA, mRNA 複合体と変異株のモデリング, 生産性との間の相関の研究を行った。本研究は, 岡山大学田村研究室との共同研究である。

(8) チーム制による先端シミュレーションソフトウェア開発教育の開発

「ソフトウェア工学とHPC教育の両立」, 「産業界講師の参加」, 「東大スパコン利用」を特徴とする演習講義を工学系研究科で引き続き実施した。昨年度までに基礎・応用編の教科書2冊を上梓した。なお, 本教育活動はISECON2016において優秀賞が授与された。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Masahiro Sato, Akiko Kumada, Kunihiro Hidaka, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Computational study on hole conduction in normal alkanes: anisotropy and effect of dynamic disorder, 2017.2, Applied Physics letters, Vol. 110, Issue 9, 092903.
- 2) Masahiro Sato, Akiko Kumada, Kunihiro Hidaka, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Quantum Chemical Calculation of Hole Transport Properties in Crystalline Polyethylene, 2016.10, IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, Vol. 23, Issue 5, pp. 3045-3052.
- 3) Masahiro Sato, Akiko Kumada, Kunihiro Hidaka, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Can Classical Marcus Theory Describe Hole Transfer in Polyethylene? 2016.10, IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, Vol. 23, Issue 5, pp. 2978-2984.
- 4) Masahiro Sato, Akiko Kumada, Kunihiro Hidaka, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Computational Study of Excess Electron Mobility in High-Pressure Liquid Benzene, 2016.4, J. Phys. Chem. C 2016, 120, 8490-8501.

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, 2016.9, 電気学会論文誌A(基礎・材料・共通部門誌) Vol. 136 (2016) No. 9 p. 561-567.
- 2) 居駒幹夫, 高橋英男, 西村勝彦, 平野敏行, 恒川直樹, 佐藤文俊: 非情報系の学生を対象としたソフトウェア開発演習の設計と改善, 研究報告情報システムと社会環境(IS), 2016-IS-137, 2, 1-8, (2016) .

国際会議予稿集

- 1) Masahiro Sato, Akiko Kumada, Kunihiko Hidaka, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Multi-scale Computational Evaluation of Hole Mobility in Amorphous Polyethylene, 2016.10.16-19, 2016 IEEE CEIDP.
- 2) Masahiro Sato, Akiko Kumada, Kunihiko Hidaka, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Computational Study on Electron Mobility in Liquid Benzene, 2016.7.3-7, 2016 IEEE ICD.

国際会議アブストラクト

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: A theoretical study of glucose oxidase using canonical molecular orbital calculation, 2017.2.19-24, The 57th Sanibel Symposium.
- 2) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: An effective grid-free approach based on the third-generation density-functional-theory calculation method, 2016.2.14-19, The 56th Sanibel Symposium.

学会講演論文

- 1) 佐藤文俊, 平野敏行: タンパク質の美しき電子の世界, 2017.3.17-20, 日本農芸化学会 2017, 京都女子大学(京都).
- 2) 田村隆, 中島佑里子, 平野敏行, 佐藤文俊, 根本理子, 稲垣賢二: 放線菌 *S. incarnatus* の RNA ポリメラーゼ多重変異の分子構造モデル, 2017.3.17-20, 日本農芸化学会 2017, 京都女子大学(京都).
- 3) 居駒幹夫, 高橋英男, 恒川直樹, 西村勝彦, 平野敏行, 佐藤文俊: 非情報系学生を対象としたソフトウェア開発演習の設計と継続的改善, 2017.3.11, ISECON 2016, 東京電気大学(東京).
- 4) 佐藤文俊: 計算生命科学のための量子化学基礎, 2016.11.8, 計算生命科学の基礎Ⅲ(神戸).
- 5) 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, 2016.10.1, 第 3 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会, コクヨホール(東京) 2016.
- 6) 平野敏行, 佐藤文俊: 罰則付き回帰法に基づくタンパク質原子電荷の計算と性質, 2016.9.1, 第 39 回ケモインフォマティクス討論会, 静岡大学(浜松).
- 7) 平野敏行, 佐藤文俊: グリッドフリー密度汎関数計算におけるエネルギー勾配計算, 2016.9.1, 第 10 回分子科学討論会, 神戸ファッションマート(神戸).
- 8) 居駒幹夫, 高橋英男, 西村勝彦, 平野敏行, 恒川直樹, 佐藤文俊: 非情報系の学生を対象としたソフトウェア開発演習の設計と改善, 2016.8.25-26, 2016 日本情報処理学会 第 137 回情報システムと社会環境研究発表会(北海道).
- 9) 佐藤正寛, 熊田亜紀子, 日高邦彦, 平野敏行, 佐藤 文俊: 液体ベンゼン中過剰電子移動度の算出, 2016.3.16-18, 2016 電気学会全国大会, 九州大学 伊都キャンパス(九州).

総説・解説・紀要

- 1) 佐藤文俊, 居駒幹夫:2016 年度「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」,2016.9, スーパーコンピューティングニュース, Vol. 18, No. 5, (2016).
- 2) 佐藤文俊:工学とバイオ研究特に際して, 2016.5, 生産研究, Vol. 68 (2016) No. 3, p. 181.
- 3) 金泰煥, 平野敏行, 佐藤文俊:カノニカル分子軌道計算に基づく線形回帰法を用いたタンパク質原子電荷の開発,2016.5, 生産研究, Vol. 68 (2016) No. 3, pp. 213-217.
- 4) 紀平昌吾, 平野敏行, 佐藤文俊:量子化学計算によるオキシトシンの安定構造に関する研究,2016.5, 生産研究, Vol. 68 (2016) No. 3, pp. 219-223.
- 5) 佐藤正寛, 熊田亜紀子, 日高邦彦, 平野敏行, 佐藤文俊:ポリエチレンにおける正孔輸送シミュレーション, 2016.5, 生産研究, Vol. 68 (2016) No. 3, pp. 225-229.

(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・オッペ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) 「RNA ポリメラーゼの能力改変に関する研究」
- 3) 「高電圧技術・絶縁材料技術の量子化学計算による研究」

半場藤弘研究室 流体物理学

半場藤弘研究室では、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と、統合された乱流モデルの開発を行っている。

不整合の解消とモデルの統合の試みとして、まずチャネル乱流の直接数値計算データを用いてフィルター操作と空間微分の非可換性による付加項の効果を調べ、速度不整合との関係やエネルギー輸送に対する寄与を考察した。また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。さらに 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 と LES の輸送方程式を考察した。

また LES モデルや RANS モデルそのものの改良にも取り組んだ。乱流強度の非等方性に対するモデルの効果を考察し、長さスケールを含まない新しい LES モデルを提案し、チャネル乱流と乱流熱対流に適用して検証を行った。回転・旋回乱流に特徴的なヘリシティ効果を取り入れた LES モデルを提案した。また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。回転座標系乱流のヘリシティによる平均流生成効果を数値計算を用いて考察し、RANS モデルの改良を試みた。さらに円管内旋回乱流に着目し、レイノルズ応力の履歴効果について考察した。

(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、乱流磁気リコネクションの輸送現象や太陽磁場の周期活動に適用して考察した。また電磁流体乱流の数値計算を行い乱流エネルギーや乱流起電力などの統計量を求めダイナモ機構について調べた。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Nobumitsu Yokoi, Dieter Schmitt, Valerly Pipin, Fujihiro Hamba: A new simple dynamo model for stellar activity cycle, June 2016, The Astrophysical Journal, Vol. 824, pp. 67 1-12.
- 2) Fujihiro Hamba: History effect on the Reynolds stress in turbulent swirling flow, February 2017, Physics of Fluids, Vol. 29, pp. 025103 1-11.

国際会議予稿集

- 1) Nobumitsu Yokoi: Flow induction and transport suppression due to helicity, with implication to subgrid-scale modelling of turbulence, April 2016, Proceedings of IUTAM Symposium on Helicity, Structures and Singularity in Fluid and Plasma Dynamics, S14-2.
- 2) Nobumitsu Yokoi, Axel Brandenburg: Vortex generation due to inhomogeneous turbulent helicity, April 2016, Proceedings of European Geosciences Union General Assembly 2016, NP6.2- EGU2016-8135.
- 3) Nobumitsu Yokoi: Inhomogeneous flow effects on turbulent dynamo, with special reference to stellar activity cycle, June 2016, Astro Fluid 2016: An international conference in memory of Professor Jean-Paul Zahn's great scientific achievements, III-P-6.
- 4) Nobumitsu Yokoi: Flow generation by inhomogeneous helicity and turbulent angular momentum transport, June 2016, European GdR Dynamo 2016, p.16.
- 5) Nobumitsu Yokoi: Inhomogeneous turbulence in magnetic reconnection, August 2016, 41st COSPAR Scientific Assembly 2016, D2.4-0023-16.
- 6) Nobumitsu Yokoi: Inhomogeneous flow effects in stellar activity dynamo, August 2016, Solar and Stellar Magnetic Fields - a conference in honor of Manfred Schuessler, 4SA-4.
- 7) Nobumitsu Yokoi: Subgrid-scale modelling with structural effects incorporated through helicity, September 2016, Proceedings of the interdisciplinary Turbulence initiative (iT_i) 2016, S9-5.
- 8) Hideaki Miura, Fujihiro Hamba, Atsushi Ito: Two-fluid subgrid-scale viscosity in nonlinear simulation

of ballooning modes in a heliotron device, October 2016, Proceedings of 26th IAEA Fusion Energy Conference, TH/P1-5.

- 9) Nobumitsu Yokoi: A simple subgrid-scale model for astrophysical turbulence, November 2016, National Astronomical Observatory of Japan (NAOJ) Center for Computational Astrophysics (CfCA) User Meeting, S5-21.
- 10) Nobumitsu Yokoi: Inhomogeneous helicity effects in angular-momentum transport in geophysical and astrophysical turbulent flows, December 2016, Proceedings of American Geophysical Union Fall Meeting, NG13A-1686.
- 11) Nobumitsu Yokoi: Inhomogeneous global flow effects in turbulent transport: Flow and magnetic-field induction, March 2017, Institute for Space and Earth Environmental Research (ISEE) Workshop on Inner Heliospheric Plasma, 1-P1.
- 12) Nobumitsu Yokoi: Inhomogeneous global flow in turbulent transport, March 2017, Proceedings of the Nonlinear Wave and Chaos Workshop (NWCW2016), p.33.

国際会議アブストラクト

- 1) Nobumitsu Yokoi: A simple turbulent dynamo for stellar activity cycle, July 2017, Colloquium Series at Instituto de Astrofisico de Canarias (IAC).
- 2) Nobumitsu Yokoi: Helicity effect in large-scale MHD flow generation, August 2016, Max-Planck Sonnensystemforschung (MPS) Seminar Series.
- 3) Nobumitsu Yokoi: Transport suppression in turbulence: Flow generation, dynamo, and magnetic reconnection, September 2016, Solar Meeting at Institute for Space and Earth Environmental Research (ISEE).
- 4) Nobumitsu Yokoi: Large-scale flow induction by inhomogeneous turbulent helicity, November 2016, Fluids and MHD Seminar Series at Pure and Applied Mathematics Department.

学会講演論文

- 1) 半場藤弘：円管内旋回流におけるレイノルズ応力の履歴効果，2016 年 9 月，日本流体力学会年会 2016 論文集，27.
- 2) 横井喜充，Axel Brandenburg：非一様ヘリシティによる流れ生成と角運動量輸送，2016 年 9 月，日本流体力学会年会 2016 論文集，266.
- 3) 三浦英昭，伊藤淳，半場藤弘：LHD バルーン不安定性の 2 流体ラージ・エディ・シミュレーション，2016 年 12 月，プラズマ・核融合学会第 33 回年会予稿集，01aP35.
- 4) 半場藤弘：新しいスケール空間乱流エネルギー密度を用いたチャンネル流の解析，2016 年 12 月，第 30 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集，D04-1.

- 5) 半場藤弘：フィルター関数を用いたスケール空間乱流エネルギー密度，2017 年 3 月，日本物理学会第 72 回年次大会概要集，p. 2828.
- 6) 稲垣和寛，半場藤弘：圧力拡散を通じたヘリシティによる乱流エネルギー輸送と慣性波，2017 年 3 月，日本物理学会第 72 回年次大会概要集，p. 2832.
- 7) 金本孝太，半場藤弘：乱流エネルギー散逸率の輸送方程式の消散項，2017 年 3 月，日本物理学会第 72 回年次大会概要集，p. 2831.

(2) 研究プロジェクト

民間等との共同研究

- 1) 「2 スケール乱流理論による界面積濃度輸送式モデルの検討」

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、科学技術試験研究委託事業重点課題8、内閣府 SIP プロジェクトに関連して、以下の活動を実施した。

(1) 時間並列計算法による高性能計算

並列数が多くなると、空間方向の並列化だけでは並列性能は飽和する。そこで、時間方向の並列化を導入することにより、並列性能を向上する方法を検討している。時間方向の並列計算法として、Parareal 法に基づくアルゴリズム開発を行った。本年度は、放物型偏微分方程式については大規模並列性評価を実施した。また、双曲型偏微分方程式については計算技術の検討を実施した。これらの結果を基にプラットフォームに必要な要素技術の検討を実施した。

放物型偏微分方程式について、オリジナルの Parareal 法を基にした時間並列計算の大規模並列性評価を行い、8.5 倍の加速率を達成した。しかしながら、拡散問題を解く線形ソルバーの反復数が時間並列計算の影響を受けて変化し、計算の負荷バランスが崩れることがあり、この問題を解決すればさらに高い加速率が期待できることがわかった。さらに、待ち時間を削減するためパイプライン化した Parareal 法を基にした時間並列計算と空間領域分割を基にした空間並列を組み合わせたハイブリッド並列計算の大規模並列性能評価を行い、空間並列数×時間並列数 $N_s \times N_t = 64 \times 100$ (6,400 ノード) で最大 222 倍の加速率を得た。この時、時間並列による加速率は 16.6 倍である。以上の結果を基に、次年度は時間並列法をフェーズフィールド法へ適用するためのアルゴリズム開発を行う。

双曲型偏微分方程式については、時間並列計算の反復計算において Coarse solver で高精度な位相計算が必要なため、その計算のための計算技術を検討した。その結果、空間分解能を粗視化し時間分解能を担保する基底次元低減法は、反復初期段階では有効であるが高精度な収束は困難であることが分かった。さらに、低計算負荷でウェーブレットを使い時間方向のマルチスケール分解により高精度な時間積分を可能とする WATMUS 法や無減衰移流計算法(時空間反対称性スキーム)を基にした移流計算での高位相精度計算法等が有望であることが分かった。

(2) ステンシル計算における疎行列ベクトル積の低 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 計算アルゴリズムが要求される。しかし、係数行列が疎な連立一次方程式は、行列ベクトル積のループ処理内の B/F が大きくなる傾向である。昨年度は、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て、行列ベクトル積を行列行列積として解くアイデアを提案し、プロトタイプコードで基本性能を確認した。今年度は、昨年開発したプロトタイプコードをもとに、提案アルゴリズムを効率化する方法を検討した。右辺ベクトルによって反復計算の収束履歴が異なることを考慮すると、ナイーブな実装では、全ての解ベクトルが収束するまで全ベクトルを計算することになる。つまり、すでに収束した解ベクトルに対しても反復計算を行うことになる。この反復計算は不要な計算であるため、これを取り除く制御を実装することで実行時間の短縮を狙った。その結果、余計な計算コストを取り除くことによる高速化が達成でき、京コンピュータ上での性能評価では、理論性能 36%の実行性能を達成した。

(3) 上流設計システムの設計

平成27年度まで実施された HPCI 戦略プログラム分野4「次世代ものづくり」において、多目的設計最適化問題に対応した汎用解析プラットフォームソフトウェアシステム、HPC/PF (High Performance Computing Platform)の研究開発を行ってきた。この HPC/PF 上に宇宙航空研究開発機構が開発した多目的設計探索モジュール cheetah を実装し、動作検証を実施した。この活動により、ソルバー種類に依存しない汎用的かつ大規模並列に耐えうる解析実行環境の整備に関する知見を蓄えてきた。また一方で、今後のポスト「京」コンピュータを始めとする超並列計算機において、大量の中小規模ジョブを効率的に実行する、いわゆる Capacity Computing の汎用的な実行環境の必要性が、主に創薬・ナノテク材料系分野から寄せられている。これらの背景を踏まえて、本年度は HPC/PF をベースに Capacity Computing に資する、新しい上流設計プラットフォームの基本設計を実施した。また、具体的な事例での検討を通して基本設計を熟成させるデータを得るため、HPC/PF を利用した Capacity Computing 対応のプロトタイピングと検討のためのデータサンプリングを実施した。Capacity Computing 対応のプラットフォームのプロトタイピングは、京コンピュータ上での動作を目標として、HPC/PF をベースとした解析実行プラットフォームを構築した。事例としては、連携する重点課題6のサブ課題 B で開発している ABINIT-MP を対象にして Capacity Computing のワークフロー実例を作成した。今後は H28 年度に再設計したワークフローに対して、機能拡張と具体的な開発を行う予定である。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Seigo Imamura and Kenji Ono and Mitsuo Yokokawa: Iterative-method performance evaluation for multiple vectors associated with a large-scale sparse matrix, International Journal of Computational Fluid Dynamics, Vol. 30, No. 6, pp.395-401, 2016.
- 2) Fan Hong, Chongke Bi, Hanqi Guo, Kenji Ono, and Xiaoru Yuan: Compression-based Integral Curve Data Reuse Framework for Flow Visualization, Journal of Visualization, 2017, to be published.
- 3) Takashi Shimizu, Naohisa Sakamoto, Jorji Noraka, Kenji Ono, Koji Koyamada: Integrated Volume Visualization Environment on the Web, Lightning presentation, ISAV 2016: In Situ Infrastructures for

Enabling Extreme-scale Analysis and Visualization Held in conjunction with SC16: The International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis, 2016.

和文論文

- 1) 木村 祐介, 木村 真也, 世良 俊博, 小野 謙二, 田中 学, 嗅動作時における鼻腔内流れのボクセルシミュレーション, 生体医工学, **accepted**, 2016.
- 2) 竹之下 遼, 原田 利宣, 小野 謙二, ラフ集合を用いた Web 上の酒類に対する感性情報の視覚化, 日本感性工学会論文誌, 2016.10,
[https://www.jstage.jst.go.jp/article/jjske/advpub/0/advpub_TJSKE-D-16-00057/_pdf], 2016.
- 3) 竹之下遼, 原田利宣, 小野謙二, ラフ集合理論を用いた酒類に対する Web 上の感性情報の視覚化, 日本感性工学会論文誌, doi: 10.5057/jjske.TJSKE-D-16-00057, 2017.

国際会議予稿集

- 1) F. Hong, C. Bi, H. Guo, K. Ono, and X. Yuan, "Compression-based Integral Curve Data Reuse Framesork for Flow Visualization," ChinaVis 2016, 21-23 July, CHangsha, China, 2016.
- 2) C. Bi, J. Nonaka, K. Ono, "Interactive In-situ Visualization for Large-Scale Simulations," ChinaVis 2016, 21-23 July, Changsha, China, 2016.
- 3) Takashi Shimizu, Naohisa Sakamoto, Jorji Nonaka, Kenji Ono and Koji Koyamada, "Web-based Visualization System for Large-Scale Volume Datasets," JSST2016 Symposium: Numerical Simulation and Visual Analytics of Nonlinear Problems, Oct. 27-28, Kyoto, 2016.
- 4) Sakurai, D, Carr, HA, Ono, K et al. (2 more authors) Flexible Fiber Surface: A Reeb-Free Approach. In: Topology-Based Methods in Visualization 2017 (TopoInVis 2017), 27-28 Feb 2017, Toyko, Japan, 2017.
- 5) K. Uzawa and K. Ono, "Turbulence Analysis for High Reynolds Number Flow By Open-source CFD Software FrontFlow/Violet-Cartesian," The 12the World Congress on Computational Mechanics, 24-29 July 2016, Seoul, Korea, 2016.
- 6) M. Iizuka and K. Ono, "Framework for Building Parallel-in-Time Integration Simulators," The 12the World Congress on Computational Mechanics, 24-29 July 2016, Seoul, Korea, 2016.
- 7) Mikio Iizuka, and Kenji Ono: Investigation of Convergence Characteristics of the Parareal method for Hyperbolic PDEs using the Reduced Basis Methods, Fifth Parallel-in-time Integration Workshop, Banff, Canada, Nov.27-Dec.2, 2016.

国際会議アブストラクト

- 1) K. Uzawa and K. Ono, "Validation of Wall-Modeled LES for High Reynolds Number Flow," VII European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, ECCOMAS Congress 2016, 5-10 June 2016, Crete Island, Greece, 2016.
- 2) K. Uzawa and K. Ono, "Parallel Performance of Frontflow/violet-Cartesian with Wall-Modeled LES Capability," 24th International Congress of Theoretical and applied Mechanics(ICTAM), 21-26 August 2016, Montreal, Canada, 2016.
- 3) A. NARITA, K. MACHIDA, S. EGAWA, M. MUNEKATA, K. ONO, T. WATANABE, and H. YOSHIKAWA, "Characteristics of Air Flow in a Hemispheric Head Cyclone Separator," The 27th International Symposium on Transport Phenomena, 20-23 Sep., Honolulu, USA, 2016.
- 4) Takashi Shimizu, Naohisa Sakamoto, Jorji Nonaka, Kenji Ono and Koji Koyamada : Web-based Visualization System for Large-Scale Volume Datasets, The 35th JSST Annual Conference International Conference on Simulation Technology, Kyoto, October 27-29, 2016.
- 5) J. NONAKA, K. ONO, M. FUJITA, K. OKU, and T. KAWANABE, "HIVE: A VISUAL ANALYTICS FRAMEWORK FOR LARGE-SCALE CFD ON THE K COMPUTER," 28th International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics Parallel CFD2016, 9-12 May, Kobe, Japan, 2016.
- 6) S. Shimizu, T. Sakamoto, S. Kimura, G. Tanaka, T. Sera, H. Yokota, and K. Ono, "Direct Numerical Simulation of Nasal Airflow," 28th International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics Parallel CFD2016, 9-12 May, Kobe, Japan, 2016.
- 7) S. Imamura, K. Ono, M. Iizuka, and M. Yokokawa, "Building the Performance Model of Parareal Method," 28th International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics Parallel CFD2016, 9-12 May, Kobe, Japan, 2016.
- 8) M. Iizuka and K. Ono, "Convergence Rate of Parareal Method with Modified Newmark-Beta Algorithm for 2nd-Order ODE," 17th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, April 12-15, Paris, France, 2016.
- 9) Mizue MUNEKATA, Akimasa NARITA, Go KITAMURA, Hiroyuki YOSHIKAWA, Kenji ONO, Takashi WATANABE, Flow Characteristics and Separation Performance in a Hemispheric Head Cyclone Separator, Proceedings of the 13th International Symposium on Experimental Computational Aerothermodynamics of Internal Flows, 7-11 May 2017, Okinawa, Japan, ISAI13-S-0112, pp.1-5, 2017.

学会講演論文

- 1) 小野 謙二, 野中丈士, 藤田将洋, 奥健太郎, 川鍋友宏:大規模並列可視化システム HIVE の開発, 計算工学講演会論文集 Vol. 21, 2016.
- 2) 竹之下遼, 原田利宣, 小野謙二:ラフ集合理論を用いた酒類に対する Web 上の感性情報の視覚化, 日本感性工学会全国大会(査読セッション D14), 2016.
- 3) 鶴沢憲, 加藤千幸, 小野謙二:準第一原理計算に基づく壁モデル構築への試み, 第 32 回 TSFD シンポジウム, 2017 年 3 月, 東京, 2017.
- 4) 小野謙二, 川鍋友宏, 野中丈士: ChOWDER: 創造的な議論と意思決定を支援する協調作業環境, AXIES 大学 ICT 推進協議会 2016 年度年次大会, 12 月 14 日~16 日, 2016.
- 5) 今村 成吾, 飯塚幹夫, 小野謙二, 横川 三津夫:Parareal 法と領域分割法による拡散問題での時空間並列性能評価, 第 30 回数値流体力学シンポジウム, D09-4, 2017.
- 6) 小野謙二, 野中丈士, 川鍋友宏:大規模並列可視化システム HIVE の流体計算への適用, 第 30 回数値流体力学シンポジウム, D09-3, 2017.
- 7) 成田明正, 町田佳祐, 江川早稀, 宗像瑞恵, 吉川浩行, 小野謙二, 渡辺孝司:ドーム型サイクロンセパレータ内における気流の流動特性, 日本機械学会 2016 年度年次大会, 2016, G0500503, pp.1-2, 2016.
- 8) 北村豪, 成田明正, 宗像瑞恵, 吉川浩行, 小野謙二, 渡辺孝司:ドーム型サイクロンセパレータ内の流れ構造に関する研究, 日本機械学会九州支部総会講演論文集, 2017, No.178-1, pp.175-176, 2017.
- 9) 飯塚幹夫, 小野謙二:時間並列計算法の課題とその解決に関する研究, 日本応用数理学会 2016 年度年会, 2016.
- 10) 今村成吾, 小野謙二, 飯塚幹夫, 横川三津夫:Parareal 法と領域分割法による拡散問題での時空間並列性能評価, 研究報告ハイパフォーマンズコンピューティング(HPC), 2016-HPC-157(19), 1-7 (2016-12-14), 2188-8841, 2017.

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

当研究室では、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する先端的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、ユーザー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内容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提案ならびに関連研究室と連携した本プラットフォーム実現のための研究開発の推進に力点を置いている。

(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」研究開発マネージメント

本プロジェクトは、平成20年度から平成24年度の5年間にわたる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に掲げられた。

本プロジェクトで開発された主要なアプリケーションソフトウェアは、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))である。これらのソフトウェアは、普及促進の手段として最新バージョンが定期的(1回/年)に公開され、プロジェクト終了時点で9万件を超えるダウンロード件数を得るに至った。一方それらのソフトウェアが今後も持続的に発展する仕組みとして、アプリごとに独自のユーザー会組織を設けた。当センターは、本プロジェクト終了後も各ユーザー会を牽引する研究チームとの連携を継続させることにより、国家事業の効果的な牽引と成果普及の支援を実施している。

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

本プログラムでは、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23～27年度の5年間にわたり本格研究活動が実施された。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、他の研究機関(日本原子力研究開発機関、宇宙航空研究開発機構など)と連携して推進した。

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本柱で推進した。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・安全社会の構築の3つのカテゴリーで括られる先導的課題(5テーマ)を設けて推進した。

後者(体制構築)はこのプログラムの特徴的活動として設けられたものであり、当研究室が各施策の牽引・取り纏めを担当した。本分野独自の推進方法としては、[I]成果を使いやすくするための事業、[II]成果を知ってもらうための事業、[III]成果を活用できる人材育成事業、[IV]成果を実際に使ってもらうための事業、の4つに分類しそれぞれ関連付けて実施した点が挙げられる。ここで特に力点を置いて実施した施策として、HPC/PF(HPC次世代ものづくりプラットフォーム)があるが、これはHPCを産業

界に広く普及させるための統合情報基盤というべきものである。そこでは本分野で開発したアプリケーションソフトウェアを中心にもものづくりに役立つオープンソースソフトウェアラインナップ(当面 12 本)を整備するとともに、それらを効果的・効率的に利活用するためのデータベース・知識ベース等を統合したところに特徴がある。例えば、利用者の理解を深めるため各アプリの解析事例を基礎的なものから応用的なもの、京利用の大規模なものまで数多く採り入れて当該アプリの機能を総括的に開示するなど、実装したコンテンツは量・質ともに従来の同類プラットフォームには見られないレベルのものとなっている。このHPC/PFのコンテンツについては、並行して開発・設置したアウトリーチサイト(計算工学ナビ)を通して発信する仕組みにし、すでに多くの訪問者・活用者を得ている。

この取り組みによってHPCシミュレーション技術に関する情報の蓄積と公開の仕組みの基盤が出来上がり、後に続く国家施策等による成果の取り込みもより円滑に進むことが期待できる。その結果、最新の研究開発成果のタイミングの良い社会への発信と効果的利活用が加速される見込みである。

(3)「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」研究開発マネジメント

本プロジェクトは、「京」の後継となるポスト「京」の開発計画(2021～2022 年完成予定)と連動し、その能力を十分に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。当センターを責任機関とする研究グループは、9 つの重点課題の内、標題の重点課題⑧を担当することになり、平成 26～27 年度の調査研究・準備研究に続きそれを踏まえた本格研究が本年度(平成 28 年度)より開始されたところである。

本重点課題では、近未来のものづくりがどのような方向に進むかを念頭におき、特に世界的な広がりを見せつつある欧米の動き(IoT, インダストリー4.0, インダストリアル・インターネット)を注視しながら、我が国のものづくりの特徴を生かせる「HPCデジタルエンジニアリング」を実現することを目標に、それに必須のキラーアプリケーションを開発するためのサブ課題を設定した。その主眼は、製品開発の上流(製品構想段階)までを視野に入れた設計プロセスの革新と高品質低コストを実現するためのキーとなる製造プロセスの革新への貢献である。具体的には前者のカテゴリーで 4 サブ課題、後者のカテゴリーで 2 サブ課題の総計 6 サブ課題を設けた。

また、全体的推進マネジメントの特徴としては、重点課題⑧内の個別サブ課題ごとの推進会議(6 つ)、技術分野ごとの推進会議(3 つ)、全体推進会議・諮問委員会を設けて効率的な推進体制にした点とともに、関連の深い重点課題⑥との間では、アプリ連携開発会議や幹事会議を設けてプロジェクト全体の成果拡大を図っているところにある。

梅野研究室 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) マルチフィジックス原子間ポテンシャルモデルの開発と分子動力学解析

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。原子の振舞いだけでなく、原子配置の変化に伴う電子状態変化を記述できる高度なポテンシャルモデルを構築することで、第一原理計算などの適用が難しい複雑な構造のマルチフィジックス解析が可能となる。本年度は、固体酸化物形燃料電池燃料極(Ni/YSZ)に適用可能な反応分子動力学ポテンシャルモデルの開発、ならびに強誘電体ナノワイヤに適用可能な電気双極子ポテンシャルモデルの開発に取り組み、前者については燃料極サマーレットの還元反応のシミュレーション、後者についてはひずみ負荷によるナノワイヤの分極転移のシミュレーションを可能とした。

(2) ナノチューブ座屈変形と機能性変化の原子・電子モデル解析

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。本年度は軸方向圧縮カーボンナノチューブの座屈メカニズムの解明と、座屈によるバンドギャップ変化の解析に取り組んだ。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、特にカイラル(螺旋状)ナノチューブにおいては螺旋形の不安定モードが現れることによる二段階の構造不安定を生じるなど興味深い結果を得た。密度汎関数法ベースの強結合近似解析によって座屈前後のバンドギャップを求め、その挙動がカイラル指数によっていくつかのパターンに分類されることなどを見出した。

(3) ポリマーの破壊に関するマルチスケール解析

ポリマー(高分子材料)が構造材料としても応用範囲を拡大しており、より優れた機械的特性を備えた材料の開発のための指導原理をシミュレーションから獲得することが期待されている。我々は、粗視化分子動力学(Coarse-Grained Molecular Dynamics; CGMD)シミュレーションおよび有限要素法(Finite Element Method; FEM)解析を用いたマルチスケールシミュレーションを展開している。ポリカーボネートについて様々な多軸応力負荷条件のCGMDシミュレーションを行い、降伏応力をひずみ速度の関数として取得することができた。また、エラストマー(ゴム)のき裂進展 FEM 解析モデルを構築し、これまで不

可能であった低速・高速き裂進展モード転移現象(あるひずみエネルギーでき裂進展速度が不連続に変化する現象)を初めて再現することに成功した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) K. Okamoto, A. Kijima, Y. Umeno and H. Shima: Synchronization in flickering of three-coupled candle flames, 2016, Scientific Reports Vol. 6, 36145.
- 2) M.Q. Le and Y. Umeno: Fracture of monolayer boronitrene and its interface with graphene, 2017, International Journal of Fracture Vol. 205, pp. 151-168.
- 3) A. Iskandarov, Y. Ding and Y. Umeno: Effect of cation dopants in zirconia on interfacial properties in nickel/zirconia systems: An atomistic modeling study, 2017, Journal of Physics: Condensed Matter Vol. 29, 045001.
- 4) A. Kubo and Y. Umeno: Velocity mode transition of dynamic crack propagation in hyperviscoelastic materials: A continuum model study, 2017, Scientific Reports Vol. 7, 42305.

国際会議予稿集

- 1) Y. Umeno, M. Sato, H. Shima and M. Sato: Atomistic modeling analysis of buckling behavior of compressed carbon nanotubes, 2016, Solid State Phenomena 258, pp. 61-64.
- 2) M. Sato, Y. Yachi, I. Koike, H. Shima and Y. Umeno: Cross-sectional deformation in multi-walled carbon nanotubes under hydrostatic pressure, 2016, Solid State Phenomena 258, pp. 65-68.
- 3) A. Kubo and Y. Umeno: Coarse-grained molecular dynamics simulation of fracture problems in polycarbonate, 2016, Solid State Phenomena 258, pp. 73-76.
- 4) M. Sato and Y. Umeno: Atomistic model analysis of deformation of carbon nanotubes under axial compression, 2016, Key Engineering Materials 725, pp. 451-455.
- 5) A. Kubo and Y. Umeno: Atomistic-Level Simulation of Deformation in Polycarbonate, 2016, Key Engineering Materials 725, pp. 445-450.
- 6) Y. Umeno and A. Kubo: Building highly transferable interatomic models for atomistic simulation of device reliability, 2016, SGEM Conference Proceedings Volume III, Book 6, pp. 19-26.
- 7) Y. Umeno and A. Kubo: Effect of defects and electric field on stress-induced motion of 90-degree domain wall in PbTiO₃: A molecular dynamics study, 2017, Advanced Structured Materials Vol. 33 (monograph), Properties and Characterization of Modern Materials, Vol. 33 of the series Advanced Structured Materials, pp. 135-143.

国際会議アブストラクト

- 1) Y. Umeno, A. Kubo and N. Yoshikawa: Multiscale modeling of deformation and fracture in polymers (THERMEC 2016: International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials, 2016.05.29-06.03, Graz, Austria).
- 2) Y. Yachi, I. Koike, N. Ikeoka, Y. Umeno, H. Shima and M. Sato: Cross-sectional buckling analysis of hydrostatically pressurized multi-walled carbon nanotubes by molecular dynamics simulations (ACEM16 (Advances in Civil, Environmental, and Materials Research), 2016.08.28-09.01, ICC JEJU, Jeju Island, Korea).
- 3) S. Oberhoffer, A. Iskandarov and Y. Umeno: Reduction of NiO in a H₂ environment: A ReaxFF molecular dynamics study (2016 Asian SOFC Symposium, 2016.09.04-07, The University of Tokyo, Japan).
- 4) Y. Umeno and A. Kubo: Coarse-grained molecular dynamics simulation of amorphous polymers under multiaxial loading (MMM2016: 8th International Conference on Multiscale Materials Modeling, 2016.10.09-14, Dijon, France).
- 5) Y. Umeno, M. Sato, H. Shima and M. Sato: Computational analysis of buckling mechanism and multiphysics of CNTs under axial compression (EMN (Energy Materials and Nanotechnology) Meeting on Carbon Nanostructures, 2017.02.19-23, Radisson Resort Celebration, Orland, FL, USA).

学会講演論文

- 1) 久保淳, 梅野宜崇: ポリカーボネートの外力負荷変形の分子動力学シミュレーション, 第21回分子動力学シンポジウム, 2016年5月27日, 富山大学, 講演論文集 USB.
- 2) 佐藤誠修, 久保淳, 梅野宜崇: 軸方向圧縮荷重によるカーボンナノチューブ座屈の分子動力学計算と不安定モード解析, 第21回分子動力学シンポジウム, 2016年5月27日, 富山大学, 講演論文集 USB.
- 3) 吉野泰成, 佐藤誠修, 久保淳, 梅野宜崇: 有限温度下の SiC の変形と破壊に関する分子動力学シミュレーション, 第21回分子動力学シンポジウム, 2016年5月27日, 富山大学, 講演論文集 USB.
- 4) 久保淳, 梅野宜崇: 構造用高分子の変形・破壊の粗視化粒子モデル解析, 第21回計算工学講演会, 2016年5月31日～6月2日, 朱鷺メッセ, 新潟, 講演論文集 CD-ROM.
- 5) 佐藤誠修, 梅野宜崇: 外圧を受ける多層ナノチューブ断面形状の座屈変形に関する分子動力学計算と不安定モード解析, 第21回計算工学講演会, 2016年5月31日～6月2日, 朱鷺メッセ, 新潟, 講演論文集 CD-ROM.
- 6) 河合江美, 梅野宜崇: 熱応力による耐環境性セラミックスコーティングの損傷発生条件の理論的予

測, 日本セラミックス協会第 29 回秋季シンポジウム, 2016 年 9 月 7 日～9 日, 広島大学, 講演論文
文集 CD-ROM (No. 1B22) .

- 7) 河合江美、梅野宜崇: 熱応力を受ける多層膜コーティングのき裂発生条件の理論的予測と検証,
日本機械学会第 29 回計算力学講演会, 2016 年 9 月 22 日～24 日, 名古屋大学, 講演論文
集 CD-ROM (No.267) .

(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」
- 2) 挑戦的萌芽研究 「パーセプトロン型原子間相互作用モデルを用いたマルチフィジックスシミュ
レータの開発」

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」

② 公的資金以外

- 1) 「結晶異方性靱性値の理論導出」

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法とナノ計測法、さらに情報科学(インフォマティクス)手法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。これまでに太陽電池材料、二次電池材料、光ファイバー材料、ガラス材料、強相関化合物、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てきた。

(1) 太陽電池材料の粒界構造と機能設計

CuInSe₂ (CIS) に代表されるカルコパイライト型構造を有する化合物は化合物半導体太陽電池の光吸収層としてもちいられている一方で、多結晶体として使用されているため、粒界が特性に大きく影響している。本研究では原子分解能球面収差走査透過型電子顕微鏡を用いて CIS の結晶粒界の原子分解能像を測定し、さらに第一原理計算によって安定構造を別途求めた。得られた構造について第一原理ハイブリッド汎関数計算を行い、バンドギャップ近傍の電子構造を調べた。その結果、結晶粒界が物性に及ぼす影響を明らかにした。

(2) 人工超格子異相界面における格子欠陥の形成および動的挙動の解析

人工超格子では異種物質が接合していることにより特異な結合が形成され、バルク材料にはない特異な物性が発現する。そのような人工超格子の物性を発現するためには、異相界面で原子が拡散する intermixing を制御することが不可欠である。本研究では第一原理計算によって異相界面の原子構造を作成し、同界面の欠陥形成挙動の雰囲気依存性とフェルミ準位依存性を調べた。さらに同界面における原子拡散の活性化エネルギーを計算した。その結果、人工超格子の異相界面における intermixing 挙動には拡散の活性化エネルギーではなく、界面近傍のフェルミ準位が重要な役割を果たしていることを明らかにした。

(3) 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解明し、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。

(4) 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、ドープメ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。

(5) 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。

(6) 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。

(7) 透過型電子顕微鏡による液体の赤外分光スペクトルの測定と第一原理計算

赤外分光 (IR) スペクトルは分子の振動に関する情報を有しており、様々な物質で調べられてきた。赤外分光 (IR) スペクトルは専用の光源と分光器を備えた装置が用いられて測定されるが、そのような装置では空間分解能が低く、局所領域の IR スペクトルを測定することができなかった。2015 年度において我々は、単色化装置を備えた透過型電子顕微鏡 (TEM) を用いて液体の赤外分光スペクトルを測定することに世界で初めて成功した。分子の構造をもとに第一原理摂動計算によって同スペクトルの計算を行い、得られたピークが C-H の伸縮振動に伴う吸収であることを明らかにした。

(8) インフォマティクス手法により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。さらに機械学習で行われる仮想スクリーニングという手法も利用することで、簡易的な人工知能を作製し、数万倍の高速化に成功した。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) S. Kikuchi, H. Oda, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi, "Bayesian optimization for efficient determination of metal oxide grain boundary structures", *Physica B*, in press. [dx.doi.org/10.1016/j.ultramic.2017.03.003](https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2017.03.003).
- 2) [Invited Review] T. Mizoguchi, T. Miyata, and W. Olovsson, "Excitonic, vibrational, and van der Waals interactions in electron energy loss spectroscopy", *Ultramicroscopy*, in press. [dx.doi.org/10.1016/j.ultramic.2017.03.003](https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2017.03.003).
- 3) T. Miyata and T. Mizoguchi, "Fabrication of Thin TEM Sample of Ionic Liquid for High-Resolution ELNES Measurements" *Ultramicroscopy*, 178 (2017) 81-87.
- 4) H. Katsukura, T. Miyata, K. Tomita, and T. Mizoguchi, "Effect of van der Waals interaction on the electron energy-loss near edge structure theoretical calculation" *Ultramicroscopy*, 178 (2017) 88-95.
- 5) K. Tomita, T. Miyata, W. Olovsson, and T. Mizoguchi, "Strong excitonic interactions in the oxygen K-edge of perovskite oxides", *Ultramicroscopy*, 178 (2017) 105-111.
- 6) S. Kiyohara, H. Oda, T. Miyata, and T. Mizoguchi, "Prediction of interface structures and energies via virtual screening", *Science Adv.*, 2, e1600746-1-7.
- 7) K. Kubobuchi, M. Mogi, M. Matsumoto, T. Baba, C. Sato, T. Yamamoto, T. Mizoguchi, H. Imai, "A valence state evaluation of a positive electrode material in a Li-ion battery with first-principles K- and L-edge XANES spectral simulations and resonance photoelectron spectroscopy", *J. Appl. Phys.*, 120, 142125-1-13 (2016).
- 8) T. Sato, E. Tochigi, T. Mizoguchi, Y. Ikuhara and H. Fujita, "Experimental system combined with a micromachine and double-tilt TEM holder", *Microelectronic Engineering*, 164 (2016) 43-47.
- 9) S. Kawanishi and T. Mizoguchi, "Effect of van der Waals interactions on the stability of SiC polytypes", *J. Appl. Phys.* 119 (2016) 175101-1-5.
- 10) K. Tomita, T. Miyata, W. Olovsson, and T. Mizoguchi, "Core-Exciton Interaction in Sodium L_{2,3} Edge Structure Investigated Using the Bethe-Salpeter Equation", *J. Phys. Chem. C*, 120 (2016) 9036-9042.
- 11) T. Ueno, T. D. Rhone, Z. Hou, T. Mizoguchi, K. Tsuda, "COMBO: An Efficient Bayesian Optimization Library for Materials Science", *Materials Discovery*, in press.
- 12) S. Kiyohara, H. Oda, K. Tsuda, and T. Mizoguchi, "Acceleration of stable interface structure searching

using a kriging approach", Jpn. J. Appl. Phys., 55 (2016) 045502-1-4.

- 13) J. E Zuliani, T. Miyata, T. Mizoguchi, J. Feng, D. W Kirk, and C. Jia, "Characterization of Vanadium in Oil Sands Fluid Petroleum Coke", Fuel, 178 (2016) 124-128.
- 14) Y. Matsui and T. Mizoguchi, "First principles calculation of oxygen K edge absorption spectrum of acetic acid: Relationship between the spectrum and molecular dynamics", Chem. Phys. Lett., 649 (2016) 92-96.
- 15) E. Tochigi, S. D. Findlay, E. Okunishi, T. Mizoguchi, A. Nakamura, N. Shibata, and Y. Ikuhara, "Atomic Structure Characterization of Stacking Faults on the {1-100} Plane in α -Alumina by Scanning Transmission Electron Microscopy", AIP-Conference Proceedings Series, 1763 (2016) 050003.
- 16) S. Kiyohara and T. Mizoguchi, "Investigation of Segregation of Silver at Copper Grain Boundaries by First Principles and Empirical Potential Calculations", AIP-Conference Proceedings Series, 1763 (2016) 040001.

国際会議予稿集

- 1) T. Miyata and T. Mizoguchi, "High resolution analysis of ionic liquid", Microscopy, 65, (2016) i33-i33.
- 2) T. Mizoguchi, T. Miyata, S. Kiyohara, H. Katsukura, H. Oda, K. Nakazawa, S. Kikuchi, "Atomic-scale investigation of Glass, Liquid, and Gas using STEM, EELS, and theoretical calculation", Microscopy, 65, (2016) i11-i11.
- 3) E. Tochigi, T. Mizoguchi, A. Nakamura, N. Shibata, and Y. Ikuhara, "Annular Bright Field STEM Investigation of the (0001) Stacking Fault in Alumina", Microscopy and Microanalysis, 22, (2016) 1592-1593.
- 4) T. Miyata and T. Mizoguchi, "Observation of Single Atoms in Liquid and Liquid Inhomogeneous Structures", Microscopy and Microanalysis, 22, (2016) 852-853.
- 5) T. Mizoguchi, "Grain Boundary Informatics: Virtual Screening and Bayesian inference", AMTC Letter, Vol. 5.
- 6) T. Miyata and T. Mizoguchi, "Observation of Single Atoms and Nano Structures in Liquid using Scanning Transmission Electron Microscopy", AMTC Letter, Vol. 5.
- 7) S. Kikuchi, S. Kiyohara, H. Oda, and T. Mizoguchi, "Efficient Interface Structure Searching using Geostatistics Approach", AMTC Letter, Vol. 5.
- 8) H. Katsukura, T. Miyata, and T. Mizoguchi, "The influence of van der Waals interaction on the ELNES theoretical calculation", AMTC Letter, Vol. 5.

- 9) K. Nakazawa, K. Tomita, T. Miyata, and T. Mizoguchi, "Strong two-particle interaction in high energy ELNES/XANES", AMTC Letter, Vol. 5.
- 10) H. Oda, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi, "Machine Learning for Systematic Prediction of Grain Boundary Structure and Energy", AMTC Letter, Vol. 5.

国際会議アブストラクト

- 1) T. Mizoguchi, "Informatics for grain boundary research", Univ. Tokyo-Chalmers Univ. Tech. Workshop on Adv. Mater. and Trans. Elec. Micro., 2017, Univ. Tokyo, Tokyo, March/30th, 2017
- 2) T. Mizoguchi, "Prediction of interface structures and energies using virtual screening", International Symposium on Adv. Func. and Comp. Materials 2017, Shenzhen, China, Jan/6th, 2017.
- 3) T. Mizoguchi, "Acceleration of structure searching and structure-property relationship of crystal interface using informatics approach", MRS-J (International Session), 横浜, 神奈川, 12/19, 2016.
- 4) H. Oda, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi, "Accelerating Interface Structure Searching Using Machine Learning Technique", Materials Research Society (MRS) Fall meeting 2016, Boston, USA, 28th Nov., 2016.
- 5) T. Mizoguchi, "TEM: Atomic resolution microscopy and spectroscopy", 10th NAMIS School, Sep. 16, Tokyo, 2016.
- 6) H. Katsukura, T. Miyata, T. Mizoguchi, "The method of the ELNES theoretical calculation with van der Waals interaction", European Microscopy Congress(EMC) 2016, Lyon, France, 30th August, 2016.
- 7) T. Miyata and T. Mizoguchi, "Observation of Single Atoms in Liquid and Liquid Inhomogeneous Structures", Microscopy and Microanalysis 2016, Columbus, OH, July 27th, 2016.
- 8) T. Miyata and T. Mizoguchi, "Direct Imaging of Single Atoms and Nano Structures in Liquid", IIS PhD Student Live, Komaba, Tokyo, July 14th, 2016.
- 9) T. Miyata, F. Uesugi, and T. Mizoguchi, "Observation of single atoms and the nano-domain structure in a ionic liquid using scanning-TEM", 26th EUCHEM conference on Molten Salts and Ionic Liquids, Wien, Austria, July 6th, 2016.

学会講演論文

- 1) 清原慎, 溝口照康, "モンテカルロ木探索を用いた粒界における偏析原子サイトと濃度の最適化", 日本セラミックス協会年会 2017, 東京, 日本大学, 3月17日.
- 2) 中澤克昭, 宮田智衆, 溝口照康, "シリカ系ガラスにおける分相成長過程のその場観察", 日本セラミックス協会年会 2017, 東京, 日本大学, 3月17日.
- 3) 勝倉裕貴, 宮田智衆, 白井学, 松本弘昭, 溝口照康, "燃料電池反応の解析に向けた電子線エネルギー損失分光による 気体の振動解析", 日本セラミックス協会年会 2017, 東京, 日本大学, 3月17日.
- 4) 小田尋美, 清原慎, 溝口照康, "転移学習を用いた粒界構造探索", 日本セラミックス協会年会

2017, 東京, 日本大学, 3 月 17 日.

- 5) 溝口照康: "STEM, EELS および理論計算を組み合わせたガラス, 液体, 気体の解析", 顕微鏡学会シンポジウム 2016, 帝京平成大学, 東京, 11/18.
- 6) 宮田智衆, 溝口照康: " High resolution analysis of ionic liquid", 顕微鏡学会シンポジウム 2016, 帝京平成大学, 東京, 11/18.
- 7) 清原慎, 溝口照康: "複数の統計手法を用いた不純物の粒界偏析サイトと濃度の最適化", 情報論的学习理論ワークショップ IBIS 2016, 京都大学, 京都, 11/17.
- 8) 小田尋美, 清原慎, 溝口照康: " SV 回帰を用いた結晶初期配置からの粒界エネルギー予測", 情報論的学习理論ワークショップ IBIS 2016, 京都大学, 京都, 11/17.
- 9) 菊地駿, 小田尋美, 清原慎, 松永克志, 溝口照康: "酸化物粒界構造の構造決定およびその構造機能相関に対する情報科学手法の応用", 情報論的学习理論ワークショップ IBIS 2016, 京都大学, 京都, 11/17.
- 10) 中澤克昭, 安間伸一, 宮田智衆, 溝口照康: "ガラス転移及び分相形成過程の高分解能観察", ガラス討論会 2016, 京都大学, 京都, 11/14.
- 11) 溝口照康: "XANES と理論計算による二次電池, 振動, エキシトンおよび van der Waals 力の解析", 立命館大学 SR センターシンポジウム, 立命館大学 SR センター, 滋賀, 11/11.
- 12) 溝口照康: "機械学習による界面原子構造の高速決定", BIOVIA セミナー, 東京, 品川, 11/2.
- 13) 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, 2016, 10/15.
- 14) 溝口照康, 菊地駿, 小田尋美, 清原慎: "情報科学手法を用いた界面構造決定の高速化", エレクトロセラミックス研究討論会 2016, 2016/10/14, 武蔵小杉, 神奈川.
- 15) 菊地駿, 小田尋美, 清原慎, 松永克志, 溝口照康: "インフォマティクス手法を用いた酸化物粒界構造の高速決定および構造機能相関", エレクトロセラミックス研究討論会 2016, 2016/10/14, 武蔵小杉, 神奈川.
- 16) 宮田智衆, 溝口照康: "原子分解能 STEM 計測によるイオン液体中単原子イオンの動的挙動の直接観察", イオン液体討論会 2016, 2016/10/24, 金沢文化会館, 石川.
- 17) 溝口照康: "分析電子顕微鏡を用いたガラス, 液体, 気体と振動, エキシトンおよびファンデルワールス力の解析", 第 32 回 分析電子顕微鏡討論会, 幕張メッセ, 千葉, 9/2, 2016.
- 18) 富田皓太, 溝口照康, "低エネルギー及び高エネルギー XANES にあられるエキシトン効果", XAFS 討論会 2016, 2016/9/3, 名古屋.
- 19) 勝倉裕貴, 宮田智衆, 溝口照康: "XANES 理論計算におけるファンデルワールス力の影響", XAFS 討論会 2016, 2016/9/3, 名古屋.

- 20) 菊地駿, 小田尋美, 溝口照康:新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 2016/7/25, 筑波.
- 21) 中澤克昭, 宮田智衆, 溝口照康:新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 2016/7/25, 筑波.
- 22) 溝口照康:“情報科学手法を用いた結晶粒界構造決定の高速化”, ポスト京 高信頼性構造材料 H28 年度第一回研究会, 東京, 6/21, 2016.
- 23) 溝口照康:“STEM-EELS によるガラスの分相構造, パッキング状態, 配位数および振動解析の可能性”, ニューガラスフォーラム第 117 回ニューガラスセミナー, 東京, 5/30, 2016.
- 24) 溝口照康:“モデリングと分光のための Materials Studio”, BIOVIA Forum 2016, 2016/5/15, 品川.
- 25) 勝倉裕貴, 富田皓太, 宮田智衆, 溝口照康:“ELNES 理論計算におけるファンデルワールス力の影響”, 顕微鏡学会第 72 回学術講演会, 2016/5/15, 仙台.
- 26) 勝倉裕貴, 宮田智衆, 白井学, 松本弘昭, 溝口照康:“高温期待の ELNES 測定及び解析”, 顕微鏡学会第 72 回学術講演会, 2016/5/14, 仙台.
- 27) 宮田智衆, 溝口照康:“液体中の単原子観察およびナノ不均一構造解析”, 顕微鏡学会第 72 回学術講演会, 2016/5/14, 仙台.

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) JST さきがけ 代表, 「情報科学手法を利用した界面の構造機能相関の解明」
- 2) 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」
- 3) 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, 2016 年度
- 2) 「電池材料に関する研究」 国内分析メーカー 2015 年度, 2016 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, 2016 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。大規模数値シミュレーション、計測技術、最適化技法を融合することによって、以下のテーマに関する研究を進めている。

(1) 壁乱流における運動量・熱輸送の制御

壁面上を流体が流れる場合、壁面近傍に形成される微細な乱流構造が、壁面と流体の間の運動量輸送や熱輸送を支配している。例えば、上記の乱流構造が存在するために、高速輸送機器の表面に働く摩擦抵抗は著しく増加する。一方、乱流は高い混合性を有しており、これを促進することにより、燃焼器における燃料と酸化剤の混合や熱・物質輸送等を飛躍的に向上させることが可能となる。本研究では、乱流を自在に制御することによって、乱流によるエネルギー散逸を可能な限り抑えつつ、熱・物質混合を飛躍的に高めるための方法論を提案し、それを実証することを目指している。具体的には、壁面摩擦抵抗低減については、スパン方向壁振動制御、壁面吹き出し制御、超撥水面における抵抗低減効果、及びその機構解明を行った。また、最適制御理論を用いて、壁面摩擦を極力抑えつつ、壁面熱流束を最大化するような壁面吹き出し／吸い込みの時空間分布を最適化し、摩擦抵抗低減と伝熱促進の同時達成に成功した。

(2) 熱流体システムの形状最適化

熱流体現象は、強非線形性、マルチスケール性を有しており、エネルギー機器の性能を事前に予測することは容易ではない。近年、計算機能力が飛躍的に増加し、与えられた流動条件下の熱流動場をシミュレーションにより、高精度で再現できるようになりつつある。しかし、熱流体システムの最適設計においては、膨大な試行錯誤が必要であり、設計変数空間全域における、最適解を探索することは極めて困難な課題となる。本研究では、デカルト座標系と境界埋め込み法を組み合わせることにより、複雑3次元形状の最適化アルゴリズムを構築し、実問題への応用を進めている。具体的には、低圧力損失かつ高伝熱特性のための熱交換器の形状最適化に同アルゴリズムを適用し、従来の性能を飛躍的に上回る伝熱面形状の提案、実証を行っている。

(3) 観測データと数値シミュレーションの融合による熱流動場の最尤推定

乱流中に何らかの物質が放出されると、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。従って、放出源の下流に濃度センサを配置し、濃度を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、それらの計測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

存せず、センサを増やすことにより、推定性能が向上することが確認されている。このような技術を自立型海中ロボットに搭載することによって、海底熱水鉱床の探索、周辺域の環境予測システムの構築を進めている。

(4) コロイド流体の塗布乾燥における微粒子の自己配列化

燃料電池、リチウムイオン電池、太陽電池、光学デバイス等のアプリケーションでは、微細な粒子を基板上に規則正しく配列することによって、新規機能を創出する試みが進められている。多くの場合、これらの粒子膜は、粒子を分散させた溶媒を基板上に塗布、乾燥させることによって製造される。しかし、スラリーの塗布乾燥は、液膜流れ、相変化、表面張力効果、粒子間相互作用、熱・物質輸送を内包する複雑な現象であり、塗布・乾燥条件の決定は経験に大きく頼っているのが現状である。本研究では、微小な粒子が分散した溶媒を基板上に塗布した際に、液膜、もしくは液滴内部に生じるミクロな流れやその結果として基板上に堆積する微粒子の配列パターンを明らかにすることを目指して、実験的研究を進めている。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Davide Cerizza, Wataru Sekiguchi, Takahiro Tsukahara, Tamer Zaki, Yosuke Hasegawa, “Reconstruction of scalar source intensity based on sensor signal in turbulent channel flow” Flow, Turbulence and Combustion, Vol. 97, Issue 4, 1211-1233 (2016).
- 2) Alexander Stroh, Yosuke Hasegawa, Johan Kriegseis, Bettina Frohnappfel, “Secondary vortices over surfaces with spanwise varying drag”, Journal of Turbulence, Vol. 17, pp. 1142-1158 (2016).
- 3) Alexander Stroh, Yosuke Hasegawa, Philipp Schlatter, Bettina Frohnappfel, “Global effect of local skin friction drag reduction in spatially developing turbulent boundary layer”, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 805, pp. 303-321 (2016).

国際会議予稿集

- 1) Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa, “Optimal control input for friction drag reduction in turbulent channel flow”, 24th International Congress of Theoretical and Applied Mathematics (ICTAM2016), Montreal, Canada, Aug. 21-16 (2016).
- 2) Davide Gatti, Bettina Frohnappfel, Andrea Cimarelli, Maurizio Quadrio, Yosuke Hasegawa, “Study on energetics in drag-reduced turbulent channels”, Interdisciplinary Turbulence Initiative 2016 (iTt 2016), Bertinoro, Italy, Sept 5-6 (2016).
- 3) Davide Gatti, Bettina Frohnappfel, Andrea Cimarelli, Maurizio Quadrio, Yosuke Hasegawa, “Study on energetics in drag-reduced turbulent channels” Interdisciplinary Turbulence Initiative 2016 (iTt 2016), Bertinoro, Italy, Sept 5-6 (2016).

- 4) Alexander Stroh, Davide Gatti, Yosuke Hasegawa, Bettina Frohnafel, “Influence of drag reducing turbulence control on spectral properties of Reynolds shear stress”, 11th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements (ETMM11), Sicily, Italy, Sept 21-23 (2016).

国際会議アブストラクト

- 1) Yosuke Hasegawa, Takao Suzuki, “Estimation of turbulent channel flow based on the wall measurement with a statistical approach” 69th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Portland, Oregon, USA, Nov. 20-22 (2016).
- 2) Qi Wang, Yosuke Hasegawa, Charles Meneveau, Tamer Zaki, “Adjoint-optimization algorithm for spatial reconstruction of a scalar source” 69th Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Portland, Oregon, USA, Nov. 20-22 (2016).

学会講演論文

- 1) 亀谷 幸憲, 長谷川 洋介:「高伝熱・低圧力損失のための随伴解析を用いた3次元伝熱面の形状最適化」第53回 日本伝熱シンポジウム, 大阪, 2016年5月24日～5月26日.
- 2) 三橋 史樹, 亀谷 幸憲, 中山雅敬, 長谷川 洋介:「毛細血管網の流れと物質輸送の数値シミュレーション」第53回 日本伝熱シンポジウム, 大阪, 2016年5月24日～5月26日.
- 3) 山口 裕吾, 大澤 崇行, 長谷川 洋介:「水-エタノール溶液滴の混合割合がマイクロ粒子堆積に与える影響」第53回 日本伝熱シンポジウム, 大阪, 2016年5月24日～5月26日.
- 4) 長谷川 洋介:「最適制御理論による熱流体工学の新展開」自動車技術会・流体技術部門講演会, 東京(東京大学生産技術研究所), 2016年6月17日.
- 5) 長谷川 洋介:「乱流工学における渦」渦の特徴づけ, 札幌(北海道大学), 2016年7月25～27日.
- 6) 亀谷 幸憲, 長谷川 洋介:「対流熱伝達と固体内熱伝導の連成問題における複雑伝熱面の形状最適化」日本流体力学会 年会 2016, 名古屋(名古屋工業大学), 2016年9月26日～9月28日.
- 7) 金子 完治, 府川 憲, 大澤 崇行, 亀谷 幸憲, 鈴木 宏明, 長谷川 洋介:「微量溶液混合を目的として旋回振動によるマイクロピラー周りの流れ場解析」, 日本流体力学会 年会 2016, 名古屋(名古屋工業大学), 2016年9月26日～9月28日.
- 8) 高木 健吾, 塚原 隆裕, 大澤 崇行, 長谷川 洋介:「共焦点顕微鏡を用いた液滴蒸発過程におけるマイクロ粒子の時空間分布計測」日本機械学会流体工学部門講演会, 宇部, 2016年11月12日-13日.

総説・解説

- 1) 岩本 薫, 福島 直哉, 長谷川 洋介, 深淵 康二:「積分的恒等式に基づく乱流伝熱の解析と制御」
伝熱, Vol. 55, No. 231, pp.1-8, 2016 年 4 月.
- 2) 長谷川 洋介:「壁乱流における伝熱及び運動量輸送の最適制御に関する研究」, ながれ, Vol.
35, No. 3, pp 201-206, 2016 年 6 月.

(2)研究プロジェクト

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) 「壁面吹き出し・吸い込み進行波による高熱伝達・低圧損制御」
- 3) 「ガスタービン冷却翼の形状最適化研究」

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)
- 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
「地熱発電技術研究開発/低温域の地熱資源有効活用のための小型バイナリー
発電システムの開発/水を作動媒体とする小型バイナリー発電の研究開発」(研究分担者)

革新的シミュレーション研究センター 平成 28 年度 活動報告 Vol. 9

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

