



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 29 年度
活動報告

Vol. 10

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。

革新的シミュレーション研究センター(CISS)は、平成 20 年 1 月に設置され、25 年 4 月に一度目の改組をし、平成 29 年度は改組後の 5 年目となります。さらに、平成 30 年 4 月に二度目の改組を実施し、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 30 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 29 年度 活動報告

Vol. 10

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) 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)	
(2) 他研究機関との連携	
(3) 教育活動	
1) 大学院講義「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」	
2) HPC産業利用スクール	
(4) 広報活動	
1) シンポジウム・セミナー等の開催・共催・後援	
2) 国内および海外への研究成果の展開	
3) ニュースレターの発行	
4) 新聞・マスコミ報道	
4. 各研究室の活動実績	29

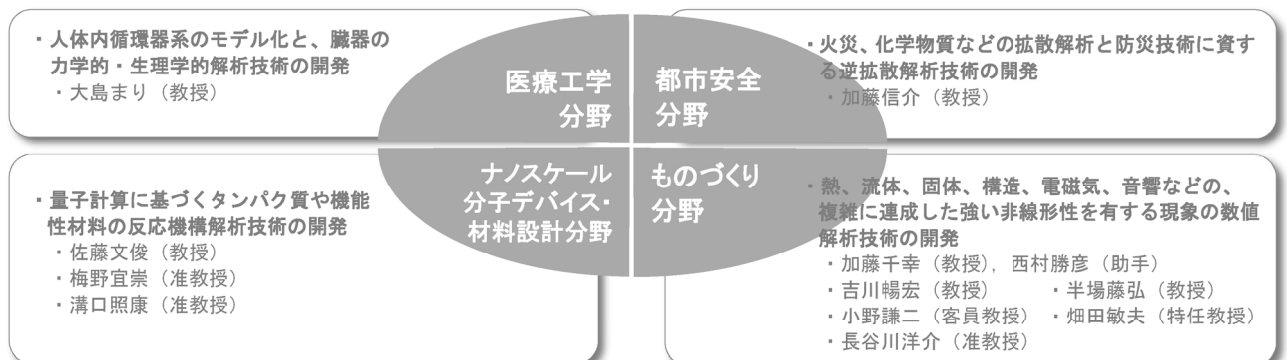
1. 革新的シミュレーション研究センターの概要

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

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

第 2 期 CISS では, 先端的シミュレーションソフトウェアの開発・利活用を担う研究者・技術者の育成を行ってきた実績を踏まえて, 我が国が保有する世界最速のス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抜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, また, 重点課題⑥革新的クリーンエネルギーシステムの実用化(実施期間: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

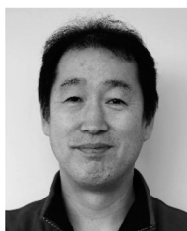
Fujihiro HAMBA, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 流体物理学

Fluid Physics



小野 謙二 客員教授

Kenji ONO, Visiting Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 大規模計算機工学

Large-scale computer engineering



畑田 敏夫 特任教授

Toshio HATADA, Project Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 プロジェクトマネジメント/知識ベースデジタルエンジニアリング

Knowledge-based Engineering./Project Management



梅野 宜崇 准教授

Yoshitaka UMENO, Associate Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 ナノ構造強度物性学

Nanostructured Materials Strength and Science



溝口 照康 准教授

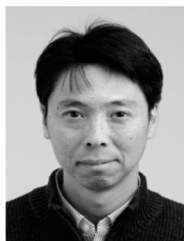
Teruyasu MIZOGUCHI, Associate Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 ナノ物質設計工学

Nano-Materials Design



長谷川 洋介 准教授

Yosuke HASEGAWA, Associate Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 界面輸送工学

Interfacial Transport Engineering



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]

近來社会における多様なニーズをとらえた付加価値の高いものづくりは、我が国の持続的成長を支える産業の発展に必要不可欠である。特にものづくりの上流における製品・技術コンセプトの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。本委託業務は、このような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と産業における戦力化を目的としている。

中核機関の国立大学法人東京大学は、分担参画機関の国立大学法人北海道大学、国立大学法人東北大学、国立大学法人神戸大学、国立大学法人広島大学、国立大学法人九州大学、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構、及び国立研究開発法人理化学研究所と密接に連携し、研究開発を実施している。昨年度から開始された本格実施期間の2年目にあたる平成29年度は、重点課題推進ワーキンググループで実施された中間評価に合わせて、課題全体の目的や進捗状況を自己点検し、その結果をもとに、最終年度である31年度末までに達成する成果目標をできるだけ定量的かつ明確に再定義した。また、当該年度にはすでに「京」が稼働を停止していることを念頭に、目標達成の確認方法を決定した。以下に詳述するように、各サブ課題は順調に進められており、また、ターゲットアプリケーション(Frontflow/blue(FFB))のコードザインの成果を、課題内の主要なアプリケーションであるCUBE(サブ課題B)、UPACS-Lite(サブ課題D)、およびFrontISTR(サブ課題E)へ展開しており、それぞれポスト「京」により高い実効性能が得られる目途が得られつつある。ターゲットアプリケーションを中心としたコードザインの成果に関しては、XXXを参照されたい。さらに、サブ課題間の連携を加速するために、自動車の空気抵抗を低減するための車両後方形状の最適化(サブ課題Aとサブ課題Bとの連携)、および小型ファンの性能・騒音の最適化(サブ課題Aとサブ課題Cとの連携)をそれぞれ平成30年度、平成31年度に実施することを決め、これらの実証研究を実施するための具体的な計画を策定した。以下に各サブ課題の主要な成果について記す。

[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。

平成 29 年度は，コアとなる要素技術等の研究開発，および，それらを実装したキラーアプリケーションのプロトタイプの開発・機能の検証を，以下の通り実施した。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

a) 多目的設計探索技術

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実問題をベースとしたテスト問題での評価に関しては，新規アルゴリズムの開発とその性能評価を，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実問題をベースとしたテスト問題での評価に関しては，テスト問題を使った各種手法の性能評価を，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。

b) 高速計算技術

b)-1 時間領域並列化法のプロトタイプアプリへの実装と性能評価に関しては，放物型方程式に対する高速化とフィーズフィールド法に対する適用を，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 アルゴリズムのプロトタイプアプリ性能評価に関しては，GPU 化と多ベクトルの実装評価を，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プロトタイプの実装に関しては，ワークフローの整備と試験評価を，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

スケーリング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。

平成 29 年度は、コアとなる要素技術等の研究開発、および、それらを実装したキラーアプリケーションのプロトタイプの開発・機能の検証を、以下の通り実施した。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

- a) 流体・構造統一連成解析手法の設計システムへの組み込みと車両空力を対象とした基礎検証に関しては、個体壁面取り扱いの統一化 (IBM (Immersed Boundary Method) 解法 (Open-shell, constraint, compressible 版) や VOF 法) を実装し、6 自由度レーンチェンジ空力解析やボンネット周り狭帯域音の直接解析等の基礎検証を、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システムのソルバークernelの高速化と IBM を用いた壁面モデルの構築に関しては、圧縮性ソルバーの加速・Adaptive Mesh Refinement・GPGPU 等のメニーコア環境での性能評価と実装を、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設計システムへの組み込みと振動構造解析を対象とした基礎検証に関しては、手法の陰解法化や Particle-in-cell 法による薄板構造のモデリングを、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。

平成 29 年度は、コアとなる要素技術等の研究開発、および、それらを実装したキラーアプリケーションのプロトタイプの開発・機能の検証を、以下の通り実施した。

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 ソルバー高速化技術の他の計算機アーキテクチャへの応用に関しては、FX100 や Skylake 搭載システムにおいて、FFB の実行性能測定を実施した。

- a)-2 ポスト京用高速化技術の開発に関しては、運動方程式の高速化等のチューニングを実施し、チューニングにより 1.9 倍、複数ベクトル適用により 4.7 倍(複数ベクトルとして 16 本の利用を仮定)の見込みを得た。
- 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 ターボ機械への適用のための圧縮性ソルバーの機能拡張に関しては、アルゴリズム検証用プログラムの開発、および、基礎的な流れでの計算精度検証を実施した。
 - 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開発および検証に関しては、境界層による現状の LES (Large Eddy Simulation)および壁面モデルの問題点を抽出し、モデル化の指針の検討を実施した。
- c) 格子ボルツマン法(LBM)による直接計算手法の研究開発
 - c)-1 実用問題への応用に関する検討に関しては、格子の完全自動生成機能の開発、および、基礎的な流れでの計算精度検証を、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の研究開発し、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・運航プロセス技術の研究開発する。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。

平成 29 年度は、コアとなる要素技術等の研究開発、および、それらを実装したカラーアプリケーションのプロトタイプの開発・機能の検証を、以下の通り実施した。

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基盤強化に関しては、LES (Large Eddy Simulation)壁面モデルの導入に向けて ImagePoint(IP)を用いた流束評価手法の開発を、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 LES 壁面モデルの実装法検討および安定・高精度な数値計算スキームの検討に関しては、構造格子ソルバーを用いて境界非適合格子に対する LES 壁面モデルの検討および非散逸且つ安定な圧縮性乱流解析スキームの開発を、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 高速バフエット/失速解析手法の検討と予備精度検証に関しては、構造格子ソルバーを用いて高速バフエット解析手法に開発した平衡壁面モデル LES が十分な予測精度を持つことの確認と失速解析の予備検証を、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)-2 離着陸時設計解析の基礎検討に関しては、離着陸時の最大揚力係数(C_{Lmax})予測に必要なとなる解析規模の概算見積もりを、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構が実施した。

c) 飛行安全性向上技術の研究開発

c)-1 非線形飛行力学基本モデルの構築に関しては、機体周りの流体力に応じた非線形飛行運動を記述するフレームワークの開発を、学校法人東京理科大学が実施した。

(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。

平成 29 年度は、コアとなる要素技術等の研究開発、および、それらを実装したキラーアプリケーションのプロトタイプの開発・機能の検証を、以下の通り実施した。

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の並列計算性能の評価に関しては、接触ペアが複数の分散領域メッシュに跨り存在するように領域分割できるようにし、数千万節点規模の問題に対する性能評価を実施した。

b) 並列領域分割法の並列計算性能の評価に関しては、様々な FrontISTR 入力ファイルの書式へ対応させ、数億節点規模の問題に対する性能評価を実施した。

c) 熱伝導・弾塑性変形の強連成解析手法の精度検証に関しては、ベンチマーク問題 (10 万節点規模モデル) に対する精度を、大阪大学接合科学研究所が開発している JWRIAN 熱弾塑性コードとの比較により、検証した。

d) プリポストの動作検証に関しては、溶接解析の機能 (溶接線、溶接条件の設定機能など) を拡張

し、その動作検証を実施した。

(サブ課題 F) マルチスケール熱可塑CFRP成形シミュレータの研究開発

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。

平成29年度は、コアとなる要素技術等の研究開発、および、それらを実装したキラーアプリケーションのプロトタイプの開発・機能の検証を、以下の通り実施した。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

- a) 初期プリプレグシート積層構成を正確に有限要素モデル化するメッシュャーの開発に関しては、実証試験で想定している部品レベルを対象に有限要素モデルメッシュャーの詳細設計を実施した。
- b) 接触大変形問題と熱伝導問題を強連成問題として解くアルゴリズムの開発に関しては、圧力を受ける樹脂単体の反り試験結果と解析結果との照合を通して近似接触条件下での検証を実施した。
- c) マクロスケール熱可塑成形シミュレータの開発に関しては、マクロモデル材料定数決定方法として複合則および複合則類似の解析的手法を熱伝導・結晶化度解析に適用し、マクロモデルとメゾモデルとの比較を通じた検証試験を実施した。

(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)、全体推進会議、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・調整にあたっている。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したりし、プロジェクトの効果的・効率的推進に資する施策を実施している。また、プロジェクトで得られたアプリケーション開発成果については、積極的に公開して、ものづくり産業での早期戦力化を図ることを支援している。

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—エネルギー革新技術計画」(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、研究開発を実施した。

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容器の開発を実施した。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った。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した。この方法論に基づ

いて、炭素繊維束の交差による応力集中を的確に評価し、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た。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となり、それらを設計変数とした高度な最適設計が可能となった。

[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)

東京大学にてすでに開発済みの 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なように改良し、FrontCOMP_damage と連携させてメゾスケール有限要素シミュレーションを実行可能にした。多給糸フィラメントワインディング容器のメゾスケールモデルを作成するための基本ツールを完成させた。

実容器のシミュレーションによる最適設計を可能とするためには、計算負荷の低い軸対称直交異方性連続体モデル化による解析が現実的である。多給糸フィラメントワインディングに対応可能な FrontCOMP_tank_MFW を開発し有限要素シミュレーションを実行可能にした。軸対称直交異方性連続体モデルであっても、繊維方向ひずみに注目することで破裂圧力と破裂モードを予測できることを確認した。予測結果に基づく、容器鏡部形状をパラメータとする最適設計手法を開発した。

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)

多給糸フィラメントワインディング技術の課題と対策案を検討するため、内容積 5L クラスの容器のタイプ3小型試験体を試作した。多給糸フィラメントワインディングの破裂圧向上に関する優位性を単給糸フィラメントワインディング容器との比較により明らかにした。多給糸フィラメントワインディングではヘリカル巻きの終端位置に関する自由度が高い。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多給糸ワインディング技術を開発し、CAM データを自動的に生成するソフトウェアを作成した。

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)

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 5L クラスの容器のタイプ 3 小型試験体容器の薄層ワインディング及び破裂試験を実施し、ヘリカル薄層巻きの条件と破壊メカニズムとの関係をほぼ推定可能とした。多給糸フィラメントワインディング技術特有の繊維束経路について、測地線経路を基準とした繊維配向角の数式表現を導出した。30L クラスの容器について経路の目標値と誤差を定量的に評価し誤差の傾向を明らかにした。

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)

常用圧力 45MPa、内容量 30L クラスのタイプ4容器の最適設計と製作を実施し、既往の単給糸フィラメントワインディング製法によるタイプ3容器に比して十分な軽量化(35%の炭素繊維の削減)が可能であることを実証した。

(2) 他研究機関との連携

国立研究開発法人理化学研究所

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」(通称, ポスト「京」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主要なアプリケーションプログラムにおいて, 最大「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, 9 つの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「近未来型も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 29 年度は, 平成 28 年度に引き続き, コデザインにより詳細設計パラメータなどが決定されたポスト「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, ポスト「京」における実効性能の予測精度を向上させるために, 計算機の挙動をアセンブラ言語レベルで忠実に再現できるシミュレータを用いた評価を開始している。また, 前述のとおり, 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 1.9 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, 複数のケースを同時に解くことにより演算器の利用効率を向上させるように, 計算アルゴリズムの抜本的な改良を進め, 約 4.7 倍(16 ケースを同時に解いた場合を仮定)の高速化を達成できる目途が得られた。これらは予測値であるが, 現在はポスト「京」のコンパイラならびに前記の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, 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、2017 年度現在 9 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、2017 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 において優秀賞を受賞した。

以上のように、引き続きシミュレーションソフトウェア開発者人材育成に貢献した。

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.
- ・居駒幹夫, “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.19, No.5, 2017 年 9 月.
- ・第 9 回 情報システム教育コンテスト (ISECON2016) については、以下を参照：
<http://miyagawa.si.aoyama.ac.jp/wiki/isecon2016>

(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 3 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

ポスト「京」重点課題⑧の最新の成果を報告し、最終成果目標達成に向けた工程、および開発したアプリケーションの実用化の方策について議論し、開発されるアプリケーションを実用性の高いものにする事を狙いとして開催した。

開催日：平成 30 年 3 月 15 日(木) 10:00～17:20

場 所：東京大学生産技術研究所 コンベンションホール(An 棟 2 階)

主 催：東京大学生産技術研究所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：251 名

資料作成：予稿集 101 頁, 別添 34 頁

○プログラム

(司会 東京大学生産技術研究所 教授 吉川 暢宏)

- | | |
|-------------|---|
| 10:00-10:15 | 開会の挨拶 |
| 澤田 和宏 | 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
参事官補佐 |
| 志村 努 | 東京大学生産技術研究所 副所長 |
| 10:15-10:45 | 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 |
| 10:45-11:15 | 招待講演 |
| | 「数値曳航水槽の実現に向けて」 |
| 西川 達雄 | 一般財団法人日本造船技術センター 課長 |

I. 次世代最適化・高速化技術開発戦略

11:15-12:00 (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

「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」

小野 謙二 九州大学 情報基盤研究開発センター 教授

「自動車業界における設計初期段階で求められる設計手法の変化」

小平 剛央 マツダ株式会社 技術研究所 先進ヒューマン・ビークル研究部門
アシスタントマネージャー

(司会 九州大学 情報基盤研究開発センター 教授 小野謙二)

II. 次世代 CFD ソルバー開発戦略

13:15-14:00 (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」

坪倉 誠 神戸大学大学院 システム情報学研究所 教授

「空力解析の開発現場での現状とリアルタイム・リアルワールド自動車統合設計システムへの期待」

安藤 裕啓 スズキ株式会社 四輪ボディー設計部 第五設計課

「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-自動車構造 CAE の観点から-」

檜山 武 スズキ株式会社 環境・材料・生産技術開発部 第3課 専門職

14:00-14:45 (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

「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

「(社)ターボ機械協会「HPC 実用化分科会」進捗報告」

渡邊 啓悦 株式会社荏原製作所 風水力機械カンパニー 技術開発統括部 技術開発部長

14:45-15:30 (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

「航空機実機実飛行環境における空力特性評価技術の実現に向けて」

高木 亮治 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授

「航空機空力設計現場からのポスト「京」で実現されるコア技術への期待」

前田 一郎 三菱航空機株式会社 技術本部 機体設計部 フライトダイナミクスグループ
主席技師

(司会 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 講師 橋本 学)

III. 次世代材料・構造ソルバー開発戦略

15:45-16:30 (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」

奥田 洋司 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授

「溶接シミュレーション技術の現状と課題」

高倉 大典 株式会社 IHI 解析技術部 課長

16:30-17:15 (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

「ミクロからマクロへ」

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

17:15-17:20 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 33 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 ―環境制御と流れの解析―

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 33 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 30 年 3 月 5 日(月) 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:40 名

○プログラム

9:45 開会の挨拶 大岡龍三(東京大学)

9:50～11:50 セッション 1 司会 大岡龍三(東京大学)

基調講演「無限大の断熱性能を実現するダイナミックシミュレーション」

加藤信介(東京大学)

Simulation of Friction Velocity on Roof Surfaces using LES and Wind Tunnel Test method

Xuanyi Zhou, Gongbo Zu, Ming Gu, Jinhai Hu (Tongji University)

LES による歩行者風環境評価のための流入変動風の試作

大風翼(東京工業大学), 持田灯(東北大学)

13:30～15:30 セッション 2 司会 北澤大輔(東京大学)

室内等温流れの LES における格子ボルツマン法の検証

韓夢濤, 大岡龍三, 菊本英紀(東京大学)

LES を用いた都市キャニオン形状がレイノルズストレスモデリングに与える影響に関する検討

中島慶悟, 大岡龍三, 菊本英紀(東京大学)

Reynolds 応力の平方根テンソルに基づく実現性条件を満たす乱流モデリング

稲垣和寛, 有木健人(名古屋大学), 半場藤弘(東京大学)

乱流伝熱面の形状最適化と 3D プリンタを用いた実証実験

亀谷幸憲, 福田豊, 大澤崇行, 長谷川洋介(東京大学)

15:50～17:20 セッション 3 司会 加藤千幸(東京大学)

逆圧力勾配境界層乱流の大規模直接数値計算とスケーリング

関本敦(大阪大学), Vassili Kitsios(CSIRO), Callum Atkinson, Soria Julio (Monash University)

剥離・再付着を伴う乱流境界層の DNS:レイノルズ数・圧力勾配の影響の検討

阿部浩幸(JAXA)

壁面情報を用いた壁乱流状態推定に関する研究

長谷川洋介(東京大学), 佐々木崇夫(前職・福井大学)

b) ワークショップ

ポスト「京」重点課題⑧・重点課題⑥ HPC ものづくり統合ワークショップ

近未来のものづくりには高度な知識に基づく科学技術イノベーションの継続的創出が不可欠であり、「京」やポスト「京」といった最先端スパコンを駆使することによって得られる知見の重要性が増している。

これを踏まえ、成果の効果的展開や有用なアプリケーション機能の見極め等に資する、研究機関、産業界の専門家集団による「HPCシミュレーション技術」に関する技術的議論の場としての、技術部門別ワークショップ(熱・流体・構造連成部門、材料・構造・信頼性部門)を開催した。

開催日：平成29年9月12日(火)10:00~17:35

場所：東京大学生産技術研究所 An 棟4階セミナー室

(A1 セッション:An401-402, A2 セッション:An403, B セッション:An401-402)

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：東京大学大学院工学系研究科 ポスト「京」重点課題⑥プロジェクト

協力：スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

参加者数：A1 セッション 44 名, A2 セッション 26 名, B セッション 50 名

資料作成：A1 セッション予稿集 91 頁, A2 セッション予稿集 94 頁, B セッション予稿集 54 頁

○プログラム

●A1. 熱・流体・構造連成セッション

(司会 河合 宗司 東北大学大学院工学研究科 准教授)

10:00-10:05 開会の挨拶

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 センター長・教授/課題⑧責任者

I. 物体形状の取り扱い

10:05-10:35 BCM における Dirty CAD データの取り扱いについて

大西 慶治 理化学研究所計算科学研究機構 特別研究員

10:35-11:05 LBM ベースの流体解析システム FFX の開発

山出 吉伸 みずほ情報総研株式会社 シニアコンサルタント

11:05-11:35 航空機実機詳細形状の解析実現に向けた取り組み

高木 亮治 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 准教授

11:35-12:05 圧縮性流体解析ソルバーUTCart の概要と壁面境界条件について

今村 太郎 東京大学大学院工学系研究科 准教授

(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)

II. 流体・構造・音響連成

13:20-13:50 オイラー解析に基づく流体構造統一解法について

西口 浩司 理化学研究所計算科学研究機構 特別研究員

13:50-14:20 並列計算機環境における汎用的な流体構造連成解析技術

吉村 忍 東京大学大学院工学系研究科 副学長・教授

III. LES 壁モデル

14:20-14:50 航空機フライトレイノルズ数・圧縮性流れの LES

河合 宗司 東北大学大学院工学研究科 准教授

14:50-15:20 乱流渦構造に基づく LES 壁面モデルの開発

鵜沢 憲 東京大学生産技術研究所 特任研究員

●A2. 材料・構造・信頼性セッション

(司会 奥田 洋司 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授)

10:00-10:05 開会の挨拶

吉川 暢宏 東京大学生産技術研究所 副センター長・教授

10:05-10:45 製造シミュレーションの課題への取組みと HPC 活用の期待
高野 直樹 慶応義塾大学理工学部 教授

I. CFRP 成形シミュレーション

10:45-11:15 マルチフィジックス・マルチスケールを考慮した CFRP 成形シミュレーション技術の紹介
西 正人 株式会社 JSOL チームマネジャー
11:15-11:45 弾塑性材料特性を考慮した CFRP 成形シミュレーション
柚木 和徳 サイバネットシステムズ株式会社
11:45-12:15 熱可塑 CFRP 材料のマルチスケール成形シミュレーション
吉川 暢宏 東京大学生産技術研究所 副センター長・教授

(司会 吉川 暢宏 東京大学生産技術研究所 副センター長・教授)

II. 溶接シミュレーション

13:20-13:50 溶接シミュレーションの革新と産業への展開
河原 充 大阪府立大学 プロジェクト研究教員
13:50-14:20 溶接解析の産業利用の現状と課題
功刀 厚志 株式会社 JSOL
14:20-14:50 溶接シミュレーションに適した大規模解析手法の検討
遊佐 泰紀 東京理科大学理工学部機械工学科 助教
14:50-15:20 FrontISTR の展開 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一要素機能の紹介—
奥田 洋司 東京大学大学院新領域創成研究科 教授

●B. 合同セッション

(司会 井戸村 泰宏 日本原子力研究開発機構システム計算科学センター 研究主幹)

15:30-15:50 スーパーコンピュータ「京」上での FrontFlow/blue の性能チューニング
熊畑 清 理化学研究所計算科学研究機構 開発研究員
15:50-16:10 構造格子系プログラムによる PRIMEHPC FX100 の特性評価と高速化
高木 亮治 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 准教授
16:10-16:30 非構造格子系プログラム FrontISTR における疎行列・ベクトル積ベンチマーク
奥田 洋司 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授
(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)
16:30-16:50 メニーコア環境における核融合プラズマ乱流シミュレーションの高速化
井戸村 泰宏 日本原子力研究開発機構システム計算科学センター 研究主幹
16:50-17:10 OakForest-PACS 上での FMO 計算プログラム ABINIT-MP のパフォーマンス
望月 祐志 立教大学理学部化学科 教授
17:10-17:30 フラッグシップ 2020 プロジェクトについて
南 一生 理化学研究所計算科学研究機構 チームヘッド
17:30-17:35 閉会の挨拶
畑田 敏夫 東京大学生産技術研究所 特任教授

c) 研究会

LES 研究会

さまざまな分野の研究者が集まり LES のモデルや計算法などの情報交換を行う場として、2008 年 9 月に LES 研究会が発足。現在 2 ヶ月に 1 回、東京大学生産技術研究所にて研究会を開催している。

第 45 回 LES 研究会

日時 2017 年 5 月 9 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)

「電磁流体乱流の SGS モデル」

半場 藤弘(東京大学生産技術研究所)

「高温プラズマ実験装置"LHD"中の圧力駆動型不安定性・非線形飽和のラージ・エディ・シミュレーション」

三浦 英昭(自然科学研究機構 核融合科学研究所)

第 46 回 LES 研究会

日時 2017 年 7 月 14 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)

「格子幅自己認識型 SGS 応力及び SGS 燃焼モデル」

店橋 護(東京工業大学)

「Immersed boundary 法を用いたレシプロエンジン用圧縮性 LES ソルバの研究開発」

南部 太介(宇宙航空研究開発機構)

第 47 回 LES 研究会

日時 2017 年 9 月 12 日(火) 14:00-17:00

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

「剥離・再付着を伴う乱流境界層の DNS とモデリング」

阿部 浩幸(宇宙航空研究開発機構)

「乱流応力輸送における回転およびヘリシティの効果」

稲垣 和寛(東京大学生産技術研究所)

第 48 回 LES 研究会

日時 2017 年 11 月 10 日(金) 14:00-17:00

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

「高解像街区スケールシミュレーションによる暑熱環境解析」

焼野 藍子(東北大学流体科学研究所)

「非一様な森林配置が大気接地層の抗力係数に与える影響」

中尾 圭佑(電力中央研究所)

第 49 回 LES 研究会

日時 2018 年 1 月 9 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)

「LES を用いた様々なアスペクト比・大気安定度の都市キャニオンにおける乱流フラックスのモデル化に関する検討」

中島 慶悟(東京大学生産技術研究所)

「Cumulant LBM モデルおよび適合細分化格子法による汚染物質の拡散解析の高速化」

小野寺 直幸(日本原子力研究開発機構)

d) セミナー・講習会

第 8 回 クラウドコンピュータを利用した設計実務セミナー 複雑現象統一解析コード『CUBE』編

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、複雑現象統一解析コード『CUBE』の設計実務セミナーを開催した。今回は、車体空力解析モデルを題材に、『CUBE』による自動格子生成と流れ解析から、『FieldView16』による大規模解析可視化、『Sculptor V3.7』による形状最適化までの CFD 設計実務の一連の作業の実習を実施した。東京大学生産技術研究所スパコンと会場の PC の間には、Windows 知識でスパコンを利用できるクラウドコンピュータ利用支援システム『CCNV』を利用して接続した。

開催日： 平成 29 年 6 月 30 日(金) 10:00-17:10

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： 18 名

第 8 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 8 回目の基礎編の利用講習会を開催した。

開催日： 平成 29 年 6 月 30 日(金) 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： 6 名

第 9 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 9 回目の基礎編の利用講習会を開催した。

開催日： 平成 29 年 12 月 13 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： 18 名

e) 共催・後援・その他

KOBE HPC Summer School 2017

開催日： 平成 29 年 9 月 4 日(月) ～ 9 月 8 日(金)

場 所: 兵庫県立大学大学院応用情報科学研究科 624 実習室(神戸市ポートアイランド内)
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 2018

開 催 日: 平成 30 年 3 月 14 日(水) ~ 3 月 16 日(金)
場 所: 神戸大学計算科学教育センター セミナー室 208
共 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

第 8 回 AICS 国際シンポジウム

開 催 日: 平成 30 年 2 月 7 日(水)~8 日(木)
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 2017

開 催 日: 平成 29 年 11 月 20 日(月)
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,
ポスト京重点課題 6「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」サブ課題 B

第 35 回 FrontISTR 研究会

開 催 日: 平成 29 年 4 月 28 日(金)
場 所: 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 222 中会議室
主 催: FrontISTR 研究会

第 36 回 FrontISTR 研究会

開 催 日: 平成 29 年 6 月 9 日(金)
場 所: 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 85 講義室
主 催: FrontISTR 研究会

第 37 回 FrontISTR 研究会

開 催 日: 平成 29 年 7 月 10 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 38 回 FrontISTR 研究会

開 催 日: 平成 29 年 8 月 21 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 39 回 FrontISTR 研究会

開 催 日: 平成 29 年 11 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 40 回 FrontISTR 研究会

開 催 日: 平成 29 年 12 月 22 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 41 回 FrontISTR 研究会

開 催 日: 平成 30 年 2 月 5 日(月)
場 所: 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 502 教室
主 催: FrontISTR 研究会

第 42 回 FrontISTR 研究会

開 催 日: 平成 30 年 3 月 16 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 8 回 HPC ものづくりワークショップ

開 催 日: 平成 29 年 6 月 15 日(木) 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 10 回トップセミナー ～ビジネスチャンスを生出し産業の未来を拓くスーパーコンピュータ～

開 催 日: 平成 30 年 2 月 2 日(金)
場 所: グランフロント大阪北館タワーC 8 階 ナレッジキャピタルカンファレンスルーム
主 催: 公益財団法人計算科学振興財団

見える化シンポジウム 2018「シミュレーションの可視化の未来～計算科学ミュージアム実現に向けて～」

開 催 日: 平成 30 年 2 月 24 日(土)
場 所: 東京・日本橋ライフサイエンスハブ
主 催: 国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構

第 9 回 HPC ものづくりワークショップ

開催日： 平成 30 年 2 月 23 日(金) 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 10 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 29 年 12 月 13 日(水) 13:00～17:30
場 所： トラストシティ カンファレンス・丸の内
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 2017

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、ものづくりに関する動画を放映し、重点課題⑧の概要およびサブ課題ごとの解決に向けた取組、成果等の展示紹介ならびにパンフレットの配布を行った。

開催日： 平成 29 年 9 月 7 日(木)・8 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 神戸キャンパス一般公開

重点課題⑧のプロジェクトを推進する代表機関として「神戸スパコンシミュレーション王国」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 29 年 10 月 14 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

合同開催：HPCI コンソーシアム国際シンポジウム

研究開発したソフトウェアの紹介として、ポスターで研究成果の展示を行った。

開催日： 平成 29 年 11 月 2 日(木)
場 所： コクヨホール

SC17

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、ポスターで研究成果の展示を行った。

開催日： 平成 29 年 11 月 12 日(日)～17 日(金)
場 所： 米国 コロラド州デンバー コロラドコンベンションセンター

3) ニュースレターの発行

本センターの成果を広く公開し、最新の取組みを紹介する目的で、CISS NEWS を発行している。

今年度は Vol. 25 号, Vol. 26 号を発行した。

(1) Vol. 25 号

発行日：平成 29 年 6 月

発行部数：800 部

内容：1 面	巻頭言 ポスト「京」重点課題プロジェクトは順調に推進、成果目標の達成に向けアプリケーションの研究開発を加速
2 面－3 面	第 2 回ポスト「京」重点課題⑧シンポジウム『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』開催報告
4 面－5 面	センター所属メンバー研究紹介
6 面	活動報告およびイベント開催案内

(2) Vol. 26 号

発行日：平成 30 年 1 月

発行部数：1,000 部

内容：1 面	巻頭言 プロジェクト期間の半ばを迎えたポスト「京」重点課題⑧ 目標達成に向けた工程や成果の実用化方策を明確にし、研究開発を推進
2 面－3 面	ポスト「京」重点課題⑧ 概要紹介
4 面	ポスト「京」重点課題⑧・重点課題⑥第 1 回 HPC ものづくりワークショップ開催報告
5 面	SC2017 Report
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) 「関西エレクトロニクス産業特集 スパコン「京」 日本の産業界で広く利用 共用開始から 194 社利用」平成 29 年 9 月 27 日(水), 電波新聞(朝刊) 24 面
- (2) 「IoT や IT ブースも盛況 神戸の産業展で」平成 29 年 9 月 30 日(土), 日本物流新聞 16 面
- (3) 「界面構造、1秒で計算」平成 29 年 11 月 16 日(木), 日刊工業新聞
- (4) 「界面構造解析に AI 活用」平成 29 年 11 月 17 日(金), 化学工業日報 朝刊 7 面
- (5) 「液体原子 個々に観察」平成 29 年 12 月 18 日(月), 日刊工業新聞
- (6) 「液体中の原子運動可視化」平成 29 年 12 月 21 日(木), 化学工業日報 朝刊 6 面
- (7) 「SC17 展示会場で注目を集めた日本の大学/研究機関」平成 30 年 1 月 22 日(月), マイナビニュース
- (8) 「増える連携、未来への工程示す」平成 30 年 3 月 16 日(金), 日刊工業新聞 16 面

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。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。キャビティ流れや角柱まわりの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。また、ウインドファームのような流れを対象にすると、風車ブレード上に発達する渦の空間スケールから風車間の空間スケールの間に 8 桁の開きがあり、Wall Resolved LES 計算は困難であることから、FFB に Wall Model を実装した。

(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 LES 計算を実施するとともに、風洞実験も行い翼後流の積分長さスケールを計測し、その特性を調べた。

(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 29 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れ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 29 年度は特に自然現象でみられるような流入風が車体のスケールに近い範囲で変動するときに、変動流入風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、多翼ファンに対して性能・騒音の検証用データを取得した。また、ワークグループ内でボックスファン、および多翼ファンを対象にベンチマーク計算をし、ボックスファンでは RANS 計算、LES 計算ともに、失速後の動作点における静圧上昇を過小評価する傾向や、多翼ファンでは、静圧上昇を過大評価するが、音場を良好に予測できるなどの傾向が得られた。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Osamu Akiyama, Chisachi Kato: Numerical Investigations of Unsteady Flows and Particle Behavior in a Cyclone Separator, Journal of Fluids Engineering, September 2017, Volume139, pp.091302-1-091302-11, Paper No: FE-16-1368; doi: 10.1115/1.4036589.

和文論文

- 1) 萩谷 功, 加藤 千幸, 山出 吉伸, 深谷 征史, 長原 孝英: 不安定特性発生時の斜流ポンプ動翼内部流れの時間変化, 日本機械学会論文集, 84 巻 (2018), 857 号, pp. 17-00363.

国際会議予稿集

- 1) Chisachi Kato: APPLICATIONS OF VERY LARGE SCALE FLUID-FLOW COMPUTATIONS TO

INDUSTRIAL PROBLEMS, 1st. AWG-IAHR Symposium on Hydraulic Machinery and Systems, 2017.11.16-19, 精華大学(北京).

国際会議アブストラクト

- 1) Chisachi Kato: APPLICATIONS OF VERY LARGE SCALE FLUID-FLOW COMPUTATIONS TO INDUSTRIAL PROBLEMS, Mechanics Days, 2017.10.4., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne.

学会講演論文

- 1) 加藤千幸:大規模数値解析の産業利用の現状と将来展望, 文部科学省「風と流れのプラットフォーム」および「ポスト京」課題6Cの合同シンポジウム, 2017.2.27, 九州大学応用力学研究所.
- 2) 加藤千幸:青年消費者問題研究会, 2017.7.21, 主婦会館プラザエフ(四ツ谷), スーパーコンピュータによるシミュレーションの現状と今後の展望.
- 3) 加藤千幸:スパコン京によるシミュレーション, 第23回流れのふしぎ展, 2017.8.18. 日本科学未来館.
- 4) 加藤千幸: APPLICATIONS OF VERY LARGE SCALE FLUID-FLOW COMPUTATIONS TO INDUSTRIAL PROBLEMS, VINAS Users Conference 2017, 2017.10.12. 東京コンファレンスセンター品川.
- 5) 加藤千幸:大規模流体解析コードの開発と最新CPUによるコードの実行性能の検証, 計算科学技術革新セミナー, 2017.10.13, 秋葉原UDXカンファレンス.
- 6) Kiyoshi Kumahata, Kazuo Minami, Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato: Performance improvement of the general-purpose CFD code FrontFlow/blue on the K computer, HPC Asia 2018, 2018.1.28-31, 秋葉原UDXカンファレンス.

総説・解説

- 1) 加藤千幸:流体音の発生原理と数値解析, 日本騒音制御工学会誌「騒音制御」Vol. 41, No. 2 (2017), pp. 55-63.
- 2) 加藤千幸, 山出吉伸: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, 計算工学ナビvol. 12, pp. 4.
- 3) 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), 日本機械学会誌2017.11第120巻第1188号, pp.16-19.

(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 29 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

連続体力学の枠組みでの応力解析法としての有限要素法は、均質・等方性材料とみなせる金属部材からなる機械・構造物の強度評価に多大な貢献をしてきた。応力規準による強度モデルを実験的に構築し得たことがその主因であったが、炭素繊維強化プラスチック(Carbon Fiber Reinforced Plastic, CFRP)に代表される非均質性が顕在化する複合材料に対しては、強度モデルが確立されておらず、実用化には多大な労力と時間を要する。ボーイング 787 の CFRP 製機体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することで、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ものと考えている。

(2) 超高压水素容器の開発

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開発している。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 製ジェットエンジンファンブレードの開発

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開発した。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。CFRP 材料を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) Yusuke Hara, Mana Sato, Yoshinori Shiihara, Nobuhiro Yoshikawa, Tetsuji Hirao and Ichiro Iwai: Involvement of Stratum Corneum in Initial Residual Wrinkle Formation Induced by Facial Expression, August 2017, IFSCC Magazine, Vol. 20, pp.15-22.
- 2) Yoshihiko Hangai, Kousuke Zushida, Hidetoshi Fujii, Osamu Kuwazuru and Nobuhiro Yoshikawa: Fabrication and compression properties of functionally graded copper foam made using friction powder sintering and dissolution, September 2017, Journal of Materials Engineering and Performance, Volume 26(9), pp. 4508–4513.
- 3) Qi Wu, Tomotaka Ogasawara, Nobuhiro Yoshikawa, and Hongzhou Zhai: Modeling the viscoelasticity of polyetherimide, February 2018, Journal of Applied Polymer Science, 135(15), 46102, DOI: 10.1002/app.46102.
- 4) Yoshihiko Hangai, Shunsuke Otazawa, Takao Utsunomiya, Ryosuke Suzuki, Shinji Koyama, Masaaki Matsubara, Nobuhiro Yoshikawa: Fabrication of bilayer tube consisting of outer aluminum foam tube and inner dense aluminum tube by friction stir back extrusion, February 2018, Materials Today Communications, 15, pp. 36–42.
- 5) Qi Wu, Tomotaka Ogasawara, Nobuhiro Yoshikawa, and Hongzhou Zhai: Stress Evolution of Amorphous Thermoplastic Plate during Forming Process, March 2018, Materials, 11(4): page No: 464.

和文論文

- 1) 半谷禎彦, 須藤俊, 宇都宮登雄, 川島久宣, 桑水流理, 吉川暢宏: 気孔形態を傾斜的に変化させたポーラスアルミニウムの衝撃圧縮特性, 2017年11月, 軽金属, Vol.67, No.11, pp.576-581.
- 2) 半谷禎彦, 小林龍聖, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏: アルミニウムチップからFriction Stir Back Extrusionにより作製したアルミニウムパイプ, 2018年2月, 日本金属学会誌, 第82巻, 第2号, pp. 33-38.

国際会議アブストラクト

- 1) Qi Wu, Tomotaka Ogasawara, and Nobuhiro Yeshikawa: Modeling of the Resin Viscoelasticity in the Forming Process of Thermoplastic composites, August 2017, 21st International Conference on Composite Materials, paper ID: 3171.

学会講演論文

- 1) 小笠原朋隆, 吉川暢宏, 呉奇: FrontCOMP_cureによるCFRPの熱硬化プロセスシミュレーション, 2017年5月, 計算工学講演会論文集, Vol.22, G-02-3.
- 2) 李 然, 吉川暢宏: メゾスケールシミュレーションによるType IV 高圧水素容器の破裂圧の予測, 2017年10月, [No.17-5] 日本機械学会M&M2017 材料力学カンファレンス 講演論文集, pp.1423-1425.
- 3) キム サンウォン, 吉川暢宏: CFRP製TypeIII蓄圧器の疲労強度評価法, 2017年10月, [No.17-5] 日本機械学会M&M2017 材料力学カンファレンス 講演論文集, pp.1426-1428.

(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3)
- 3) 高断熱性ポーラス Al/Al パイプの開発

受託研究

①公的資金

- 1) (独)新エネルギー・産業技術総合開発機構「複合圧力容器蓄圧器の基準整備等に関する研究開発」
- 2) (独)新エネルギー・産業技術総合開発機構「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) Wonseok Oh, Shinsuke Kato: Study on the effects of evaporation and condensation on the underfloor space of Japanese detached houses using CFD analysis, June 2017, Energies, Volume 10, Issue 6, No. 798.
- 2) Shengwei Zhu, Daniel Dalgo, Jelena Srebric, Shinsuke Kato: Cooling efficiency of a spot-type personalized air-conditioner, August 2017, Building and Environment, Vol. 121, pp. 35–48.
- 3) Masamichi Oura, Ryohji Ohba, Alan Robins, Shinsuke Kato: Validation Study for an Atmospheric Dispersion Model, Using Effective Source Heights Determined from Wind Tunnel Experiments in Nuclear Safety Analysis, March 2018, Atmosphere, Volume 9, Issue 3, No. 111.

和文論文

- 1) 大森敏明, 加藤信介, 金敏植, 糠塚重裕:戸建て住宅モデルを対象とした空間線量の予測ー建物内放射線量の簡易計算法(その2)ー, 2017.5, 日本建築学会環境系論文集, 82巻, 735号, pp.481-489.
- 2) 永野秀明, 田ノ上康弘, 郡逸平, 加藤信介:車室内標準モデルを用いた車室内環境予測に関する研究ー室内温熱環境形成寄与率を用いた乗員等価温度予測手法の構築ー, 2018.1, 自動車技術会論文集, 49巻, 1号, pp.82-88.
- 3) 大浦理路, 金敏植, 大場良二, 加藤信介:大気汚染物質の放出量推定における精度向上に関する研究, 2018.2, 日本建築学会環境系論文集, 83巻, 744号, pp.171-181.

国際会議アブストラクト

- 1) Kana Hasebe, Shinsuke Kato, U Yanagi, Hideaki Nagano, Shigeo Matsuno, Yudai Takahashi: Establishing quantitative evaluation method of contact infection risk using a qPCR method, September 2017, Healthy Buildings, pp.356-361.
- 2) Shinsuke Kato: Measuring Method Of Reducing Effect Of Pollutant Concentration With Absorptive Building Material, November 2017, ICAT-MCIE.

学会講演論文

- 1) 呉元錫, 加藤信介: 気流方向と人の姿勢が人体各部位の対流熱伝達率に及ぼす影響の検討,

2017.9, 日本建築学会大会.

- 2) 大浦豊, 朝岡幸康, 森勝彦, 加藤信介, 趙旺熙: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(その1) ダイナミックインシュレーション窓システムの熱性能, 2017.9, 日本建築学会大会.
- 3) 朝岡幸康, 大浦豊, 森勝彦, 加藤信介, 趙旺熙: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(その2) DI窓システムの性能評価装置と性能評価結果, 2017.9, 日本建築学会大会.
- 4) 二川智吏, 加藤信介, 河原大輔, 手塚純一:ダイナミック・ストレージ・システムを適用した住宅(その2) 通気による熱回収機能を持った外壁の実物件への適用に関する検証, 2017.9, 日本建築学会大会.
- 5) 加藤信介, 柳宇, 永野秀明, 伊藤一秀, 山中俊夫, 小林光, 羽山広文:建築環境における呼吸器系病原体モニタリング法の確立に関する研究 その1 マイクロバイオーム解析に基づく室内環境モニタリングの意義, 2017.9, 日本建築学会大会.
- 6) 柳宇, 加藤信介, 永野秀明, 伊藤一秀, 山中俊夫, 小林光, 羽山広文:建築環境における呼吸器系病原体モニタリング法の確立に関する研究 その2 KG大学研究室におけるマイクロバイオームの調査結果, 2017.9, 日本建築学会大会.
- 7) 高橋雄大, 加藤信介, 柳宇, 永野秀明, 長谷部花奈, 松野重夫:大学研究室における人と室内環境のマイクロバイオームの変動特性の検討, 2017.9, 日本建築学会大会.
- 8) 長谷部花奈, 加藤信介, 柳宇, 永野秀明, 高橋雄大, 松野重夫:遺伝子解析技術を用いる接触感染リスクの定量的評価手法の開発 手のひらの細菌採取率と接触による細菌伝播率の検討, 2017.9, 日本建築学会大会.
- 9) 瀬戸啓太, 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オームの実態の解明に関する研究 第3報 冬期と夏期における細菌叢の比較, 2017.9, 日本建築学会大会.
- 10) 王立, 加藤信介:吸脱着効果を考慮した室内化学物質空気汚染の空間分布・時間変動特性に関する研究 -CO₂濃度による換気量制御を行う室内へのネットワークモデル計算へのCRIの組み込み-, 2017.9, 日本建築学会大会.
- 11) Kana Hasebe, Shinsuke Kato, U Yanagi, Hideaki Nagano, Kazuhide Ito, Toshio Yamanaka, Hikaru Kobayashi, Toshio Yamanaka, Hikaru Kobayashi, Hirofumi Hayama, Shigeo Matsuno:Establishing quantitative evaluation method of contact infection risk using qPCR method: Difference of bacteria collection rate depends on the moisture condition, 2017.9, 空気調和衛生・工学会平成29年度大会.
- 12) 田ノ上康弘, 永野秀明, 加藤信介, 間島裕大, 小野太郎:非等温車室内の熱伝達性状の把握 (第3報)室内温熱環境形成寄与率(CRI)を用いた温度予測精度の検証, 2017.9, 空気調和衛生・工学会平成29年度大会.
- 13) 藤井結那, 柳宇, 永野秀明, 加藤信介:医療施設におけるマイクロバイオームの実態とその対策方法に関する研究 第1報 待合室内マイクロバイオームの実態把握, 2017.9, 空気調和衛生・工

学会平成29年度大会.

- 14) 光岡眞知子, 柳宇, 藤井結那, 永野秀明, 加藤信介:医療施設におけるマイクロバイオームの実態とその対策方法に関する研究 第2報 諸環境とのマイクロバイオームの比較, 2017.9, 空気調和衛生・工学会平成29年度大会.
- 15) 畑中未来, 柳宇, 藤井結那, 永野秀明, 加藤信介:学校環境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2報 秋季における細菌叢と室内環境の関連性, 2017.9, 空気調和衛生・工学会平成29年度大会.
- 16) 瀬戸啓太, 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オームの実態の解明に関する研究 第4報—2016年の調査における中央空調方式と個別空調方式の比較, 2017.9, 空気調和衛生・工学会平成29年度大会.

総説・解説

- 1) 加藤信介, 村澤達, 宮越幸一:建築設備会社の海外への技術展開に関するアンケート, 2017.5, 空気調和・衛生工学, 91巻, 5号, pp.365-373.
- 2) 加藤信介, 魚住昌広, 黒澤正志, 斉藤禎二, 中川勝弘, 馬瀬英成, 谷口勝則, 山本一博, 森良一, 赤司泰義:第5回カーボンニュートラル賞選考結果報告, 2017.7, 建築設備士, 49巻, 7号, pp. 26-33.
- 3) 加藤信介:人体周辺の微気象を考慮する室内空調, 2017.10, バムサジャーナル, 29巻, 4号, pp.175-182.
- 4) 加藤信介:将来の空調ニーズの広がり, 2017.10, 空気調和・衛生工学, 91巻, 10号, pp.1019-1025.

(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) 挑戦的開拓研究「建築環境マイクロバイオームの実態把握による集団感染機構のモニタリング」

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「ダイナミックインシュレーションを用いた住宅向け窓システムの開発」

大島まり研究室 バイオ・マイクロ流体力学

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

近年、MRIあるいはCTなどの画像診断装置は著しい発展を示している。そこで、医用画像とシミュレーションを組み合わせることにより得られる患者個別の血流情報を、病状予測および手術計画にフィードバックする。本研究では、脳血管系を中心に、脳循環および脳動脈瘤、総頸動脈の動脈硬化症などの循環器系疾患を取り上げ、医用画像に基づくマルチスケール・フィジックスシミュレーションの開発を行っている。

(1) 予測医療のための 1D-0D 全身循環血流解析のための統合システムの開発

重度な動脈硬化症では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。本研究では、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。

医用画像からの 3 次元の血管モデルリングを担うプロセッシングとともに可視化を含めたポストプロセッシングの充実化を図った。特にポストプロセッシングでは、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。

(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ように、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。3D-1D-0D 解析と 1D-0D 解析の比較することにより、各解析の妥当性の評価を行った。

(3) 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

異なる時刻で撮影された CT や MRI などの医用画像から血管あるいはステント等を抽出し、それら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を行った。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および可視化できるシステム (V-Modeler) の研究開発を行っている。V-modeler を腹部大動脈瘤に対するステント留置手術などの腹部に適用し、血管とステントの経時的な形状分析を行った。

(4) 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) Kitajima, H., Oshima, M., Iwai, T., Ohhara, Y., Yajima, Y., Mitsudo, K., “Computational fluid dynamics study of intra-arterial chemotherapy for oral cancer”, BioMedical Engineering, 16, 57, pp.1-26, DOI 10.1186/s12938-017-0348-5 (2017).
- 2) Yajima, Y., Oshima, M., Iwai, T., Kitajima, H., Omura, S., Tohnai, I.: “Computational fluid dynamics study of the pharyngeal airway space before and after mandibular setback surgery in patients with mandibular prognathism.”, International Journal of Oral and Maxillofacial Surgery, Volume 46, Issue 7, July 2017, Pages 839-844, DOI: 10.1016/j.ijom.2017.03.028 (2017).
- 3) Hoshina, K., Akai, T., Oshima, M., Watanabe, T., Yamamoto, S.: “Theoretical mechanism of temporary renal function improvement after abdominal aortic aneurysm surgery: Applications for clinical imaging and laboratory data.”, Medicine, Volume. 96, Issue 30, p e7428. doi: 10.1097/MD.00000000000007428 (2017).

国際会議予稿集

- 1) Mukai, N., Matsuura, Y., Oishi, M., Oshima, M.: “Chromatic Aberration based Depth Estimation in a Fluid Field”, 2018 International Conference on Image and Graphics Processing (2018).

国際会議アブストラクト

- 1) Yuhn, C., Suzuki, Y., Kobayashi, M., Miyahara, K., Hoshina, K., Oshima, M.: “Numerical Study on Hemodynamics and Vascular Remodeling of Pancreaticoduodenal Arcade in the Presence of Celiac Artery Stenosis”, The Ninth JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (2017).
- 2) Oshima, M: “Multi-scale simulation of cerebral blood flow for predictive medicine”, VII International

Conference on Computational Bioengineering (2017).

- 3) Yuhn C., Oshima M.: “Development of a Numerical Method for Assessment of Cerebrovascular Reserve using 1D-0D Hemodynamic Simulation with Cerebral Autoregulation Model”, SB3C2017 (2017) Hirayama K., Niki K., Oshima M., Sugawara M.: “Improvement of Simulated Arterial Waveforms Using Measured Parameters by Ultrasonography”, SB3C2017 (2017).
- 4) Morita, Y., Oishi, M., Matsuo, T., Oshima, M.: “Digital holographic micro-PTV based on phase images”, The 12th International Symposium on Particle Image Velicimetry (2017).
- 5) Hirayama K., Niki K., Oshima M., Sugawara M.: “Improvement of Simulated Arterial Waveforms Using Measured Parameters by Ultrasonography”, SB3C2017 (2017).
- 6) Kobayashi M., Shoojima M., Takagi S., Oshima M.: “Evaluation of aneurysmal locations in three dimensional arterial bending structure”, CMBE2017 (2017).

学会講演論文

- 1) 夏目拓也, 大石正道, 向井信彦, 大島まり:「脳動脈瘤塞栓術を目的とした液体注入シミュレーションの検討」, 日本機械学会2017年度年次大会(2017).
- 2) 安田貴浩, 前田溪太, 木村賢, 保科克行, 大島まり, 山本創太:「実患者症例を用いた腹部大動脈瘤簡易診断手法の検証」, 日本機械学会 第28回バイオフィロンティア講演会(2017).
- 3) 鈴木裕二, 宮原和洋, 小林匡治, 保科克行, 山本創太, 大島まり:「膝アーケード動脈瘤の成因における血管形状の血行力学に与える影響の考察」, 日本機械学会 第30回バイオエンジニアリング講演会(2017).
- 4) Hirayama, K., Niki, K., takenouchi, S., Sugawara, M., Tanaka, M., Oshima, M.:「全身循環シミュレーションを用いた下肢駆出後期逆流血流波形の検討:wave intensityによる解析」, 第82回日本循環器学会学術集会(2018).
- 5) 佐藤祐也, 山本創太, 大島まり, 保科克行:「腹部大動脈瘤用のステントグラフトの曲げ剛性測定及び有限要素モデルの開発」, 日本機械学会関東支部第24期総会(2018).
- 6) 前田溪太, 山本創太, 大島まり:「分岐を含む血管モデルにおける血圧無負荷形状推定」, 日本機械学会関東支部第24期総会(2018).

(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を正準法で解析する」という方針で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。これまでこれを用いた研究によって、同じユニットで構成されるナノ材料では、構造の僅かな乱れにより電子状態が速やかに局在化すること、逆に様々なモチーフからなる生体分子では容易に非局所化することを明らかにしてきた。このように当研究室が開発した手段は、量子効果を考慮に入れた巨大分子の解析・設計に貢献できる。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、ProteinDF に解析的エネルギー勾配計算ルーチンを実装した。これ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整備した。来年度も引き続き実施する。

(2) QCLO の改良

任意のフラグメントが定義でき、フレキシブルな計算分子構造拡張シナリオが利用できる自動計算プログラム QCLO 法の新コードを整備した。来年度も引き続き実施する。

(3) ProteinDF/QCLO のオープンソース化

(1), (2)の機能追加を中心に、ProteinDF/QCLO のアップデート版を GPL v3 ライセンスに基づき公開した。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活性中心モデルの拡張系におけ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、タンパク質全電子計算に基づく 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何種類か算出した。これらを用いて分子動力学シミュレーションを実行し、主にタンパク質構造の安定性などを解析した。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、絶縁材料の

電荷輸送特性の電子状態解析を実施した。本年度も、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。

(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.

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: 量子化学計算を用いた液体ヘキサン中正孔移動の検討, 2017.7, 電気学会論文誌 A (基礎・材料・共通部門誌), Vol.137 (2017, No.7, p. 435-441.

国際会議予稿集

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Study of high-performance canonical molecular orbitals calculation for proteins, 2017.11.28, 2017 AIP Conference Proceedings, 1906, 030019 (2017), doi: 10.1063/1.5012298.

国際会議アブストラクト

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: electronic structure of the active site on glucose oxidase by using canonical molecular orbital calculation, 2018.2.18-23, The 58th Sanibel Symposium.
- 2) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: A theoretical study of glucose oxidase using canonical molecular orbital calculation, 2017.2.19-24, The 57th Sanibel Symposium.

学会講演論文

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Development of Molecular Orbitals Calculation Applications for Proteins, 2018.1.15, International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2018, 理化学研究所, 仁科ホール.
- 2) Masahiro Sato, Akiko Kumada, Kunihiro Hidaka, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Current-transient Simulation of Polyethylene by First Principles, 2017.10.23, 2017 IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena, Hilton Fort Worth Front Worth, Texas, USA.
- 3) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: QCLObot: an automation engine of canonical MO calculation in proteins, 2017.10.3, CBI 学会 2017 年大会, タワーホール船堀.
- 4) 平野敏行, 佐藤文俊: カノニカル分子軌道計算によるインフルエンザ M2 タンパク質の電子構造, 2017.9.14, 分子科学討論会 2017, 東北大学 (川内北キャンパス).

- 5) Masahiro Sato, Akiko Kumada, Kunihiko Hidaka, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Quantum chemical analysis of the effect of impurities on carrier transfer properties in polyethylene, 2017.8.29, 2017 20th International Symposium on High Voltage Engineering, Buenos Aires, Argentina.
- 6) Masahiro Sato, Akiko Kumada, Kunihiko Hidaka, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Computational insights into carrier transfer and injection in liquid organic insulators, 2017.6.27, IEEE International Conference on Dielectric Liquids 2017, Manchester, United Kingdom.
- 7) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Study of High-Performance Canonical Molecular Orbitals Calculation for Proteins, 2017.4.21, International symposium: Computational Chemistry (CC) in ICCMSE2017, The Met Hotel, Thessalonki, Greece.
- 8) 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).
- 9) 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).
- 10) 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).

総説・解説・紀要

- 1) 居駒幹夫: 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」, 2017.9, スーパーコンピューティングニュース, Vol. 19, No. 5, (2017).
- 2) 佐藤正寛, 熊田亜紀子, 日高邦彦, 平野敏行, 佐藤文俊: ポリエチレンのモルフォロジーに基づいた正孔移動度の多階層性評価, 2017.5, 生産研究, Vol. 69 (2017) No. 3 p. 107-113.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 佐藤文俊, 基盤研究(A)「第 3 世代密度汎関数法の展開とタンパク質ボルン・オープンハイマー分子動力学法の研究」
- 2) 平野敏行, 若手研究(B)「タンパク質の自動量子化学計算法と電子状態 DB の開発」

民間等との共同研究

- 1) 「グルコースオキシダーゼの反応機構の研究」
- 2) 「高電圧技術・絶縁材料技術の量子化学計算による研究」

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・エディー・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ている。

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

(1) LES モデルと RANS/LES ハイブリッドモデルの研究

高レイノルズ数の壁乱流の LES を行うには、格子点数の制約から滑りなし条件が困難なため何らかの壁面モデルが必要となる。RANS モデルと組み合わせるハイブリッド計算が精度のよい壁面モデルとして期待される。本研究では二つのモデルをつなげる際に生じる速度不整合の原因を調べそれを取り除く数値計算法の開発と、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、まずチャン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 に対応するエネルギー輸送を考察した。

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。回転・旋回乱流に特徴的なヘリシティー効果を取り入れた LES モデルを提案した。回転座標系乱流のヘリシティーによる平均流の生成と乱流エネルギーの輸送促進の現象を数値計算を用いて考察し、RANS モデルの改良を試みた。またレイノルズ応力の実現性条件を満たすモデル化の方法を導き、チャンネル乱流等に適用して考察を行った。さらに乱流エネルギー散逸率の厳密な輸送方程式の主要項に乱流統計理論を適用し、散逸率方程式のモデル化を試みた。

(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。そこで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. また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. さらにホール効果を伴う電磁流体の LES モデルを導き一様等方乱流などに適用して検証した.

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Hideaki Miura, Fujihiro Hamba, Atsushi Ito: Two-fluid sub-grid-scale viscosity in nonlinear simulation of ballooning modes in a heliotron device, May 2017, Nuclear Fusion, Vol. 57, pp. 076034 1-13.
- 2) Kazuhiro Inagaki, Nobumitsu Yokoi, Fujihiro Hamba: Mechanism of mean flow generation in rotating turbulence through inhomogeneous helicity, November 2017, Physical Review Fluids, Vol. 2, pp. 114605 1-18.

国際会議予稿集

- 1) Nobumitsu Yokoi: Inhomogeneous helicity effect in the solar angular-momentum transport, April 2017, Proceedings of European Geosciences Union General Assembly 2017, ST1.1-EGU2017-4090-2.
- 2) Nobumitsu Yokoi, Akira Yoshizawa: Subgrid-scale model with structural effects incorporated through the helicity, July 2017, Progress in Turbulence VII, Springer Proceedings in Physics 196, pp. 115-121.
- 3) Fujihiro Hamba: Turbulent energy density in scale space based on filtered two-point correlation, July 2017, Proceedings of Tenth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, 6B5.
- 4) Kazuhiro Inagaki, Nobumitsu Yokoi, Fujihiro Hamba: Investigation of the mechanism of the mean-flow generation in terms of the Reynolds stress transport, August 2017, Proceedings of 16th European Turbulence Conference, 28756.
- 5) Hideaki Miura, Fujihiro Hamba: DNS and LES of homogeneous and isotropic Hall MHD turbulence, August 2017, Proceedings of 16th European Turbulence Conference, 28116.
- 6) Hideaki Miura, Fujihiro Hamba: Large-eddy-simulation approach for numerical simulation of ballooning modes in LHD, December 2017, Proceedings of 26th International Toki Conference, P2-54.
- 7) Nobumitsu Yokoi: Electromotive force in strongly compressible magnetohydrodynamic turbulence, December 2017, Proceedings of American Geophysical Union Fall Meeting, NG14A-03.

- 8) Nobumitsu Yokoi: Dynamo and turbulent transport, December 2017, Proceedings of Front-runner's Symposium on Plasma Physics, 2-2.

国際会議アブストラクト

- 1) Nobumitsu Yokoi: Flow generation by helicity and angular-momentum transport in the sun, August 2017, Kiepenheuer Institut fuer Sonnenphysik (KIS) Kolloquium Proceedings.
- 2) Nobumitsu Yokoi: Turbulent helicity and effective momentum transport, August 2017, Max-Planck Sonnensystemforschung (MPS) Kolloquium Series.
- 3) Kazuhiro Inagaki, Nobumitsu Yokoi, Fujihiro Hamba: Mechanism of mean flow generation in rotating turbulence and its relation to inertial wave, November 2017, Helicity Thinkshop 3, 2-1-2 A-7.
- 4) Valerly Pipin, Nobumitsu Yokoi: Generation of large-scale magnetic field in convective full-sphere cross-helicity dynamo, November 2017, Helicity Thinkshop 3, 2-2-1 A-13.
- 5) Fabien Widmer, Nobumitsu Yokoi, Jörg Büchner, Patricio Munoz, Xiaowei Zhou: Magnetic helicity in turbulent reconnection, November 2017, Helicity Thinkshop 3, 2-3-1 A-16.
- 6) Nobumitsu Yokoi: Dynamic balance in turbulent transport: Helicity and density-variance effects, November 2017, Helicity Thinkshop 3, 2-3-2 A-17.
- 7) Nobumitsu Yokoi: Large-scale vortex generation due to turbulent helicity and its subgrid-scale modelling, March 2018, Atmospheric and Ocean Research Institute (AORI) Workshop on Vortices, 3-3.

学会講演論文

- 1) 稲垣和寛, 半場藤弘: 回転系乱流における圧力拡散によるエネルギー輸送とヘリシティの関係, 2017 年 8 月, 日本流体力学会年会 2017 論文集, 30.
- 2) 三浦英昭, 半場藤弘: Hall MHD 乱流の LES とその応用, 2017 年 8 月, 日本流体力学会年会 2017 論文集, 80.
- 3) 稲垣和寛, 半場藤弘: 回転系非一様乱流における慣性波によるエネルギー伝搬, 2017 年 9 月, 日本物理学会 2017 年秋季大会概要集, p. 2526.
- 4) 半場藤弘: 乱流エネルギー散逸率輸送方程式のレイノルズ数依存性, 2017 年 12 月, 第 31 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, A02-3.
- 5) 稲垣和寛, 有木健人, 半場藤弘: Reynolds 応力の平方根を用いた実現性条件を満足する乱流モデルの定式化, 2017 年 12 月, 第 31 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, A01-4.
- 6) 半場藤弘: 乱流エネルギー散逸率の輸送方程式の消散項, 2018 年 3 月, 日本物理学会第 73 回年次大会概要集, p. 2772.
- 7) 稲垣和寛, 半場藤弘: 回転系非一様乱流における平均速度分布の維持に対するヘリシティと回転の効果, 2018 年 3 月, 日本物理学会第 73 回年次大会概要集, p. 2767.

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(C)「ハイブリッド乱流計算の境界面における乱れ生成のモデリング」

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、科学技術試験研究事業重点課題⑧に関して、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として Parareal 法に基づくアルゴリズム開発を行っている。

今年度は、昨年度までに検討した要素技術を基に時間領域並列化法の基本技術を開発し、フェーズフィールド法(放物型偏微分方程式)や流体シミュレーション(双曲型偏微分方程式)のプロトタイプアプリへ実装・適用を行い、その基本性能を評価した。具体的には、放物型では目標の7倍以上の加速性を確認し、非線形性の強い問題の加速法について方針を得た。また、双曲型では性能改善のため CIP 法と他手法の組み合わせ等の開発方針を得た。

時間並列計算法は放物型偏微分方程式と双曲型偏微分方程式に対しては特性が異なる。放物型偏微分方程式については以下の成果を得ている。単純な3次元の拡散問題の時空間並列計算を対象に評価を実施した。その結果、オリジナルの Parareal 法で 8.6 倍、パイプライン法により更に 1.98 倍の加速(全体で 16.6 倍)を確認した。この時、時間粗視化率は $Rfc = \delta T / \delta t = 100$ である。つぎに、非線形の強い場合の適用事例として、フェーズフィールド法を対象に評価を行った。今回は代表的な3つのモデル、つまり、非保存形の Allen-Cahn 方程式、保存形の修正 Allen-Cahn 法と Cahn-Hilliard 方程式を対象とした。これらの方程式に対して、fine solver に陽的 1 次 Euler 法、coarse solver に Crank-Nicolson 法・後退 4 次 Euler 法を用いた時間並列計算を行った。その計算、それぞれのモデルについて 13 倍、7 倍、2 倍の加速可能性を確認した。これから、Parareal 法は非線形偏微分方程式も加速可能であること、また加速率は問題に依存することを確認した。さらに、非線形性の強い問題では Parareal 法の反復修正の緩和法の高度化、coarse solver 自体の並列化の可能性の追求等の必要性も確認した。

双曲型偏微分方程式については、以下の成果を得ている。Parareal 法では、fine solver と coarse solver のタイムステップ幅の違いによるそれぞれの計算結果の位相精度の差による収束性の悪化が課題である。双曲型偏微分方程式の代表の1つである移流方程式を対象に、位相精度がタイムステップ幅への依存性が低い移流計算法を検討した。比較基準として TVD 法と Crank-Nicolson 法を利用したもの、位相高精度計算の手法として CIP-3 次(位相計算精度が高い、勾配情報[位相情報]も移流させる方法)及び CIP-5 次(さらに曲率情報を移流させる方法として開発)を利用したものを用いた。ステップ

形状の移流問題($v=1.0$), 空間 $L=3.0$, $\Delta x=0.01$, 時間 $T=2.0$, $\delta t=0.001$, $CFL=0.1$, 2,000steps の条件で計算を実施した. その結果, CIP 法による位相計算精度向上は効果的で, 修正緩和法も有効であることが分かった.

また「PinT2017 時間並列計算国際会議」における議論から, fine solver と coarse solver で同じタイムステップ幅を利用し(ただし, fine solver の計算負荷が coarsesolver の計算に比べ桁違いに高い必要ある), かつ計算する時間領域を N_c 個に分割して各分割領域に Parareal 法を N_c 回適用し収束性を向上させる方法も有望であるということも分かった.

(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

ステンシル計算における低 B/F アルゴリズムとして多ベクトル計算の GPU 実装評価を実施した. 評価に用いたカーネルコードは連立一次方程式の求解に用いる BiCGSTAB 法のコードである. これを東京大学の reedbush-H システム(Intel Xeon E5-2695v4 (Broadwell-EP), nVidia Tesla P100)[7]を1基用いて評価した. コード実装は, OpenACC のディレクティブを用いた. 問題規模は 128^3 の大きさである. 前処理付きの BiCGSTAB 法は, その内部処理に, AX や内積などの特性の異なるループ構造が現れる. 2color-SOR の行列ベクトル積や内積計算は Intel Broadwell-EP 18-core のマルチスレッド計算とほぼ同等の性能であることがわかった. 一方, ax, bicg triad のカーネルコードは大幅な性能向上を達成できていることがわかった. これらの結果から, さらにチューニングを施し, マルチ GPU 化を進めれば CPU 比で実質的に数倍以上の高速化が見込めることがわかった.

(3) 上流設計システムの設計

昨年度は上流設計プラットフォームのプロトタイプ開発として, 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」において開発された汎用解析プラットフォーム, HPC/PF (High Performance Computing Platform)をベースに, 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 に対応したワークフローツールのプロトタイプを開発した. さらに連携する重点課題⑥サブ課題 B で開発されている ABINIT-MP を対象に, 京コンピュータを計算資源とした Capacity Computing のワークフロー実例を作成し, 機能検証を行った. ここで明らかになった課題や上流設計工程においてワークフローツールに求められる機能等を検討した結果, 新しいワークフローツール WHEEL(Workflow in Hierarchical distributEd parallel)の開発に着手した. WHEEL は HPC/PF 同様に Web ブラウザを GUI として用いる方式のアプリケーションで, 開発フレームワークとして JavaScript 実行エンジン Node.js を利用している. Web ブラウザを GUI プラットフォームにすることで, エンドユーザはソフトウェアをインストールする必要なくシステムを利用可能である. WHEEL では, 主に以下の点について HPC/PF ベースのプロトタイプから機能の改良・追加を行っている.

1. GUI 上での繰り返し処理・条件分岐の記述
2. Glob パターン指定でのワークフローコンポーネント間での一括したデータ授受
3. サブワークフローコンポーネントの実装
4. パラメータスタディ設定 GUI の統合

5. Git ベースのワークフロー履歴管理

本年度はこの WHEEL を用いて ABINIT-MP による京コンピュータの micro キューを計算資源とした Capacity Computing のワークフロー実例を作成, 合計 300 ケースの解析ジョブの自動実行と結果データの集計・回収ができることを確認し, 昨年度版プロトタイプよりも容易にワークフローの構築と実行が出来ることを確認した. 加えて, 本サブ課題で研究開発を行う多目的設計探索と連携し, JAXA の開発する進化計算アルゴリズムモジュールが WHEEL 上で動作することを確認した. 検証事例として「応答曲面法を用いた複数車種の同時最適化ベンチマーク問題」を用いてこれが正しく動作することを確認した.

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Jorji Nonaka, Kenji Ono and Masahiro Fujita: 234Compositor: A flexible parallel image compositing framework for massively parallel visualization environments, Future Generation Computer Systems, Vol. 82, pp. 647-655, 2018.
- 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, Vol. 20, No.4, pp.859-874, 2017.

和文論文

- 1) 竹之下遼, 原田利宣, 小野謙二: データマイニングを用いた2種類の酒類における Web 上の感性情報の比較と視覚化, 日本感性工学会論文誌, 2017.
- 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, 日本感性工学会論文誌, 16(1), pp.19-28, 2017.

国際会議予稿集

- 1) Mizue Munekata, Akimasa Narita, Go Kitamura, Hiroyuki Yoshikawa, Kenji Ono and Takashi Watanabe: Flow Characteristics and Separation Performance in a Hemispheric Head Cyclone Separator, the 13th International Symposium on Experimental Computational Aerothermodynamics of Internal Flows, May 7-11, Okinawa, Japan, 2017.
- 2) Jorji Nonaka, Naohisa Sakamoto, Takashi Shimizu, Masahiro Fujita, Kenji Ono and Koji Koyamada: Distributed particle-based rendering framework for large data visualization on HPC environments, 15th International Conference on High Performance Computing and Simulation, HPCS 2017, July 17-21, Genoa, Italy, 2017.
- 3) Eduardo C. Inacio, Jorji Nonaka, Kenji Ono and Mario Dantas: Analyzing the I/O Performance of Post-Hoc Visualization of Huge Simulation Datasets on the K Computer, 2017 Brazilian Symposium on High Performance Computing Systems, Oct. 17, Brazil, 2017.
- 4) Jorji Nonaka, Naohisa Sakamoto, Yasumitsu Maejima, Kenji Ono and Koji Koyamada: A torrential rain and a flash flood in Kobe city, SIGGRAPH Asia 2017 Symposium on Visualization, SA 2017, Nov. 27-30, Bankkok, 2017.

- 5) Jorji Nonaka, Motohiko Matsuda, Takashi Shimizu, Naohisa Sakamoto, Masahiro Fujita, Keiji Onishi, Eduardo C. Inacio, Shun Ito, Fumiyoshi Shoji and Kenji Ono: A study on open source software for large-scale data visualization on SPARC64fx based HPC systems, 2018 International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, HPC Asia 2018, Jan. 28-31, Tokyo, 2018.

国際会議アブストラクト

- 1) Mikio Iizuka and Kenji Ono: Investigation of Convergence Characteristics of Parareal Method for Advection Equation using Accurate Phase Calculation Method, 6th workshop on Parallel-in-Time methods, Oct. 23-27, Ascona, Switzerland, 2017.
- 2) 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, Nov. 27- Dec. 2, Banff, CA, 2017.
- 3) Mikio Iizuka and Kenji Ono: Convergence Acceleration of the PinT Integration of Advection Equation using Accurate Phase Calculation Method, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing 2018, March 7-10, Tokyo, 2018.

学会講演論文

- 1) 飯塚幹夫, 小野謙二: フェーズフィールド法に対する Parareal 法による時間並列計算の収束挙動, 第 31 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 12-14, 京都, 2017.
- 2) 小野謙二, 川鍋友宏: 全体俯瞰分析を用いた着想支援とビッグデータ分析への応用, 大学 ICT 推進協議会 2017 年度年次大会 AXIES2017, Dec. 13-15, 広島, 2017.
- 3) 小野謙二: 領域分割に起因する性能劣化とその改善, 第 31 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 12-14, 京都, 2017.
- 4) 今村成吾, 飯塚幹夫, 小野謙二, 横川三津夫: 大規模時空間並列計算での Parareal 法の性能評価, 計算工学講演会論文集.

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

畑田研究室では、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 年度より活動してきた。研究室の独自の目標として掲げているのは、国家プロジェクト等において開発した先端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、ユーザが同上ソフトウェアを効率的・効果的に利活用するために必要な知識ベースの構築とそれを内蔵するソフトウェアプラットフォームの開発ならびにその普及を、関連研究室及び他研究機関と連携して実施することに力点を置いている。

平成 29 年度の主な活動は、文部科学省プロジェクトである、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」(本格研究 2 年目) に関するプロジェクトマネージメントである。

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 年頃完成予定)と連動し、その環境で利用できるアプリケーションソフトウェアを研究開発するプロジェクトである。当センターを中核として関連大学・研究機関、企業等によって構成されるグループは、9 個の重点課題の内、前述の重点課題⑧を担当している(平成 28～31 年度が本格研究予定期間)。本年度は、本格研究期間の中間年度に相当し、特に設計プロセスの革新に関するサブ課題 4 つと製造プロセスの革新に関するサブ課題 2 つ(合計 6 つ)の研究内容に関して、主要な研究課題に関する中間成果を創出することが重要な目標とされた。これに対して当研究室では、より効果的・効率的な研究開発の推進を図るための諸会議・委員会等を精力的に実施(あるいは実施サポート)し、年度末に中間成果を創出するための道筋をつけることに専念した。これらの取り組みにより、本プロジェクトで目標として掲げていた予定成果創出のためのプロジェクトマネージメントの仕組みは、年度前半においてほぼ確立できたものと考えている。

冒頭において記述した本研究室のミッションは、本年度までに実施されてきた複数のプロジェクトにおいて切磋琢磨されてきた結果、高度なソフトウェアを産学連携により複数の研究機関と協力しながら効率的に開発する仕組み並びにそれを産業界等に普及させる仕組みを構築できたという点で、ほぼ達成できたと評価している。このような取り組みは、産官学の関係機関の密な協力関係なくしては成し遂げられなかったものであり、研究室主催者として厚く感謝する。

当研究室は平成 29 年度前半でそのミッションの達成に伴って閉室となったが、実施中のプロジェクトは平成 30 年度から後半に入り最終成果創出に向けて研究開発が一層加速されることになる。その際、当研究室で手掛けた仕組が少しでも寄与できることを期待するものである。

梅野宜崇研究室 ナノ構造強度物性学

梅野研究室では、第一原理計算・古典分子動力学計算によるナノ・サブミクロン構造体の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現象の機序解明、次世代ナノデバイスの特性予測、金属表面の潤滑油挙動の解明、燃料電池電極材や構造用ポリマーの高性能化・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。原子構造のポテンシャル場だけでなく、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、化学反応の記述が可能な反応分子動力学ポテンシャル開発ツールの整備を進めるとともに、ニューラルネットワークモデルを用いて電子状態密度を高精度で再現できるマルチフィジックスポテンシャルの開発を行った。

(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、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、軸方向圧縮カーボンナノチューブの特異な座屈メカニズムの詳細を明らかにした。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ことが昨年度までに示されていたが、これがナノチューブのカイラル構造に起因する螺旋状構造不安定モードに起因すること、第一段階の構造不安定ではナノチューブ全体の座屈に至らずナノチューブ表面に螺旋形の波状構造が現れることが明らかとなった。螺旋形波状構造によって電子状態が変化することで得られるナノチューブの物性変化を利用した新奇ナノデバイスの可能性を示した。

(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、ひずみ速度の関数としての降伏応力記述、降伏挙動に対する分子量の影響解明などを行った。また、粘弾性体のき裂進展モード転移現象については、モード転移の本質が単純なZenerモデルで記述可能であることを解明し、

他グループで進められている理論的可解モデルとも整合することが明らかとなった。すなわち、これまで行ってきた FEM シミュレーション(工学的モデル)と理学的モデルの双方からモード転移現象を統一的に説明することに成功した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) A. Kubo, S. Nagao and Y. Umeno: Molecular dynamics study of deformation and fracture in SiC with angular dependent potential model, 2017, Computational Materials Science Vol. 139, pp. 89-96.
- 2) Y. Kamimura, K. Edagawa, A.M. Iskandarov, M. Osawa, Y. Umeno and S. Takeuchi: Peierls stresses estimated via the Peierls-Nabarro model using ab-initio γ -surface and their comparison with experiments, 2018, Acta Materialia Vol. 148, pp. 355-362.

和文論文

- 1) 谷内湧, 梅野宜崇, 島弘幸, 佐藤太裕: 多層カーボンナノチューブに生じる特異な断面座屈挙動の分子動力学解析, 2018, 土木学会論文集A2(応用力学), Vol. 74, No. 1, pp. 51-62.

国際会議予稿集

- 1) S. Oberhoffer, A. Iskandarov and Y. Umeno: A reactive force field (ReaxFF) for molecular dynamics simulations of NiO reduction in H₂ environments, 2017, ECS Transactions Vol. 78-1, pp.2765-2771.
- 2) S. Liu, S. Liu, L.C. Saha, A.M. Iskandarov, Z. Jiao, S. Hara, T. Ishimoto, T. Tada, Y. Umeno, N. Shikazono, S. Matsumura and M. Koyama: Multi-scale, multi-physics approach for solid oxide fuel cell anode reaction, 2017, ECS Transactions Vol. 78-1, pp.2835-2844.
- 3) E. Kawai and Y. Umeno: Theoretical prediction of energy release rate for interface crack initiation by thermal stress in environmental barrier coatings for ceramics, 2017, Journal of Physics: Conf. Series Vol. 843, 012004.

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. 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).
- 3) A. Kubo and Y. Umeno: Finite-element analysis of velocity mode transition of crack propagation in rubber materials (9th World Congress on Materials Science and Engineering, 2017.06.12-14, Rome, Italy).
- 4) Y. Umeno and E. Kawai: Numerical simulation for designing mechanically reliable structure of environment barrier coatings in ceramics (Frontiers in Materials Processing Applications, Research

and Technology (FiMPART2017), 2017.07.09-12, Bordeaux, France).

- 5) Y. Shiihara, Y. Umeno, M. Mitsuhara, M. Nishida and Y. Todaka: Atomistic-level interaction between lubricant and SPD-processed metallic surface: first principles, molecular dynamics, and coarse-grained molecular dynamics approaches (Frontiers in Materials Processing Applications, Research and Technology (FiMPART2017), 2017.07.09-12, Bordeaux, France).
- 6) S. Oberhoffer, A.M. Iskandarov and Y. Umeno: A reactive force field (ReaxFF) for molecular dynamics simulations of NiO reduction in H₂ environments (15th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC-XV), 2017.07.23-28, Hollywood, FL, USA).
- 7) S. Liu, S. Liu, L.C. Saha, A.M. Iskandarov, Z. Jiao, S. Hara, T. Ishimoto, T. Tada, Y. Umeno, N. Shikazono, S. Matsumura and M. Koyama: Multi-scale, multi-physics approach for solid oxide fuel cell anode reaction (15th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC-XV), 2017.07.23-28, Hollywood, FL, USA).
- 8) E. Kawai and Y. Umeno: Theoretical prediction of energy release rate for interface crack initiation by thermal stress in environmental barrier coatings for ceramics (International Conference on Fracture Fatigue and Wear (FFW2017), 2017.07.26-27, Porto, Portugal).
- 9) Y. Umeno, M. Sato, H. Shima and M. Sato: Atomistic modeling analysis of structural instability of carbon nanotubes under pressure (SES 2017 Boston: 54th Annual Technical Meeting of Society of Engineering Science, ASME-AMD Joint Conference, 2017.07.25-28, Northeastern University, Boston, MA, USA).
- 10) A. Kubo and Y. Umeno: Finite-element analysis of velocity mode transition in dynamic crack propagation in rubber sheets (10th European Conference on Constitutive Models for Rubbers (ECCMR2017), 2017.08.28-31, Munich, Germany).
- 11) E. Kawai and Y. Umeno: Numerical simulation of energy release rate for interface crack initiation due to thermal stress in environmental barrier coatings for Silicon carbide (SiC) fiber reinforced SiC matrix composite (Engineering Conferences International (ECI): Advanced Ceramic Matrix Composites, 2017.11.5-9, Santa Fe, New Mexico, USA).
- 12) A. Kubo and Y. Umeno: Finite element analysis of dynamic crack propagation in polymers (2017 Japan-Taiwan Bilateral Symposium on Physical Chemistry of Tough Polymers for Future Vehicles, 2017.11.20-21, Tainan, Taiwan).
- 13) Y. Morishita, K. Tsunoda, K. Urayama, A. Kubo, Y. Umeno, N. Sakumichi, Y. Aoyanagi and K. Okumura: Emergent frontiers of the fixed-grip constant crack propagation in polymer sheets: experimental, numerical, and theoretical studies (17th International Conference on Deformation, Yield and Fracture of Polymers (DYFP2018), 2018.03.25-29, Kerkrade, Netherlands).

著書

- 1) Y. Umeno, T. Shimada, Y. Kinoshita and T. Kitamura: Multiphysics in Nanostructures, Nanostructure Science and Technology, Series Editor: David J. Lockwood, Springer (2017), ISBN: 978-4-431-

56571-0 (print), 978-4-431-56573-4 (eBook).

学会講演論文

- 1) 久保淳, 梅野宜崇: ポリカーボネートの変形挙動の分子量依存性に関する粗視化分子動力学解析, 第22回分子動力学シンポジウム, 2017年5月26日, 名城大学, 講演論文集USB.
- 2) 佐藤誠修, 久保淳, 吉野泰成, 梅野宜崇: SiCの転位移動と破壊現象に対する分子動力学計算と不安定モード解析, 第22回分子動力学シンポジウム, 2017年5月26日, 名城大学, 講演論文集USB.
- 3) 梅野宜崇, 久保淳: 構造用ポリマー破壊のマルチスケールシミュレーション, 第22回分子動力学シンポジウム, 2017年5月26日, 名城大学, 講演論文集USB.
- 4) 久保淳, 梅野宜崇: ポリカーボネートの変形に関する粗視化粒子シミュレーション: ひずみ速度, 温度および多軸変形の影響, 第22回計算工学講演会, 2017年5月31日～6月2日, ソニックシティ, さいたま市, 講演論文集CD-ROM.
- 5) 佐藤誠修, 島弘幸, 佐藤太裕, 梅野宜崇: 単層カーボンナノチューブの座屈変形とバンドギャップ変化の原子・電子モデル解析, 第22回計算工学講演会, 2017年5月31日～6月2日, ソニックシティ, さいたま市, 講演論文集CD-ROM.
- 6) 須藤佑太, 久保淳, 梅野宜崇: セン断流中における潤滑剤高分子の摩擦運動に関する粗視化分子動力学計算, 第22回計算工学講演会, 2017年5月31日～6月2日, ソニックシティ, さいたま市, 講演論文集CD-ROM.
- 7) 梅野宜崇, 河合江美: セラミックスコーティング破壊の理論と数値解析, 日本セラミックス協会第30回秋季シンポジウム, 2017年9月19日～21日, 神戸大学, 講演論文集CD-ROM (No. 2L25).
- 8) 梅野宜崇: ナノ金属表面/潤滑剤高分子系の摩擦挙動に関する粗視化分子動力学解析, 日本物理学会格子欠陥フォーラム, 2017年9月25日～26日, 東京大学生産技術研究所, 講演論文集USB.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

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

- 3) JST 産学共創基礎基盤研究, 課題名「鋼材／潤滑油界面における機能性ヘテロナノ構造制御に基づく転動疲労高特性化のための指導原理の確立」

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てきた。平成 29 年度においては以下の研究を行ってきた。

(1) 全構造・全元素・全吸収端内殻電子励起スペクトルの第一原理計算の確率

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。これまでの研究により、そのスペクトルを計算するためには、電子遷移の理論と、軌道のひろがり、さらに電子間相互作用などを適切に考慮する必要があることが分かっている。本研究室ではこれまで全構造・全元素・全吸収端のスペクトルを計算するための物理の理解と手法の開発を行ってきた。平成 29 年度においては、1,000 原子を超える複雑な構造(液体、気体、格子欠陥など)からのスペクトル計算、さらに重元素から軽元素に関する吸収端、また低い領域から高い領域の広範囲なエネルギー領域における吸収端の理論計算について報告を行った。

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

気体や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。本研究では環境型透過型電子顕微鏡で取得される気体からの 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気体分子における ELNES の理論計算を行った。さらに、環境型 TEM の内部で気体に熱を加え、その際のスペクトルの変化も検出した。その結果、加熱前後においてスペクトルの変化が現れた。その結果をシミュレーションにより解析したところ、スペクトルの変化が、分子振動の変化により生じていることを明らかにした。さらに、熱伝達の違いにより、気体分子で温度効果が異なることも突き止めた。また、電子顕微鏡とシミュレーションを組み合わせることで液体内部の原子を直接観察し、そのダイナミクスを理解することにも成功した。高い空間分解能により気体や液体を解析できる本手法は、固気液界面のような局所領域の化学反応を理解することに大いに役立つと期待される。これらの成果はプレスリリースされた。

(3) 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てきた。今年度はさらに、「転移学習」という機械学習のコンセプトを活用することにより、さらなる手法の高速化に成功した。界面は物

性に重要な役割を果たしており, 今回開発した手法を利用することで界面の構造決定が容易になり, 物質の開発スピードが加速されることが期待される. 同成果はプレスリリースされた.

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) T. Miyata and T. Mizoguchi: "Fabrication of Thin TEM Sample of Ionic Liquid for High-Resolution ELNES Measurements", *Ultramicroscopy*, 178 (2017) 81-87.
- 2) H. Katsukura, T. Miyata, K. Tomita, and T. Mizoguchi: "Effect of the van der Waals interaction on the electron energy-loss near edge structure theoretical calculation", *Ultramicroscopy*, 178 (2017) 88-95.
- 3) 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.
- 4) T. Mizoguchi, T. Miyata, and W. Olovsson: "Excitonic, vibrational, and van der Waals interactions in electron energy loss spectroscopy" (Invited Manuscript), *Ultramicroscopy*, 180 (2017) 93-103.
- 5) H. Ikeno and T. Mizoguchi: "Basics and Applications of ELNES calculation" (Invited Review), *Microscopy*, 66 (2017) 305-327.
- 6) H. Oda, S. Kiyohara, K. Tsuda, and T. Mizoguchi: "Transfer Learning to Accelerate Interface Structure Searches", *J. Phys. Soc. Jpn (Letter)*, 86 (2017.10) 123601-1-4.
- 7) T. Miyata and T. Mizoguchi: "High-resolution mapping of molecules in an ionic liquid via scanning transmission electron microscopy", *Microscopy* (2017.11), in press. doi.org/10.1093/jmicro/dfx119.
- 8) T. Miyata, F. Uesugi, and T. Mizoguchi: "Real-space analysis of diffusion behavior and activation energy of individual monatomic ions in a liquid", *Science Advances*, 3 (2017.12) e1701546-1-5.
- 9) H. Katsukura, T. Miyata, M. Shirai, H. Matsumoto, and T. Mizoguchi: "Estimation of the molecular vibration of gases using electron microscopy", *Scientific Reports*, 7 (2017.12), 16434-1-9.
- 10) E. Tochigi, T. Mizoguchi, E. Okunishi, A. Nakamura, N. Shibata, and Y. Ikuhara: "Dissociation Reaction of the $1/3 \langle \bar{1}10 \rangle$ Edge Dislocation in $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ " *J. Mater. Sci.*, (2018.2) doi.org/10.1007/s10853-018-2133-7.
- 11) S. Kikuchi, H. Oda, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi: "Bayesian optimization for efficient determination of metal oxide grain boundary structures" *Physica B*, 532 (2018) 24-28.
- 12) S. Kiyohara, and T. Mizoguchi: "Effective search for stable segregation configurations at grain boundaries with data-mining techniques" *Physica B*, 532 (2018) 9-14.

国際会議アブストラクト

- 1) T. Miyata and T. Mizoguchi: "Direct Imaging of single atoms in ionic liquids and observation of their dynamics" International EELS workshop (Edge2017), Okinawa, Japan, 16, May, 2017.
- 2) S. Kiyohara and T. Mizoguchi: "Reconstruction and interpretation of ELNES using sparse representation" International EELS workshop (Edge2017), Okinawa, Japan, 16, May, 2017.

- 3) K. Nakazawa, T. Miyata, S. Amma, and T. Mizoguchi: "In-situ observation of binodal type phase coarsening in glass" International EELS workshop (Edge2017), Okinawa, Japan, 16, May, 2017.
- 4) K. Tomita, T. Miyata, W. Olovsson, and T. Mizoguchi: "Strong excitonic interaction in O-K edge of perovskite oxides" International EELS workshop (Edge2017), Okinawa, Japan, 16, May, 2017.
- 5) H. Katsukura, T. Miyata, M. Shirai, M. Matsumoto, and T. Mizoguchi: "Investigation of vibrational behavior of Gas using ELNES" International EELS workshop (Edge2017), Okinawa, Japan, 16, May, 2017.
- 6) K. Nakazawa, T. Miyata, S. Amma, and T. Mizoguchi: "Atomic-scale in-situ observation of phase coarsening process in glass" PacRIM2017, Kona, Hawaii, USA, May 24th.
- 7) Teruyasu Mizoguchi: "Machine Learning for Interface" Korean Ceramics Society, Seoul, South Korea, Oct.12, 2017.
- 8) Teruyasu Mizoguchi: "Electron spectroscopy and Electronic structure" Advanced materials analysis lecture, POSTECH, Pohang, South Korea, Oct.13, 2017.
- 9) Teruyasu Mizoguchi: "Interface structure investigation using atomic resolution microscopy, spectroscopy, and machine learning" Advanced electron microscopy group seminar, POSTECH, Pohang, South Korea, Oct.14, 2017.
- 10) S. Kikuchi, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi: "Making "Universal" predictor to achieve high-throughput structure determination of oxide grain boundaries" Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017 (CPMD2017), Tsukuba, Japan, Oct. 19, 2017.
- 11) S. Kiyohara, T. Miyata, and T. Mizoguchi: "Data driven approaches to reconstruct and interpret ELNES/XANES spectra" Car-Parrinello Molecular Dynamics in 2017 (CPMD2017), Tsukuba, Japan, Oct. 19, 2017.
- 12) Teruyasu Mizoguchi: "Materials Informatics for Nanostructures" The Association of East Asian Research Universities (AEARU) Advanced Materials Science Workshop 2017, Osaka University, Osaka, Nov. 1st, 2017.
- 13) S. Nakazawa, T. Miyata, and T. Mizoguchi: "High resolution in-situ observation of phase coarsening process in silicate-based glass" The 3rd East-Asia microscopy conference (EAMC), Busan, Korea, Nov. 9, 2017.
- 14) K. Tomita, T. Miyata, and T. Mizoguchi: "Excitonic interaction in oxides ELNES" The 3rd East-Asia microscopy conference (EAMC), Busan, Korea, Nov. 9, 2017.

著書

- 1) T. Mizoguchi: "Nanoinformatics" Springer (2018) e-book ISBN 978-981-10-7617-6 , DOI: 10.1007/978-981-10-7617-6 Chapter 8, "Atomic-Scale Nanostructures by Advanced Electron Microscopy and Informatics"Open Access.
- 2) 溝口照康: "XAFS の基礎と応用" 講談社サイエンティック(2017) , ISBN 978-4-06-153295-3 第2章3節「XANES の電子状態論」.

学会講演論文

- 1) 溝口照康: "ELNES 理論計算に関する基礎的研究と物質研究への応用", 顕微鏡学会年会, 札幌コンベンションセンター, 5/30, 2017.
- 2) 清原慎, 溝口照康: "情報科学的手法を用いた ELNES スペクトルの再現と解釈", 日本顕微鏡学会年会 2017, 札幌コンベンションセンター, 5/30, 2017.
- 3) 中澤克昭, 宮田智衆, 安間伸一, 溝口照康: "ガラス中の分相成長中期及び終期過程のその場観察", 日本顕微鏡学会年会 2017, 札幌コンベンションセンター, 5/30, 2017.
- 4) 宮田智衆, 溝口照康: "イオン液体を構成するイオンの原子分解能動的挙動解析", 日本顕微鏡学会年会 2017, 札幌コンベンションセンター, 6/1, 2017.
- 5) 溝口照康: "データ駆動型界面構造探索", 「物質科学におけるデータ科学の視点」シンポジウム, 生産技術研究所千葉実験所, 6/23, 2017.
- 6) 杉森悠貴, 宮田智衆, 溝口照康: "液体中における界面活性剤の原子分解能構造解析", 新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 有明, 東京, 7/25, 2017.
- 7) 中澤克明, 宮田智衆, 安間伸一, 溝口照康: "ガラス中の分相成長過程の STEM 内高温その場観察", 新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 有明, 東京, 7/26, 2017.
- 8) 菊地駿, 清原慎, 溝口照康: "仮想スクリーニングを活用した NaCl 型酸化物粒界の高速決定", 新学術領域「ナノ構造情報」若手の会, 有明, 東京, 7/26, 2017.
- 9) 溝口照康: "ELNES/XANES 理論計算と界面構造探索に関する研究", 第 30 回 DV-X α 研究会, 兵庫県立大学書写キャンパス, 8/4, 2017.
- 10) 溝口照康: "EELS の基礎と解釈", 第 33 回分析電子顕微鏡討論会, 幕張メッセ, 千葉, 9/5, 2017.
- 11) 溝口照康: "情報科学手法を活用したナノ構造解析"[基調講演], 日本金属学会 秋季大会, 北海道大学, 札幌, 9/6, 2017.
- 12) 菊地駿, 清原慎, 溝口照康: "酸化物粒界に対する情報科学の活用", 日本セラミックス協会秋季大会 2017, 神戸大学, 神戸, 9/19, 2017.
- 13) 溝口照康: "機械学習を利用した粒界構造の効率的探索", 日本物理学会 秋季大会, 岩手大学, 岩手, 9/22, 2017.
- 14) 清原慎, 宮田智衆, 溝口照康: "データ駆動型アプローチに基づく ELNES/XANES スペクトルの再現及び解釈", 第 40 回ケモインフォマティクス討論会, 山口大学, 宇部市, 10/26, 2017.
- 15) 溝口照康: "界面・粒界へのマテリアルズインフォマティクス", 応用物理学会第 46 回薄膜・表面物理基礎講座, 名古屋大学, 名古屋, Nov. 17, 2017.
- 16) 宮田智衆, 溝口照康: "電子顕微鏡でイオン液体の原子を観る", イオン液体討論会若手の会, 東京農工大学, 東京, Nov. 22, 2017.
- 17) 宮田智衆, 溝口照康: "原子分解能電子顕微鏡による C8mimBr 中における Br-イオンの動的挙動直接観察", イオン液体討論会 2017, 東京農工大, Nov., 2017.
- 18) 杉森悠貴, 宮田智衆, 溝口照康: "イオン液体中における溶質の溶解挙動の原子分解能解析", イオン液体討論会 2017, 東京農工大, Nov., 2017.

- 19) 溝口照康: "マテリアルズインフォマティクスによる結晶界面の構造解析", 応用物理学会第 22 回結晶工学セミナー, 工学院大学, 東京, Dec. 12, 2017.
- 20) 溝口照康: "第一原理計算と電子顕微鏡, 情報科学を用いた物質研究", 東京理科大学特別講義, 神楽坂, 東京, Dec. 12, 2017.
- 21) 清原慎, 溝口照康: "MI2I データ科学グループワークショップ", NIMS つくば, Dec. 15, 2017.
- 22) 溝口照康: "機械学習をもちいた結晶界面の構造と物性の理解", 学習院大学計算機センター研究会 結晶成長の数理, 学習院大学, 東京, Dec. 17, 2017.
- 23) 溝口照康: "情報科学手法を用いた界面構造の高速決定と XANES の解釈", 第4回放射光連携ワークショップ, JP タワー, 東京, Dec. 18, 2017.
- 24) 溝口照康: "原子分解能計測と機械学習をもちいた物質研究", 京大化研セミナー, 京都大学化学研究所, 京都, Dec. 21-22, 2017.
- 25) 溝口照康: "結晶界面インフォマティクス", 日本学術振興会第 181 委員会講演会, 東京大学, 本郷, Jan. 22-23, 2018.
- 26) 溝口照康: "人工知能を用いた界面解析と原子分解能顕微鏡を用いた液体中原子・分子解析", 日本化学会第 35 回コロイド・界面技術シンポジウム, 日本化学会館, 御茶ノ水, Jan. 26, 2018.
- 27) 溝口照康: "機械学習の界面への利用", 工学系研究科社会連携・産学協創推進室マテリアルズインフォマティクスワークショップ, 東京大学, 本郷, Jan. 29, 2018.
- 28) 溝口照康: "結晶界面インフォマティクスの基礎と応用", さきがけ第一回公開シンポジウム, 市ヶ谷, 東京, Feb. 22, 2018.
- 29) 溝口照康: "分析電子顕微鏡, 理論計算および情報科学手法を用いたナノ構造解析", 北海道大学分第 3 回分析 TEM ユーザーズミーティング, 北海道大学, March 9, 2018.
- 30) 溝口照康: "原子分解能液体計測", 顕微鏡学会関東支部会講演会, 東京大学武田先端知ビル, 本郷, March 10, 2018.
- 31) 菊地駿, 清原慎, 溝口照康: "多様な酸化物粒界を高速決定する Universal 回帰器の構築", 日本セラミックス協会春季大会, 東北大学, 仙台, March, 2018.
- 32) 清原慎, 宮田智衆, 溝口照康: "モンテカルロ探索を用いた粒界偏析挙動の解析", 日本セラミックス協会春季大会, 東北大学, 仙台, March, 2018.
- 33) 中澤克昭, 宮田智衆, 安間伸一, 溝口照康: "シリカ系ガラスにおける Percolation-to-Cluster 転移のその場観察", 日本セラミックス協会春季大会, 東北大学, 仙台, March, 2018.
- 34) 溝口照康: "原子分解能 STEM-EELS および第一原理計算による液体・気体の解析", 鉄鋼協会春季大会, 千葉工業大学, 新習志野, March 20, 2018.
- 35) 溝口照康: "機械学習を利用した界面構造探索構造機能相関解析およびスペクトル解釈", 物理学会春季大会, 東京理科大学野田キャンパス, 千葉, March 25, 2018.
- 36) 中澤克昭, 宮田智衆, 安間伸一, 溝口照康: "ガラス中におけるスピノーダル分解による組織形成過程の TEM 内その場観察", 日本金属学会春季大会, 千葉工業大学, 千葉, March 25, 2018.

(2)研究プロジェクト

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
- 2) 「電池材料に関する研究」 国内分析メーカー

受託研究

①公的資金

- 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」

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、微細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マイ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) Constantinos Panagiotou, Stavros Kassinos: “A structure-based model for transport in stably stratified homogeneous turbulent flows”, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 65, pp. 309-322 (2017).
- 2) Takao Suzuki, Yosuke Hasegawa: “Estimation of Turbulent Channel Flow at $Re_\tau = 100$ based on the Wall Measurement Using a Simple Sequential Approach” *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 830, 760-796 (2017).
- 3) Yukinori Kametani, Ayane Kotake, Koji Fukagata, Naoko Tokugawa: “Drag reduction capability of uniform blowing in supersonic wall-bounded turbulent flows”, *Physical Review Fluids*, Vol. 2, 123904 (2017).

和文論文

- 1) 鈴木崇夫, 長谷川洋介: “逐次法を用いた壁計測に基づく平行平板間完全発達流の推定”, *ながれ*, Vol. 36 (2017).
- 2) 亀谷幸憲, 長谷川洋介: “乱流場における随伴解析に基づく複雑伝熱面の形状最適化”, *生産研究*, Vol. 70, pp. 29-32 (2018).
- 3) Constantinos Panagiotou, Davide Cerizza, Tamer Zaki, Yosuke Hasegawa: “乱流中におけるスカラー源推定のための移動センサ軌道の最適化”, *生産研究*, Vol. 70, pp. 33-35 (2018).

国際会議予稿集

- 1) Davide Gatti, Bettina Frohnappfel, Yosuke Hasegawa, Andrea Cimarelli, Maurizio Quadrio: *Energy Transfer Rates in Turbulent Channels with Drag Reduction at Constant Power Input*, *European Drag*

Reduction and Flow Control Meeting (EDRFCM2017), Rome, Italy, April 3-6 (2017).

- 2) Arjun J. Kaithakkai, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Dissimilar Control of Heat and Momentum Transfer in A Fully Developed Turbulent Channel Flow Via A Streamwise Traveling Wave Of Wall Blowing And Suction, European Drag Reduction and Flow Control Meeting (EDRFCM 2017), Rome, Italy, April 3-6 (2017).
- 3) Constantinos Panagiotou, Davide Cerizza, Tamer Zaki, Yosuke Hasegawa: Evaluation of Olfactory Search Algorithms Through Direct Numerical Simulation of Turbulent Scalar Transfer, Tenth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP10), Chicago, US, July 6-9 (2017).
- 4) Constantinos Panagiotou, Stavros Kassinos, Yosuke Hasegawa: A structure-based model for the transport of scalars in homogeneous turbulent flows, UMich/NASA Symposium on Advances in Turbulence Modeling, Ann Arbor, USA, July 11-13 (2017).
- 5) Kanji Kaneko, Takayuki Osawa, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa, Hiroaki Suzuki: Design of A Pumpless Chaotic Mixing Device Driven by The Vibration-induced Flow,"21st International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences (MicroTAS 2017), Savannah, Georgia, USA, October 22-26 (2017).
- 6) Kengo Takagi, Takahiro Tsukahara, Takayuki Osawa, Yosuke Hasegawa: Experimental Study Focusing on Micro Particles Behavior inside Evaporating Droplet Composed Water-ethanol Solvent, The Ninth JSME-KSME Thermal and Fluid Engineering Conference (TFEC9), Okinawa, Japan, October 28-30 (2017).
- 7) Yuki Akechi, Yuya Yamada, Takayuki Osawa, Takahiro Tsukahara, Yosuke Hasegawa: PIV Measurement of Viscoelastic Fluid Flow Behind a Cylinder in a Rectangular Duct, The Ninth JSME-KSME Thermal and Fluid Engineering Conference (TFEC9), Okinawa, Japan, October 28-30, (2017).
- 8) Yuya Yamada, Yuki Akechi, Takahiro Tsukahara, Yosuke Hasegawa: DNS Study of viscoelastic flow past a confined cylinder, The Ninth JSME-KSME Thermal and Fluid Engineering Conference (TFEC9), Okinawa, Japan, October 28-30, (2017).
- 9) Constantinos Panagiotou, Tamer Zaki, Yosuke Hasegawa: Optimization of sensor's trajectory for monitoring a point scalar source in turbulent environment, The Ninth JSME-KSME Thermal and Fluid Engineering Conference (TFEC9), Okinawa, Japan, October 28-30, (2017).
- 10) Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Adjoint-based shape optimization of heat transfer surface in turbulent flows with DNS-based eddy viscosity and diffusivity, The 70th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics (APSDFD2017), Denver, USA, November 9-21 (2017).
- 11) Yosuke Hasegawa, Davide Gatti, Bettina Frohnapfel: Andrea Cimarelli, Maurizio Quadrio, Impact of Drag Reduction Control on Energy Loss of a Fully Developed Turbulent Channel Flow, The 70th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics (APSDFD2017),

Denver, USA, November 9-21 (2017).

- 12) Arjun J. Kaithakkai, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Origin of Dissimilarity Between Momentum and Heat Transport In A Turbulent Channel Flow, 6th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT 2017), Chennai, India, December 10-13 (2017).
- 13) Yutaka Fukuda, Yukinori Kametani, Takayuki Osawa, Yosuke Hasegawa: Direct Numerical simulation of heat and fluid flow around pin-fin arrays and its experimental validation, 17th International Symposium On Transport Phenomena and Dynamics of Rotating Machinery (ISROMAC2017), Hawaii, USA, December 16-21 (2017).

国際会議アブストラクト

- 1) Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Adjoint-based shape optimization of heat transfer surface in turbulent flows with DNS-based eddy viscosity and diffusivity, The 70th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics (APSDFD2017), Denver, USA, November 9-21 (2017).
- 2) Yosuke Hasegawa, Davide Gatti, Bettina Frohanapfel, Andrea Cimorelli, Maurizio Quadrio: Impact of Drag Reduction Control on Energy Box of a Fully Developed Turbulent Channel Flow, The 70th Annual Meeting of the American Physical Society Division of Fluid Dynamics (APSDFD2017), Denver, USA, November 9-21 (2017).

学会講演論文

- 1) 高木健吾, 塚原隆裕, 大澤崇行, 長谷川洋介: 液滴蒸発過程における共焦点顕微鏡を用いたマイクロ粒子の時空間分布計測, 第54回日本伝熱シンポジウム, 大宮, 2017年5月24-26日.
- 2) 亀谷幸憲, 長谷川洋介: 随伴解析を用いた非定常熱流体場における三次元伝熱面の形状最適化, 第54回日本伝熱シンポジウム, 大宮, 2017年5月24-26日.
- 3) 金子完治, 大澤崇行, 亀谷幸憲, 鈴木宏明, 長谷川洋介: 微小旋回振動により誘起されるマイクロピラー周りの旋回流のPIV計測, 第54回日本伝熱シンポジウム, 大宮, 2017年5月24-26日.
- 4) 亀谷幸憲, 長谷川洋介: 随伴解析に基づく伝熱面の形状最適化及びその乱流熱伝達促進機構の考察, 流体力学会年会2017, 東京, 2017年8月30-9月1日.
- 5) 金子完治, 大澤崇行, 長谷川洋介, 鈴木宏明: マイクロ構造物周りの振動誘起流を利用したポンプレス混合器, 第8回マイクロ・ナノ工学シンポジウム, 広島, 2017年10月31-11月2日.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究 B 「血管網モデリングから学ぶ熱流体システム形状最適化」

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) 「車載用送風機の最適設計のための解析技術開発」
- 4) 「逆解析を用いた電池パック内の熱的最適配置に関する研究」

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)
- 3) 環境省 CO2 排出削減対策強化誘導型技術開発・実証事業「カーエアコンの省エネ促進によるCO2 削減実証事業」(研究分担者)

革新的シミュレーション研究センター 平成 29 年度 活動報告 Vol. 10

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

