



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 30 年度
活動報告

Vol. 11

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の能力を十分に引き出すことができる、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。計算機の特性と分野固有の特性との関係から、計算機の性能を引き出すために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です。

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、平成 25 年 4 月に一度目、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。

令和元年 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 30 年度 活動報告

Vol. 11

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～令和元年度)	
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 『超高圧水素インフラ本格普及技術研究開発事業 ／水素ステーションのコスト低減等に関連する技術開発 ／複合圧力容器の評価手法確立・技術基準整備に関する技術開発』 (実施期間: 平成 30～令和 3 年度)	
3) 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 『超高圧水素インフラ本格普及技術研究開発事業／国際展開, 国際標準化等に関する研究開発 ／燃料電池自動車の国際基準調和・国際標準化に関する研究開発』に係る再委託業務 (実施期間: 平成 30～令和 2 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」	
(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	35

1. 革新的シミュレーション研究センターの概要

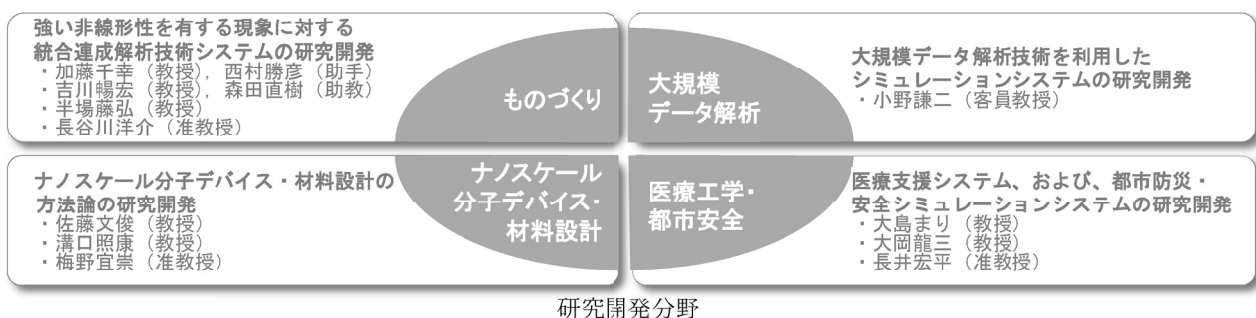
革新的シミュレーション研究センター (Center for Research on Innovative Simulation Software, 略称 CISS) は、2002 年 1 月に設置された「計算科学技術連携研究センター」の研究成果を引き継ぐ形で、2008 年 1 月に生産技術研究所附属の教育・研究施設として設置され、2013 年 4 月に一度目、2018 年 4 月に二度目の改組を実施しました。①世界をリードする先端シミュレーションソフトウェアの研究開発、②研究開発成果の社会への普及、③シミュレーションソフトウェアを開発・利活用する人材育成のための教育・研究基盤を強化することを目的として活動を行っています。

第 1 期 CISS では、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、第 1 期 CISS の活動の実績を踏まえて、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きました。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活動してきました。

第 3 期 CISS では、引き続き、前述の目的のため、「京」を用いて先端的な成果の実用化に向けた研究開発と産学官連携拠点としての活動を推進するとともに、将来の計算機環境に合致する新しいアルゴリズムの研究開発を行っています。具体的には、①量子化学計算や第 1 原理計算を用いた、タンパク質分子や材料界面の反応・機能解析技術によるナノスケール分子デバイス・材料設計の方法論の研究開発、②ものづくりイノベーション創出基盤となり得る、強い非線形性を有する現象に対する統合連成解析技術システムの研究開発、③生体内流動シミュレーションと可視化技術を融合した医療支援システム、および、都市防災・安全シミュレーションシステムの研究開発、④大規模データ解析技術を利用したシミュレーションシステムの研究開発、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に参画しています(実施期間:2014～2019 年度)。



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



半場 藤弘 教授
Fujihiro HAMBACH, Professor
所属 東京大学生産技術研究所
Institute of Industrial Science, The University of Tokyo
専門分野 流体物理学
Fluid Physics



大島 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



溝口 照康 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



大岡 龍三 教授

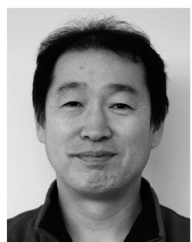
Ryoza OOKA, Professor

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 都市エネルギー工学

Urban Energy Engineering



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



梅野 宜崇 准教授

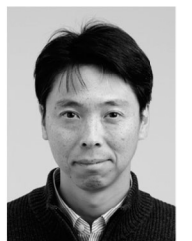
Yoshitaka UMENO, Associate Professor

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



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



長井 宏平 准教授

Kohei NAGAI, 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 成熟社会インフラ工学

Infrastructure Management for Developed Society



森田 直樹 助教

Naoki MORITA, Assistant Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 大規模シミュレーション

Large-scale Simulation



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～令和元年度)

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。本格実施期間の2年目にあたる平成29年度には、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、最終年度である令和元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・デザインの成果を、課題内の主要なアプリケーションであるCUBE(サブ課題B)、FFV-HC-ACE(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・デザインの成果に関しては、「(2)他研究機関との連携」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、令和元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、平成30年度に得られた、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, メーカーや国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構, 他のサブ課題が抱える実設計問題に適用して有効性を実証する. また, 開発した設計プラットフォームはポスト京マシンの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 30 年度は, 以下の項目について, 研究開発されたコアとなる要素技術等を実装したキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による検証解析を実施した. 具体的の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 多目的設計探索技術の「京」レベルの計算機などによる検証解析およびキラーアプリケーションのさらなる性能向上に関しては, 多目的設計最適化の性能向上に関する研究開発を, 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. この結果, Decomposition 戦略を多目的進化計算に導入することにより軸流圧縮機の最適化問題などの実問題において, 多目的設計最適化に必要な計算時間を約 1/2 にできることを確認した.

b) 高速計算技術

b)-1 時間領域並列化法のキラーアプリへの実装と性能評価に関しては, 双曲型方程式に対する Parareal 法の収束性改善法の評価を, 国立大学法人九州大学が実施した. この結果, 緩和型 Parareal 法は従来より 10~20%程度計算時間を削減できることを確認した.

b)-2 低 B/F アルゴリズムのキラーアプリへの実装と性能評価に関しては, 多ベクトル解法を応用した直接法と反復法のハイブリッド解法の研究開発を, 国立大学法人九州大学が実施した. この結果, BICGSTAB 法の前処理として従来の Red-Black SOR 法を用いた場合と比較して, 反復回数が最大 1/5 削減され, 計算速度は同等であることが分かった.

c) 上流設計技術

c)-1 上流設計プラットフォームのキラーアプリでの機能実証に関しては, ワークフローシステム WHEEL の開発を, 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. この結果, サブ課題 A の多目的設計探索技術で開発した Cheetah と連携した多目的設計探索ワークフローの動作を確認した. また, 京 micro キューを用いた 6,000 ジョブ自動実行を実現し, Capacity Computing 事例における WHEEL の有用性を示した.

(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、ストロングスケーリング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 30 年度は、以下の項目について、研究開発されたコアとなる要素技術等を実装したキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による検証解析を実施した。

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を用いた設計システムによる車両空力の産業応用解析に関しては、昨年度に引き続き WLTP 認証取得に向けた実車実証空力解析とボンネット周り狭帯域空力音、さらに新たな課題として空力多目的形状最適化解析を、国立大学法人神戸大学が実施した。この結果、WLTP 実証解析で求められているタイヤ・ホイール回転の条件下で認証に要求されると想定される精度での空気抵抗予測が可能であることを実証した。狭帯域音予測では、フード領域周辺からの音の発生を再現すると共に、そのポスト京での定量的予測に向けた解像度の見積もりを行った。空力多目的形状最適化では、四つの目的関数に対して、サブ課題 A と連携した設計探索を行い、その有用性を実証した。
- b) ポスト「京」システムを対象とした基盤アプリの高速化と大規模化に関しては、AMR (Adaptive Mesh Refinement) の実装と、ソルバーのプロファイル・チューニングを、国立研究開発法人理化学研究所が実施した。この結果、ポスト「京」では「京」に対してノード当たり十数倍の性能向上、並列性能を合わせれば 20 数倍の性能向上の見込みがあることが確認された。
- c) オイラー構造解析手法を用いた設計システムによる実車モデル構造の検証解析に関しては、時間進行スキームの改良、PIC 法の実装とその薄板に対する精度検証、幾何学的境界条件の付与法の開発やその実証を、国立大学法人山梨大学が実施した。この結果、薄板構造ベンチマークでの妥当性を確認すると共に、実車自動車ホワイトボディでその有用性を確認した。

(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 30 年度は、以下の項目について、研究開発されたコアとなる要素技術等を実装したキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による検証解析を実施した。

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 ループ構造組み換えによるコアカーネル高速化技術の開発に関しては、運動方程式ルーチンのループ組み換えによる高速化を実施した。この結果、組み換え部分で約 3 倍、ループ全体で約 2 倍の高速化を達成した。

a)-2 複数ベクトル利用による高速化技術のシステム実装に関しては、運動方程式における非線形項の取り扱いに関する基礎検討および実装を実施した。この結果、非線形項を含むシステムにおいても、マトリックスソルバー内で係数計算をする手法を実装することにより複数ベクトル化できる目途を立てることができた。

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による実証解析に関しては、スキームの変更および精度検証を実施した。この結果、乱流から発生する空力騒音の予測精度の向上を実現した。

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 複雑形状まわり流れに関する実証解析に関しては、階層的解像度を有するマルチレベルキューブの作成機能の開発を、国立大学法人九州大学が実施した。この結果、これまでの単一キューブのシステムに対し大幅に計算コストを削減できることを確認した。

d) LES(Large Eddy Simulation)解析用の壁面モデルの研究開発

d)-1 壁法則併用型 LES 壁面モデルのプロトタイプコードの開発と検証に関しては、サブ課題 D で開発する壁面モデルの実装およびその基礎検証を実施した。この結果、実装した壁面モデルの有用性を確認した。

d)-2 乱流構造に基づく LES 壁面モデルのプロトタイプコードの開発と検証に関しては、確率密度関数を参照したフィードバック項の実装およびその検証を実施した。この結果、上記の手法の

有用性を確認した。

(サブ課題 D) 航空機の設計・運用革新を実現するコア技術の研究開発

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

平成 30 年度は、以下の項目について、研究開発されたコアとなる要素技術等を実装したキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による検証解析を実施した。

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レイヤー格子への対応に関しては、背景格子とレイヤー格子間でのデータ補間機能の研究開発を、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構が実施した。この結果、背景格子とレイヤー格子を用いた解析基盤が実装できた。

a)-2 直交格子ソルバーにおける LES (Large Eddy Simulation) 壁面モデルの研究開発に関しては、既存構造格子ソルバーを用いて境界非適合格子に対する LES 壁面モデルの実装と検証を、国立大学法人東北大学が実施した。この結果、提案する LES 壁面モデルが物体非適合格子においても有効であることが確認された。

b) 設計評価技術の研究開発

b)-1 高速バフエット/低速失速解析における LES 壁面モデルの基礎検証に関しては、既存構造格子ソルバーを用いた精度検証を、国立大学法人東北大学が実施した。この結果、高速バフエットに関しては平衡 LES 壁モデルの有効性を確認したと同時に、LES 壁面モデルを使わない解析との比較により、平衡/非平衡 LES 壁面モデルの特性を確認できた。低速失速に関しては、想定ケースの解析が完了した。

c) 飛行安全性向上技術の研究開発

c)-1 非線形飛行力学モデルデータベースに基づく機体運動シミュレータの構築に関しては、空力データベースの構築に向けたパラメトリック計算を、学校法人東京理科大学が実施した。この結果、現時点までの計算で非線形な空力係数の変化が確認できた。

(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 30 年度は、以下の項目について、研究開発されたコアとなる要素技術等を実装したキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による検証解析を実施した。

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性能の最適化に関しては、接触を含む数億自由度規模の実問題への適用を実施した。この結果、本プロジェクトで開発した陽的自由度消去を利用した反復解法が直接法では解けない規模の問題に対しても安定的に求解可能であることを確認した。
- b) アセンブリ問題に対する並列領域分割法の性能評価に関しては、実証例題で必要となる規模のメッシュ作成においてリファイナを利用することから、接触ペアの面グループ化を進め、またそれに伴うパーティショナ対応を実施した。この結果、数十億自由度規模の接触を含む実証例題のメッシュが作成・領域分割できる機能を確認した。
- c) 部品モデルの溶接シミュレーションに対する精度検証に関しては、複雑な溶接順序・肉盛り部メッシュの設定および汎用的な入熱条件の入力をおこなうための機能拡張と、大規模望遠鏡の架台部のアーク溶接工程とジブクライミングクレーンマストのアーク溶接工程の2つの実証例題について解析データ・セットの作成を実施した。この結果、アーク溶接工程を模擬する熱伝導解析および熱変形解析の実施から、開発機能が定性的に問題ないことを確認した。
- d) プリポストの動作検証・機能改善に関しては、複雑かつ複数の溶接線部の抽出機能や要素タイプの拡充を実施した。この結果、大規模望遠鏡の架台部のアーク溶接工程のような複雑な形状モデルも対応可能となった。

(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 30 年度は、以下の項目について、研究開発されたコアとなる要素技術等を実装したキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による検証解析を実施した。

具体的に実施した内容に関して以下に記す。

a)ジェットエンジンファンブレードの開発段階で試作する試験体の熱可塑成形シミュレーションを「京」クラスコンピュータで実施

a)-1 ミクロスケールシミュレータによる積層プリプレグシートの熱間プレスシミュレーションの実施に関しては、1 層プリプレグシートの反り解析を実施した。この結果、2000 万節点規模モデルに対してもミクロスケールシミュレータは正常に機能していることが検証された。

a)-2 マクロスケールシミュレータによる積層プリプレグシートの熱間プレスシミュレーションの実施に関しては、8 層プリプレグシートの反り解析を実施した。この結果、400 万節点規模モデルに対してもマクロスケールシミュレータは正常に機能していることが検証された。

b)実成形品との照合によるシミュレーション結果の検証

b)-1 積層プリプレグシートの熱間プレス試験結果とミクロスケールシミュレーション結果との照合によるミクロスケールシミュレータの検証に関しては、1 層プリプレグシートの反り量の照合を実施した。この結果、シミュレーション結果は試験結果の約 1/10 と差がみられたため、物性値の影響、繊維の不均一性等について検討が必要であることが確認された。

b)-2 積層プリプレグシートの熱間プレス試験結果とマクロスケールシミュレーション結果との照合によるマクロスケールシミュレータの検証に関しては、8 層プリプレグシートの反り量の照合を実施した。この結果、シミュレーション結果は試験結果の約 1/4 であり、適切な予測が可能であることが確認された。

b)-3 積層プリプレグシートのミクロスケールシミュレーション結果とマクロスケールシミュレーション結果との比較を通した直交異方性マクロスケールモデルの検証に関しては、1 層プリプレグシートの反り量の比較を実施した。この結果、そり発生の要因と推定される断面内の応力分布に関してはミクロスケールシミュレーションとマクロスケールシミュレーションの結果は一致しているものの、反り量の結果は大きく乖離した。誤差発生のメカニズムについて、さらなる検討が必要である。

(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『超高压水素インフラ本格普及技術研究開発事業／水素ステーションのコスト低減等に関連する技術開発／複合圧力容器の評価手法確立・技術基準整備に関する技術開発』

(実施期間:平成 30～令和 3 年度) 吉川暢宏(東京大学生産技術研究所)

実施機関:一般財団法人石油エネルギー技術センター(JPEC), 高压ガス保安協会(KHK),
国立大学法人東京大学

[概 要]

「第4次エネルギー基本計画」(2014年4月閣議決定)では、エネルギー政策の基本的視点として、「3E+S」、安全性(Safety)を前提とした上で、エネルギーの安全保障(Energy Security)、経済効率性の向上(Economic Efficiency)による低コストでのエネルギー供給を実現し、合わせて環境への適合(Environment)を図ることが確認されている。また「水素をエネルギーとして利用する“水素社会”についての包括的な検討を進めるべき時期に差し掛かっている」等の記載が盛り込まれており、多様化した柔軟なエネルギー需要構造の構築に取り組むこととされている。更に2017年12月には再生可能エネルギー・水素等関係関係会議にて「水素基本戦略」が発表され、2050年を視野に目指す目標や官民が共有すべき方向性・ビジョンが示された。

経済産業省資源エネルギー庁にて作成された「水素・燃料電池戦略ロードマップ」(2016年改訂)に、フェーズ1として運輸部門においての水素の利活用として水素ステーションの整備、FCVの普及目標値が明記されている。また、未来投資戦略2017では水素ステーションの戦略的整備に向けた官民一体の新たな推進体制の構築、コスト低減等に向けた技術開発・実証、新たな規制改革実施計画に基づく水素ステーションの保安管理等に関する規制改革をパッケージで推進しFCV、FCバス、水素ステーションの普及を加速化すると記載されている。水素・燃料電池戦略ロードマップで示された水素ステーションの2020年160箇所、2025年320箇所程度の設置を実現するためには、水素ステーション事業の自立化に向けたさらなるFCVの導入支援と合わせてステーション整備費、運営費、更には水素調達コストの低減に係る技術開発が重要となる。

2008 年より実施してきた「水素製造・輸送・貯蔵システム技術開発事業」において、水素ステーション用複合圧力容器蓄圧器(以下、複合圧力容器)の研究開発が推進され、当該水素ステーション用複合圧力容器のガイドラインが策定された。また、2014 年9 月には圧縮水素蓄圧器用複合圧力容器に関する技術文書KHKTD5202 (2014) が制定された。2013年より実施してきた「複合圧力容器蓄圧器の基準整備等に関する研究開発」では、当該複合圧力容器の評価方法のひとつである疲労試験(圧力サイクル試験)を、複合圧力容器が実際に使用される運転条件を模擬した試験条件で実施できるよう、KHK TD5202 (2014) 改定に資する試験データを提示しサイクル試験費用削減、試験時間短縮を可能とした。さらに、近年米国・欧州で実用化されつつあるタイプ2 複合圧力容器について、水素ステーション低コスト化の一助とすべく、技術基準案の整備に着手した。

このような環境の下、本事業は水素ステーションに設置される複合圧力容器のコスト削減に向けた複合圧力容器評価方法の簡素化及び使用寿命延長に関する技術開発を目的とするものである。具体的には複合圧力容器構成材料の材料試験片による評価方法、複合圧力容器の応力解析方法を確立し、設計疲労曲線を用いた疲労設計、累積損傷則の適用を可能とし、実容器疲労試験費用、試験時間の削減を図ると共に使用寿命の延長を図る。

[詳 細]

①応力解析及び疲労解析に基づく複合圧力容器設計手法の確立に向けた技術開発

複合圧力容器はライナー材料と CFRP 材料で構成されている。ライナー材料に対して最適疲労曲線を求め、CFRP 材料の疲労寿命がライナー材料に比して十分長いことを確認することによる、多数の実容器圧力サイクル試験に依らない設計手法の確立を検討し、その設計手法の妥当性を実容器の圧力サイクル試験により検証する。また、ライナー材料の軸荷重試験片と管状試験片および樹脂単体と CFRP 材料の軸荷重試験片に関して得られた疲労試験データと、実容器に関する詳細な有限要素シミュレーションに基づく応力解析結果から、実容器の圧力サイクル寿命を予測する疲労強度評価法を一般化させることを行う。そのために、円筒試験体および実容器の詳細な有限要素シミュレーションに基づく応力解析結果と疲労試験データを照合し、円筒試験体および実容器の圧力サイクル寿命予測を適確に行えることを示し、手法の妥当性を実証する。

①-1 ライナー試験片評価法の検討(KHK)

タイプ 3 複合圧力容器の圧力サイクル寿命を予測するための、アルミニウム合金に関する最適疲労曲線および平均応力補正方法について検討するため、以下の試験を行う。

(1)アルミニウム合金軸荷重試験片を用いた試験

アルミニウム合金材料について、軸荷重試験片を用い、自緊処理の効果を定量的に明らかにするため、平均応力の条件を変えた疲労試験を実施する。

(2)アルミニウム合金管状試験片を用いた試験

アルミニウム合金材料について、3 軸応力度が疲労強度に与える影響を明らかにするため、内圧を加えた管状試験片を用いた疲労試験を実施する。

①-2 CFRP試験片評価法の検討(KHK, 東京大学)

複合圧力容器に用いられる CFRP 材料の最適疲労曲線の導出方法および平均応力補正方法について検討するため、以下の試験とシミュレーションを行う。

(1)樹脂単体軸荷重試験片を用いた試験

CFRP の疲労特性に及ぼすマトリックス材の影響を調べるため、エポキシ樹脂について、軸荷重試験片を用い、平均応力を変えた疲労試験を実施する。

(2)CFRP 軸荷重試験片を用いた試験

マトリックス材の疲労強度との相関を明らかにするため、CFRP 材料について、軸荷重試験片を用い、平均応力を変えた疲労試験を実施する。

(3)ミクロスケール有限要素シミュレーション

CFRP 軸荷重試験片について、炭素繊維とマトリックス材を区分したマイクロモデルを作成し、有限要

素シミュレーションにより、繊維間マトリックス材に発生する応力を詳細に評価する。その応力振幅からエポキシ樹脂単体を用いて行った疲労試験の結果より疲労寿命を予測し、当該 CFRP 試験片の疲労寿命と照合することで、エポキシ樹脂の疲労特性と CFRP の疲労特性の相関、特に平均応力の影響を明らかにする。エポキシ樹脂単体の設計疲労曲線と当該 CFRP 試験片のミクロスケール有限要素シミュレーションによる応力評価結果から、積層構成の異なる試験片ごとに定められる CFRP 材料の設計疲労曲線を作成する手法を構築する。

①ー3 円筒試験体評価法の検討(株式会社日本製鋼所(JSW), 東京大学)

円筒試験体は円筒ライナーに CFRP を巻いたものであり、自緊処理を施した実容器に近い応力状態を模擬した試験体として有用な評価方法と考えている。タイプ 2 複合圧力容器相当のフープラップ複合圧力容器対応円筒試験体およびタイプ 3 複合圧力容器相当のフルラップ複合圧力容器対応円筒試験体に関する詳細な有限要素シミュレーションに基づく応力解析結果と、共同実施者が行ったライナー材料および樹脂単体と CFRP 材料の疲労試験データを照合することで、円筒試験体の圧力サイクル寿命予測を適確に行えることを示し、手法の妥当性を実証するため、以下の試験を行う。また、共同実施者が行う実容器に関する圧力サイクル試験結果から得られる寿命に関しても、同様の手法にて予測可能であることを実証し、この円筒試験体を用いた圧力サイクル試験を複合圧力容器の疲労寿命評価方法として提案する。

(1)フープラップ複合圧力容器対応円筒試験体による圧力サイクル試験

フープ巻きのみ施した円筒試験体用い、自緊処理の程度を変えた条件で残留応力測定、破裂試験、圧力サイクル試験を実施し、円筒試験体ライナー材料の応力状態と疲労特性におよぼす自緊処理の影響を把握する。試験体の設計を有限要素シミュレーションにより行い、CFRP 材料を疲労破壊させる圧力サイクル試験を実施し、CFRP 材料の疲労特性におよぼす自緊処理の影響を把握する。

(2)フルラップ複合圧力容器対応円筒試験体による圧力サイクル試験

円筒試験体作製のためのヘリカルワインディング方法を開発し、フープ巻きとヘリカル巻きを施した円筒試験体を用い、自緊処理の程度を変えた条件で残留応力測定、圧力サイクル試験を実施し、円筒試験体ライナー材料の応力状態と疲労特性におよぼす自緊処理の影響を把握する。試験体の設計を有限要素シミュレーションにより行い、CFRP 材料を疲労破壊させる圧力サイクル試験を実施し、CFRP 材料の応力状態と疲労特性におよぼす自緊処理の影響を把握する。

①ー4 自緊効果を考慮した設計疲労曲線の作成(東京大学)

共同実施者が実施した軸荷重試験片を用いて導出した最適疲労曲線に基づき、圧力サイクルにより発生する容器の応力状態を勘案して、実容器のライナー材料および CFRP 材料に関する設計疲労曲線の導出方法を開発する。共同実施者が実施した、円筒試験体を用いた圧力サイクル試験結果および実容器を用いた圧力サイクル試験結果と照合して、開発した設計疲労曲線導出手法の妥当性を検証する。

(1)ライナー材料の設計疲労曲線の作成

複合圧力容器のライナー材料に関する設計疲労曲線を平均応力および応力多軸性の因子を導入して定める。

(2) CFRP 材料の設計疲労曲線作成手法の開発

エポキシ樹脂単体の軸荷重試験片を用いて行った疲労試験の結果と CFRP 材料軸荷重試験片を用いて行った疲労試験の相関より導出された CFRP 材料の疲労寿命予測方法を、複合圧力容器の CFRP 材料に適用する手法を開発する。

①-5 応力解析及び疲労解析に基づく複合圧力容器設計手法の実証(JPEC)

前述の①-1, ①-2, ①-3, ①-4の結果に基づき、複合圧力容器構成材料(ライナー, CFRP)の水素特性および設計疲労曲線から算出される容器寿命を検証するため、実容器の圧力サイクル試験を実施する。算出された容器寿命と実容器試験結果を比較、検証して本手法の妥当性を実証する。

また、水素ステーションでのさまざまな運転モードに対応した使用回数を、この設計疲労曲線に累積損傷則を適用してカウントすることで寿命延長につなげる。加えて、ISO TC197 WG15 への容器寿命検討に関する提案が出来るようにデータ取得、理論構築をおこなう。

②複合圧力容器の技術基準の整備に向けた技術開発

(1)タイプ2 複合圧力容器自主基準案の作成(JPEC)

実容器試験等、技術基準の整備に必要なデータ採取を実施する。TF 等にて自主基準構成案の内容を議論し、タイプ2 複合圧力容器の技術基準に資する自主基準案を完成させる。

(2)フルラップ複合圧力容器の技術基準の整備(JPEC)

フルラップ複合圧力容器に関して、自緊を考慮した設計疲労曲線の作成の実現に資する材料評価試験及び実容器圧力サイクル試験データを蓄積し、実容器試験による検証を行い、設計疲労曲線を用いた疲労評価方法を確立する。また、水素ステーションでのさまざまな運転モードに対応した使用回数を、設計疲労曲線に累積損傷則を適用してカウントする手法を提案して、複合圧力容器の寿命延長につなげる。得られた成果を基に KHK S0225 および ISO TC197 WG15 の改正に向けた提案を行う。

- 3) 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構『超高压水素インフラ本格普及技術研究開発事業／国際展開、国際標準化等に関する研究開発／燃料電池自動車の国際基準調和・国際標準化に関する研究開発』に係る再委託業務
(実施期間:平成30～令和2年度) 吉川暢宏(東京大学生産技術研究所)

[概要]

燃料電池自動車(FCV)の普及拡大を加速するための高压水素部品(圧縮水素容器等)の低コスト化にあたり、グローバル流通製品としての自動車の要件を鑑みると、国内はもとより諸外国の規制の下で安全性を確保しつつ商品競争力を付加することが必要不可欠となる。そのため本研究開発では、HFC V-GTR(GTR13:水素および燃料電池自動車に関する世界統一技術基準)の合理的な改定および円滑な国内導入に資する研究開発を行い、FCVの円滑な国際取引を促し、安全性を確保しつつ高压水素部品およびFCVの低コスト化、ひいては水素ステーションのコスト低減を実現する。

[詳 細]

以下の 2 つのサブテーマを設定した。

サブテーマ1:FCV の国際技術基準(HFCV-GTR Phase2 等)に関する国際基準調和・標準化活動

サブテーマ2:FCV の国際技術基準(HFCV-GTR Phase2 等)策定に資する研究開発

サブテーマ1については下記の Phase2 審議課題を想定し、審議を進展させるための研究開発を行う。

- ✓ 容器破裂圧力適性化
- ✓ 金属材料の水素適合性試験法
- ✓ アルミニウム合金の HG-SCC(湿潤ガス応力腐食割れ)試験法
- ✓ 容器火炎暴露試験法
- ✓ FCV 性能要求条件最適化による水素 ST コスト低減への貢献

サブテーマ2については下記の項目について、国際技術基準(HFCV-GTR Phase2 等)への日本提案作成に資する技術開発を行う。

- ・2-1:容器火炎暴露試験法見直し
- ・2-2:金属材料の水素適合性試験法確立と鋼種拡大

これらサブテーマのうち、本再委託事業においては、「サブテーマ 2-2:金属材料の水素適合性試験法確立と鋼種拡大」について、「金属材料の水素適合性試験法確立と鋼種拡大の計画・とりまとめ」を行う日本自動車研究所および「水素適合性材料評価データの取得・解析」を行う産業技術総合研究所と連携し、「水素適合性試験法案の詳細検討(海外提案の適否等)および案文作成」を行う。

HFCV-GTR Phase1 においては、金属材料の水素適合性試験法を規定するには至らず、各国において各々の基準を適用することとなった。我が国においては、現状、高圧水素容器および附属品で使用可能な材料はアルミニウム合金 6061-T6(成分規制あり)とステンレス鋼 SUS316L(ニッケル当量規制あり)のみとなっている。2017 年 10 月に開始された HFCV-GTR Phase2 では、材料指定や成分規定ではなく、パフォーマンスベースで水素適合性を評価するための試験法についての審議が開始された。2017 年度まで実施した「NEDO 水素利用技術研究開発事業」の成果として、オーステナイト系ステンレス鋼に限りではあるが、水素適合性試験法および判定基準の日本案を作成し、米国 SAE へ提案した。SAE での議論の後、日本案をベースとした提案が HFVC-GTR Phase2 へ上程された。今後の検討課題となるのは、平滑試験片を用いた試験を標準とする日本案と、比較的試験の容易な切欠き試験片を用いた試験を志向する欧米案とを整合性する案を作成し実証することである。自動車用およびスタンド用の水素部品のコスト低減効果を上昇させるため、特に SUS304 市中材に焦点を当てた策案を実施する。

国内での連携に加えて、米国 Sandia National Laboratories(SNL)およびドイツ MPA Stuttgart, さらには中国、韓国等の海外研究機関と連携し、材料試験データを共同で取得する国際連携体制を構築。水素スタンドの鋼種拡大およびその技術基準化の取組との連携も強化し、プロジェクトへの投資効果の最大化を図る。

(2) 他研究機関との連携

国立研究開発法人理化学研究所

上記(1)に記載された文部科学省「ポスト「京」」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」(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センター(R-CCS)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(略称, 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 30 年度は, 平成 29 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実施した。さらに, 株式会社富士通の協力を得て, 最適化された各カーネルを実装したフルアプリ(FFB Version 49.0)を開発し, 現在, ポスト「京」の実ノードを用いた性能評価を実施している。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), FFV-HC-ACE(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(実効最大メモリスループット 46 GB/s~47 GB/s)を最大限発揮できるようにするとともに, メモリアクセス回数に対する演算回数の比(Flops per Byte)最大化す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抜本的に変更することにより, FFB 全体として「京」で 2.1 倍の高速化を達成した。最適化された各カーネルの性能をポスト「京」のシミュレータにより詳細に評価することにより, ポスト「京」において当初目標の 2 倍以上の高速化を達成できる見通しが得られた。FFB では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(前述の Flops per Byte)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ている。これらはポスト「京」シミュレータあるいはポスト「京」性能推定ツールによる予測値であるが, 前述のよう

に現在はポスト「京」の実ノードを用いて 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」シミュレータを用いた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。

計算科学分野は科学技術や先端産業を牽引する新しい基盤である。しかし、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。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が必要であるからである。

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・展開する担い手がいないため、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のスパコンシステムの利用」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.
- ・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.20, No.6, 2018 年 11 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4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、そして、それを踏まえて、どのような最終成果が得られるか、および、ポスト「京」を用いて何を行うかについて議論し、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を旨として開催した。

開催日： 平成31年3月13日(水)10:00-17:10

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： 理化学研究所 計算科学研究センター

高度情報科学技術研究機構

計算科学振興財団

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,
日本流体力学学会(50音順)

参加者数： 269名

資料作成： 予稿集 126頁

○プログラム

(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)

10:00-10:15 開会の挨拶

根津 純也 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

岸 利治 東京大学生産技術研究所 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

I. 次世代最適化・高速化技術開発戦略

10:45-11:30 (サブ課題 A) 設計を革新する多目的設計探索・高速計算技術の研究開発

大山 聖 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授
小野 謙二 九州大学 情報基盤研究開発センター 教授・センター長
後藤 彰 株式会社荏原製作所 技術・研究開発統括部 技監

II. 次世代 CFD ソルバー開発戦略 part 1

11:30-12:15 (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

坪倉 誠 神戸大学大学院 システム情報学研究科 教授
寺村 実 株式会社本田技術研究所 四輪 R&D センター
第 11 技術開発室 第 5 ブロック 主任研究員

(司会 吉川 暢宏 東京大学生産技術研究所 教授)

13:30-14:00 招待講演

数値シミュレーション技術が切り拓く航空機空力設計プロセスの革新
中尾 雅弘 三菱重工業株式会社 総合研究所 副所長

III. 次世代 CFD ソルバー開発戦略 part 2

14:00-14:30 (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

高木 亮治 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授

14:30-15:15 (サブ課題 C) 準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの研究開発

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所
革新的シミュレーション研究センター長・教授
西川 達雄 日本造船技術センター 課長

(司会 小野 謙二 九州大学 情報基盤研究開発センター 教授・センター長)

IV. 次世代材料・構造ソルバー開発戦略

15:35-16:20 (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

奥田 洋司 東京大学大学院 新領域創成科学研究科 教授
高倉 大典 株式会社 IHI 技術開発本部 基盤技術研究所 構造研究部
主任研究員

16:20-17:05 (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

吉川 暢宏 東京大学生産技術研究所 教授
穂坂 俊彦 株式会社 IHI 航空・宇宙・防衛事業領域 技術開発センター
エンジン技術部 主査

17:05-17:10 閉会の挨拶

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所
革新的シミュレーション研究センター長・教授/課題⑧責任者

第 34 回生研 TSFD シンポジウム

乱流数値シミュレーション研究者の意見交換の場として、様々な研究分野からご参加を得てきた「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 34 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 31 年 3 月 8 日(金) 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 半場 藤弘(東京大学)

9:50-11:50 セッション 1 司会 大岡 龍三(東京大学)

回転軸方向への急速な乱流エネルギー輸送とヘリシティを用いたモデリング

稲垣 和寛, 半場 藤弘(東京大学)

単体建物周辺における高浮力ガス拡散に関する簡易圧縮性 $k-\epsilon$ モデルを用いた数値予測

林 超, 大岡 龍三, 菊本 英紀(東京大学), 佐藤 大樹(大成建設株式会社)

航空機エンジンのファン動翼におけるスweepとその防氷効果に関する数値的調査

八木 智哉, 福留 功二, 山本 誠(東京理科大学), 鈴木 正也, 賀澤 順一, 水野 拓哉
(宇宙航空研究開発機構)

高レイノルズ数乱流混合層におけるコヒーレント微細渦の大規模クラスタリング

伊藤 宗嵩(東京大学), 中吉 嗣(明治大学), 源 勇気, 志村 祐康, 店 橋護
(東京工業大学)

13:30-15:00 セッション 2 司会 北澤 大輔(東京大学)

LES を用いた単体建物モデル周辺気流におけるピーク風速の予測と不確かさ解析に関して

菊本 英紀(東京大学), 大風 翼(東京工業大学), 池谷 直樹(九州大学), 富永 禎秀
(新潟工科大学)

流束再構築法による陰的 LES の性能評価

芳賀 臣紀(宇宙航空研究開発機構)

Turbulent channel flow を用いた格子ボルツマン法の検証

韓 夢涛, 大岡 龍三, 菊本 英紀(東京大学)

15:20-17:20 セッション 3 司会 菊本 英紀(東京大学)

[招待講演]LES の高精度化に向けて非等方 SGS モデルが果たす役割について

安倍 賢一(九州大学)

スケール相似則項を用いた安定化 SGS モデルの検討

小林 宏充(慶應義塾大学)

SGS 応力輸送方程式型の LES モデリングを目指した平面乱流噴流 DNS データによる
アプリオリテスト

松山 新吾(宇宙航空研究開発機構)

b) ワークショップ

ポスト「京」重点課題⑧・重点課題⑥ 第 2 回 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を開催した。

今回の統合ワークショップでは、熱・流体・材料・構造・マルチフィジックスすべての分野で関心の高まっている、「高速化」および「最適化」に焦点をあて議論した。

開催日： 平成 30 年 9 月 26 日(水) 10:00-17:30

場 所： 東京大学生産技術研究所 An 棟 4 階セミナー室
(高速化セッション: An401-402, 最適化セッション: 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： 53 名

資料作成： 高速化セッション予稿集 55 頁, 最適化セッション予稿集 74 頁

○プログラム

A. 高速化セッション

(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)

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

10:05-10:10 趣旨説明

高木 亮治 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 准教授

10:10-10:35 ポスト「京」重点課題プロジェクトにおける FrontFlow/blue (FFB) の開発状況とコ・デザインによる高速化の状況

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 センター長・教授

熊畑 清 理化学研究所計算科学研究センター 開発研究員

山出 吉伸 東京大学生産技術研究所 協力研究員

- 10:35-11:00 高速化♡萌(実行時プロファイリングツール PMlib)
小野 謙二 九州大学情報基盤研究開発センター 教授・センター長
- 11:00-11:25 時間並列計算法の研究開発動向と今後の展望
飯塚 幹夫 九州大学情報基盤研究開発センター 特任教授
- 11:25-11:50 詳細化学反応機構を用いた燃焼解析に対する化学反応の高速積分法
森井 雄飛 東北大学流体科学研究所 助教
- 11:50-12:15 ポスト「京」における ADVENTURE の CPU 単体性能チューニングについて
南 一生 理化学研究所計算科学研究センター ユニットリーダー

B. 最適化セッション

(司会 小野 謙二 九州大学情報基盤研究開発センター 教授・センター長)

- 13:15-13:20 趣旨説明
大山 聖 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 准教授
- 13:20-13:45 解析実行ワークフローツール WHEEL の紹介と適用事例
川鍋 友宏 理化学研究所計算科学研究センター テクニカルスタッフ
- 13:45-14:05 大規模並列計算環境下において効率的な探査を実現する多目的進化計算アルゴリズムについて
福本 浩章 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 研究開発員
- 14:05-14:25 ターンアラウンドタイム低減に向けた実数値 GA における設計変数の適応的離散化
立川 智章 東京理科大学工学部 講師
- 14:25-15:00 形状最適化理論と実問題への応用
畔上 秀幸 名古屋大学大学院情報学研究科 教授

(司会 大山 聖 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 准教授)

- 15:20-15:55 トポロジー最適化によるマルチマテリアル構造設計
西脇 眞二 京都大学大学院工学研究科 教授
- 15:55-16:30 自動車の熱流体問題における形状最適化の適用事例
伊藤 篤 三菱自動車工業株式会社 主任
- 16:30-17:05 フィラー充填ゴムのモルフォロジーに関する材料設計指針の探索
小石 正隆 横浜ゴム株式会社 理事・研究室長
- 17:05-17:30 ディスカッション:ポスト「京」時代の最適化に向けて

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 50 回 LES 研究会

開催日： 2018 年 5 月 8 日 (火) 14:00-17:00

場 所： 東京大学生産技術研究所 As 棟 3 階 中セミナー室 5 (As313)

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

松山 新吾 宇宙航空研究開発機構

空力騒音の数値予測とその評価

吉野 崇 株式会社本田技術研究所

第 51 回 LES 研究会

開催日： 2018 年 7 月 13 日 (金) 14:00-17:00

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

流入変動風特性による建物の風圧分布に関する LES 解析

小野 佳之 株式会社大林組

建物内外気流の LES における格子ボルツマン法の検証

韓 夢濤 東京大学生産技術研究所

第 52 回 LES 研究会

開催日： 2018 年 9 月 18 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)

iconCFD を使用した衝突噴流の LES および RANS 解析

野崎 文也 株式会社 IDAJ

LES による市街地風環境予測のためのガイドライン策定に向けて

大風 翼 東京工業大学

第 53 回 LES 研究会

開催日： 2018 年 11 月 9 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)

自軸回転円管内乱流における完全発達状態と過渡現象

岡本 正芳 静岡大学

SGS 力および SGS エネルギー輸送に基づくスケール相似則項を用いた SGS モデル

小林 宏充 慶應義塾大学

第 54 回 LES 研究会

開催日： 2019 年 1 月 8 日 (火) 14:00-17:00

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

SAMPSON コードによる東京電力福島第一原子力発電所の事故進展解析

鈴木 博之 エネルギー総合工学研究所

深水湖の鉛直循環の比較研究

北澤 大輔 東京大学生産技術研究所

d) セミナー・講習会

第 10 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 10 回目の基礎編の利用講習会を開催した.

開催日: 平成 30 年 5 月 11 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: 18 名

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 FrontFlow/blue の設計実務ハンズオンセミナー

企業の研究開発や設計現場でのクラウドコンピューティング利用を想定した, FrontFlow/blue(FFB)による CFD 解析実務(ファン空力騒音最適化)の実務設計セミナーを開催した. PC 上から東京大学生産技術研究所の PC クラスタに接続し, 計算格子生成, 非定常流れ場解析, 大規模解析可視化, さらに形状最適化までの設計実務の一連の作業の実習を実施した.

開催日: 平成 30 年 12 月 14 日(金)10:00-17:25

場 所: 高度計算科学研究支援センター(計算科学センタービル)2 階 実習室

主 催: 東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター

参加者数: 16 名

第 11 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 11 回目の基礎編の利用講習会を開催した.

開催日: 平成 31 年 2 月 1 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: 16 名

e) 共催・後援・その他

第 10 回 HPC ものづくりワークショップ

開催日: 平成 30 年 7 月 6 日(金)

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

KOBE HPC Summer School(初級)

開催日: 平成 30 年 8 月 6 日(月) ~ 10 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)
共 催: 神戸大学計算科学教育センター,
理化学研究所計算科学研究センター,
兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科

The Computational Science Alliance of the University of Tokyo

3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS2018)

開催日: 平成 30 年 9 月 20 日(木) ～ 21 日(金)
場 所: 東京大学本郷小柴ホール
主 催: 東京大学 計算科学アライアンス

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2018

開催日: 平成 30 年 11 月 19 日(月)
場 所: 学術総合センター 2F 中会議場
主 催: 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 11 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

HPC が拓く未来のものづくり

開催日: 平成 30 年 12 月 19 日(水) 13:00～17:30
場 所: 御茶ノ水ソラシティカンファレンスセンター
主 催: スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

第 11 回トップセミナー ～ビジネスチャンスを生み出し産業の未来を拓くスーパーコンピュータ～

開催日: 平成 31 年 2 月 7 日(木)
場 所: グランフロント大阪 ナレッジキャピタルコンベンションセンタールーム 2+3
主 催: 計算科学振興財団

The 3rd RIKEN R-CCS HPC Youth Workshop

開催日: 平成 31 年 2 月 15 日(金) ～ 17 日(日)
場 所: 理化学研究所 計算科学研究センター 6 階 講堂等
主 催: 理化学研究所 計算科学研究センター

The 1st R-CCS International Symposium

開催日: 平成 31 年 2 月 18 日(月) ～ 19 日(火)
場 所: 神戸国際会議場

主 催： 理化学研究所 計算科学研究センター

見える化シンポジウム 2019

「バーチャルでリアルを超えろ～難解サイエンスを映像で感覚的につたえる～」

開催日： 平成 31 年 3 月 2 日(土)

場 所： 秋葉原 UDX シアター

主 催： ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」
(代表機関: 東京大学物性研究所)

KOBE HPC Spring School (中級)

開催日： 平成 31 年 3 月 13 日(水) ～ 15 日(金)

場 所： 兵庫県立大学 神戸情報科学キャンパス 312 演習室

共 催： 神戸大学計算科学教育センター，
理化学研究所計算科学研究センター，
兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科

FrontISTR Commons 法人設立記念シンポジウム

開催日： 平成 30 年 5 月 11 日(金)

場 所： 東京大学生産技術研究所 An 棟 4F 401/402 室

主 催： FrontISTR Commons

第 44 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 30 年 7 月 9 日(月)

場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 85 中会議室

主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

第 45 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 30 年 8 月 7 日(火)

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 (FrontISTR Commons)

第 46 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 30 年 9 月 13 日(木)

場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 502 講義室

主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

第 47 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 30 年 10 月 12 日(金)

場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 502 講義室

主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

第 48 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 30 年 11 月 9 日(金)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 502 講義室
主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

第 49 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 30 年 12 月 11 日(火)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 83 講義室
主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

第 50 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 31 年 1 月 18 日(金)
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 (FrontISTR Commons)

第 51 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 31 年 2 月 14 日(木)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 502 講義室
主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

第 52 回 FrontISTR 研究会

開催日： 平成 31 年 3 月 19 日(火)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 502 講義室
主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

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 2018

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 30 年 9 月 6 日(木)～7 日(金)
場 所： 神戸国際展示場 2 号館

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 30 年 11 月 23 日(金)
場 所： 理化学研究所 計算科学研究センター6 階講堂

第5回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会

～ポスト「京」への移行期を迎える HPCI～

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 30 年 11 月 2 日(金)

場 所： THE GRAND HALL (品川)

SC18

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 30 年 11 月 12 日(月)～16 日(金)

場 所： 米国 テキサス州ダラス

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. 27, Vol. 28 を発行した。

(1) Vol. 27

発 行 日： 平成 30 年 6 月

発行部数： 800 部

内容： 1 面	巻頭言 第 3 期革新的シミュレーション研究センターへ 平成 30 年 4 月に改組
2 面－3 面	第 3 期革新的シミュレーション研究センターの紹介
4 面－5 面	新メンバー研究紹介
6 面	活動報告およびイベント案内

(2) Vol. 28

発 行 日： 平成 31 年 1 月

発行部数： 1,000 部

内容： 1 面	巻頭言 ポスト「京」重点課題プロジェクト アプリケーション開発フェーズの完遂に向けて
2 面	ポスト「京」重点課題⑧・重点課題⑥第 2 回 HPC ものづくりワークショップ開催報告
3 面	国際会議 SC18 展示報告
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案内

4) 新聞・マスコミ報道

新聞・WEB 新聞

(1) 「夏の暑さをミストで軽減－東大とパナソニックが暑さ対策研究で協力」、平成 30 年 7 月 24 日(火)、マイナビニュース(新聞)。

(2) 「「ミスト効果」で熱を放出 異次元の暑さに備える」、平成 30 年 7 月 24 日(火)、FNN PRIME。

- (3) 「ミストシャワー効果”見える化” パナソニック・東大が評価基準」, 平成 30 年 7 月 25 日(水), 日刊工業新聞.
- (4) 「ミスト なぜ涼しい 冷却効果実証実験スタート」, 平成 30 年 7 月 26 日(木), 朝日新聞.
- (5) 「熱中症対策 ミスト冷却実証 東大ーパナソニック」, 平成 30 年 7 月 27 日(金), 化学工業日報.
- (6) 「ドライ型ミスト、冷却効果測定実験」, 平成 30 年 8 月 3 日(金), 日経産業新聞.
- (7) 「クローズアップ 2018 五輪 暑さ対策手探り 観客の熱中症 どう防ぐ 東京都 新たに散水実験」, 平成 30 年 8 月 14 日(火), 毎日新聞.
- (8) 「スパコン性能, 日本は苦戦 利用増, 「ポスト京」につなげ」, 平成 31 年 1 月 7 日(月), 日本経済新聞 夕刊 2 面.
- (9) 「1 位じゃなくても...スパコン, 進み始めた利用者開拓 加藤千幸・東大教授『科学的に重要な課題の解決がスパコン開発の使命』」, 平成 31 年 1 月 7 日(月), 日経電子版.
- (10) 「「ポスト京」データ大量生成 次世代スパコン速度 100 倍に」, 平成 31 年 2 月 18 日(月), 日本経済新聞 朝刊.

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。これまでにポスト「京」などの次世代の CPU において、現状比 100 倍の高速化を達成できる目途を得ることができた。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、妥当な結果を得ることができ、実機のターボ機械に適用している。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、プログラムをほぼ完成させた。今後、実車の空力解析や音の解析に適用していく。また、洋上ウインドファームに設置される大型風車まわりの流れに対して、数億格子を用いた大規模な LES 解析を適用し、大気乱流境界層の影響や風車同士の干渉効果が評価できる見通しを得た。

(2) 基本的な流れ場の数値計算や風洞実験に関する基礎研究

翼に流入する流れに変動があると、翼の揚力が大きく変動したり、翼から発生する騒音が大幅に増大したりすることが知られているが、特に、騒音が増大する理由に関してはいくつかの仮説はあるものの解明は進んでいなかった。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。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、音が大きくなる原理的なメカニズムを解明した(論文執筆中)。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ている。

(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。民間企業等との連携協力のもと、色々な船型に対して、上記のようなシミュレーションの予測精度の検証を実施し、全ての船型に対して推進抵抗(摩擦抵抗, 形状抵抗, 造波抵抗)と自航要素とよばれる、船体とプロペラとの干渉効果が定量的に予測可能であることを示した。

【自動車】

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計算を産学官連携して実施している。これまでの研究成果として、ボックスファンの性能と騒音が定性的に予測できることを証明するとともに、予測のためのノウハウを取得した。現在、この予測手法を用いてプロペラファン動翼形状の最適設計を実施している。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Chisachi Kato, Ryo Takayama, Tsutomu Takayama, Yoshinobu Yamade, Taro Yamashita, Takafumi Makihara, Yuta Saito: Effects of Moving Ground and Rotating Wheels on Aerodynamic Drag of a Two-Box Vehicle, WCX18 Best Papers Special Issue, Volume11, 2018, doi:10.4271/2018-01-0730.

国際会議予稿集

- 1) I. Hagiya, C. Kato, Y. Yamade, M. Fukaya, T. Nagahara: Analysis of blade-passage flow of a mixed-flow pump at performance-curve instability, 29th IAHR Symposium on Hydraulic Machinery and Systems, 2018.9.17-21, 同志社大学(京都).
- 2) Chisachi Kato: APPLICATIONS OF VERY LARGE SCALE FLUID-FLOW COMPUTATIONS TO INDUSTRIAL PROBLEMS, 2019 Japan-China-Korea Hydraulic Machinery Workshop, 2019.1.10-11, 早稲田大学.
- 3) Chisachi Kato: Industrial applications of fully-resolved LES in the post-K era, International Symposium on Hydro & Marine Renewable Energy, 2019.2.21, Asti Hotel Busan Korea.

学会講演論文

- 1) Chisachi Kato: Applications of large-scale computation to industrial problems, IEA Wind Task31 シンポジウム, 2018.4.17, 東大生研.
- 2) 加藤千幸:ポスト「京」時代の大規模数値流体解析, 流体力学シンポジウム, 2018.11.4, 本郷キャンパス

ンパス工学部2号館.

- 3) 織茂勝利, 山出吉伸, 鈴木康方, 飯田明由, 加藤千幸: タンデムに配置された洋上風車まわりの流れのLES解析, 日本機械学会第96期流体工学部門講演会, 2018.11.29-30, 北海道室蘭市蓬峽殿, AM18 OS6-5 (ポスター発表のみ).
- 4) 難波聖, 腰塚翼, 鈴木康方, 加藤千幸: 格子ボルツマン法による角柱周り流れと空力騒音の予測, 日本機械学会第96期流体工学部門講演会, 2018.11.29-30, 北海道室蘭市蓬峽殿, AM6 OS7-1 (ポスター発表のみ).
- 5) 白藤拓, 鈴木康方, 加藤千幸: ボックスファンのLES解析精度に与える解析格子の影響, 日本機械学会第96期流体工学部門講演会, 2018.11.29-30, 北海道室蘭市蓬峽殿, PM8 OS7-8 (ポスター発表のみ).
- 6) 小林典彰, 鈴木康方, 西村勝彦, 加藤千幸: 翼に渦が干渉する場合の翼周りの流れと発生する空力騒音に関する研究, 日本機械学会第96期流体工学部門講演会, 2018.11.29-30, 北海道室蘭市蓬峽殿, PM9 OS7-9 (ポスター発表のみ).
- 7) 飯田明由, 宮澤真史, 横山博史, 加藤千幸: 空間音源を用いた自動車空力騒音の予測, 第32回数値流体力学シンポジウム 2018.12.11-13, 機械振興会館.
- 8) 加藤千幸: 産業競争力に貢献する次世代スーパーコンピューティング技術の動向2, 日本学術会議総合工学委員会公開シンポジウム「AI時代のもの・コトづくりに向けた新たな計算科学活用における課題と期待」, 2019.2.14, 日本学術会議講堂.

(2) 研究プロジェクト

民間等との共同研究

- 1) 「自然風下での非定常空力特性の把握に向けた計算手法の構築」
- 2) 「CFD による船舶性能推定精度向上に関する研究」
- 3) 「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」

受託研究

① 公的資金

- 1) 文部科学省 平成 30 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。製品価値を決定する最重要因子である疲労破壊強度特性に関しても、樹脂の疲労強度特性が複合材の疲労特性を支配するとの仮定の下、Interfacial Normal Stress を規準として疲労強度予測が可能であることを示している。

(2) 超高压水素容器の開発

燃料電池自動車普及の隘路となっている炭素繊維強化プラスチック製超高压水素燃料タンクの経済性を向上させるため、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。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技術を開発し、その力学的優位性をメゾスケールシミュレーションで実証した。

(3) CFRP 製造プロセスシミュレータの研究開発

製造プロセス段階にまで立ち入って強度信頼性評価を行うため、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・ひずみを精度よく評価できることを示した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Yoshihiko Hangai, Kenji Amagai, Kazuki Omachi, Nozomi Tsurumi, Takao Utsunomiya and Nobuhiro Yoshikawa: Forming of aluminum foam using steel mesh as die during foaming of precursor by optical heating, August 2018, Optics and Laser Technology, 108, pp. 496-501.
- 2) Yoshihiko Hangai, Hiroki Ikeda, Kenji Amagai, Ryosuke Suzuki, Masaaki Matsubara and Nobuhiro Yoshikawa: Fabrication of two-layered aluminum foam having layers with closed-cell and open-cell pores, October 2018, Metallurgical and Materials Transactions A, 49(10), pp. 4452-4455. <https://doi.org/10.1007/s11661-018-4867-x>.
- 3) Yoshihiko Hangai, Kenji Amagai, Nozomi Tsurumi, Kazuki Omachi, Katsushige Shimizu, Kiyotaka Akimoto, Takao Utsunomiya, Nobuhiro Yoshikawa: Forming of aluminum foam using light-transmitting material as die during foaming by optical heating, November 2018, Materials Transactions, 59(11), pp. 1854-1859. <https://doi.org/10.2320/matertrans.M2018218>.
- 4) Yoshihiko Hangai, Ryusei Kobayashi, Ryosuke Suzuki, Masaaki Matsubara, Nobuhiro Yoshikawa: Aluminum foam-filled steel tube fabricated from aluminum burrs of die-castings by friction stir back extrusion, February 2019, Metals, 9(2), 124 (11 pages). <https://doi.org/10.3390/met9020124>.
- 5) Yoshihiko Hangai, Ryohei Nagahiro, Masataka Ohashi, Kenji Amagai, Takao Utsunomiya and Nobuhiro Yoshikawa: Shaping of Aluminum Foam during Foaming of Precursor Using Steel Mesh with Various Opening Ratios, February 2019, Metals, 9(2), 223; doi:10.3390/met9020223.

和文論文

- 1) 半谷禎彦, 松下駿人, 西本拓真, 鈴木良祐, 小山真司, 松原雅昭, 清水克成, 秋元清隆, 吉川暢宏: 溶融法により作製した発泡アルミニウム材料の圧潰後の残存発泡剤による再発泡, 2018年7月, 鑄造工学, Vol.90, No.7, pp. 381-385.
- 2) 半谷禎彦, 鶴見望, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 金網金型による発泡アルミニウム発泡時の形状付与, 2018年12月, 日本金属学会誌, 82(12), pp. 484-486. <https://doi.org/10.2320/jinstmet.J2018044>.
- 3) 竹本真一郎, 吉川暢宏: 高圧水素容器CFRP積層構造のメゾスケール引張強度評価のための樹脂非線形材料モデルの高度化, 2019年1月, 日本機械学会論文集 Vol.85, No.869. <https://doi.org/10.1299/transjsme.18-00304>.

国際会議アブストラクト

- 1) Qi Wu, Tomotaka Ogasawara, Nobuhiro Yoshikawa, and Hongzhou Zhai: Investigation of the stress evolution of polyetherimide during its forming process, May 2018, 2018 Society for the Advancement of Material and Process Engineering, SE18-1039.
- 2) Yoshihiko Hangai, Kenji Amagai, Takao Utsunomiya, Nobuhiro Yoshikawa: Molding of Aluminum Foam Using Metal Mesh as Die During Foaming of Aluminum Foam Precursor by Optical Heating,

June 2018, International Conference on Aluminum Alloys (ICAA16) Proceedings ISBN: 978-1-926872-41-4, p.52.

- 3) Takemoto, Shinichiro and Yoshikawa, Nobuhiro: Fracture Evaluation by means of Mesoscale Model for CFRP Hydrogen Tank, July 2018, 4th International Conference on Mechanics of Composites, BOOK OF ABSTRACT, p.42.
- 4) Hideo Kobayashi, Hiroshi Kobayashi, Takeru Sano, Takashi Maeda, Hiroaki Tamura, Ayumu Ishizuka, Mitsuo Kimura, Nobuhiro Yoshikawa, Takashi Iijima, Junichiro Yamabe, Saburo Matsuoka and Hisao Matsunaga: METHODS OF MATERIAL TESTING IN HIGH-PRESSURE HYDROGEN ENVIRONMENT AND EVALUATION OF HYDROGEN COMPATIBILITY OF METALLIC MATERIALS – CURRENT STATUS IN JAPAN, July 2018, Proceedings of the ASME 2018 Pressure Vessels and Piping Conference, PVP2018-84112.
- 5) Sang-Won Kim, Nobuhiro Yoshikawa, Hiroshi Kobayashi, Toshiro Fujisawa and Takeru Sano: NUMERICAL FATIGUE LIFE EVALUATION WITH EXPERIMENTAL RESULTS FOR TYPE III ACCUMULATORS, July 2018, Proceedings of the ASME 2018 Pressure Vessels and Piping Conference, PVP2018-84188.
- 6) Tatsumi Takehana, Toshihiro Yamada, Takeru Sano, Katsuyuki Kimura, Tetsuji Miyashita, Yuta Shiga, Nobuhiro Yoshikawa and Hiroshi Kobayashi: STUDY ON FATIGUE CHARACTERISTICS OF CFRP, July 2018, Proceedings of the ASME 2018 Pressure Vessels and Piping Conference, PVP2018-85081.
- 7) Takeru Sano, Toshihiro Yamada, Tatsumi Takehana, Tetsuji Miyashita, Yuta Shiga, Nobuhiro Yoshikawa and Hiroshi Kobayashi: STUDY ON STRESS RUPTURE CHARACTERISTICS OF CFRP, July 2018, Proceedings of the ASME 2018 Pressure Vessels and Piping Conference, PVP2018-85082.

学会講演論文

- 1) 大橋政孝, 半谷禎彦, 天谷賢児, 永廣怜平, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 発泡中のプレス加工によるポーラスアルミニウムへの形状付与, 2018年8月, 軽金属学会関東支部第6回若手研究者ポスター発表会概要集, p.19.
- 2) 大槻晃平, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: ポーラスAlプリカーサをコアとしたサンドイッチ構造体の形状付与と発泡による影響, 2018年8月, 軽金属学会関東支部第6回若手研究者ポスター発表会概要集, p.20.
- 3) 小林龍聖, 半谷禎彦, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏: 摩擦圧接による廃材を利用したポーラスAl/Alパイプ複合部材の作製, 2018年8月, 軽金属学会関東支部第6回若手研究者ポスター発表会概要集, p.21.
- 4) 小林龍聖, 半谷禎彦, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏: 摩擦圧接によるオール廃材ポーラスAl/純Alパイプ複合部材の作製, 2018年9月, 日本金属学会2018年秋期(第163回)講演大会, 講演No.P197.

- 5) 大槻晃平, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: ポーラスAlをコアとしたサンドイッチ構造体の接合界面における強度, 2018年9月, 日本金属学会2018年秋期(第163回)講演大会, 講演No.318.
- 6) 大橋政孝, 半谷禎彦, 天谷賢児, 永廣怜平, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 発泡中のプレス加工によるポーラスAlへの形状付与, 2018年10月, 第69回塑性加工連合講演会講演論文集, pp.201-202.
- 7) 小林龍聖, 半谷禎彦, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏: 摩擦圧接によるオール廃材ポーラスAl/Alパイプ複合部材の作製および圧縮特性評価, 2018年10月, 第69回塑性加工連合講演会講演論文, pp.205-206.
- 8) 高橋佳汰, 半谷禎彦, 永廣怜平, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 点群型によるポーラスアルミニウムへの形状付与, 2018年11月, 日本機械学会第26回機械材料・材料加工技術講演会(M&P2018)講演論文集[No.18-60], No.203.
- 9) 高田桂佑, 半谷禎彦, 藤井英俊, 青木祥宏, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 摩擦攪拌接合の摩擦熱を利用し発泡させたA1050 ポーラスAl の作製, 2018年11月, 日本機械学会第26回機械材料・材料加工技術講演会(M&P2018)講演論文集[No.18-60], No.204.
- 10) 相原優馬, 半谷禎彦, 天谷賢児, 永廣怜平, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 光加熱による傾斜機能ポーラスアルミニウムの作製及び金網を用いた光量調節による発泡時間の制御, 2018年11月, 軽金属学会第135回秋期大会概要, pp.261-262.
- 11) 安藤瑞季, 半谷禎彦, 天谷賢児, 永廣怜平, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 焼結スペーサー法と発泡法で作製した傾斜機能ポーラスアルミニウムの圧縮特性, 2018年11月, 軽金属学会第135回秋期大会概要, pp.263-264.
- 12) 高田桂佑, 半谷禎彦, 藤井英俊, 青木祥宏, 周夢然, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: ダイカスト材内部のガスのみで発泡させたポーラスAl ～FSWを利用した作製～, 2018年11月, 軽金属学会第135回秋期大会概要, pp.373-374.
- 13) 大槻晃平, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 発泡アルミニウムと金属平板サンドイッチ構造体の形状付与, 2018年11月, 軽金属学会第135回秋期大会概要, pp.375-376.
- 14) 吉川 暢宏, 竹本 真一郎: メゾスケールシミュレーションによる CFRP強度評価の高化, 2018年12月, 日本機械学会 M&M2018 材料力学カンファレンス 講演論文集[No.18-53], pp.OS7-1-3.
- 15) 半谷禎彦, 大橋政孝, 永廣怜平, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 光加熱を利用した発泡中の発泡アルミニウムへの形状付与, 2018年12月, 日本機械学会 M&M2018 材料力学カンファレンス 講演論文集[No.18-53], pp.OS11-14-15.

(2)研究プロジェクト

民間等との共同研究

- 1) CFRP ファンブレード構造の疲労解析技術に関する研究(その1)
- 2) 織物 CFRP 材料の力学特性評価
- 3) タイプ3複合容器蓄圧器の研究
- 4) 多給糸フィラメントワインディング技術の開発

5) 高断熱性ポーラス Al/Al パイプの力学特性評価

受託研究

① 公的資金

- 1) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構「超高圧水素インフラ本格普及技術研究開発事業／水素ステーションのコスト低減等に関連する技術開発/複合圧力容器の評価手法確立・技術基準整備に関する技術開発」
- 2) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構「超高圧水素インフラ本格普及技術研究開発事業／国際展開、国際標準化等に関する研究開発／燃料電池自動車の国際基準調和・国際標準化に関する研究開発」
- 3) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構「革新的新構造材料等研究開発／熱可塑性 CFRP の開発及び構造設計・応用加工技術の開発／熱可塑性 CFRP 評価・解析技術の開発」

② 公的資金以外

- 1) 多給糸フィラメントワインディング容器の有限要素モデル作成手法の開発
- 2) 多給糸フィラメントワインディング装置 CAM データ作成手法の開発

半場藤弘研究室 流体物理学

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

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现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 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調べた。さらに条件付平均を用いてスケール空間のエネルギー輸送に伴う渦構造を抽出し機構を考察した。

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) Fujihiro Hamba: Turbulent energy density in scale space for inhomogeneous turbulence, May 2018, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 842, pp. 532-553.
- 2) Valery V. Pipin, Nobumitsu Yokoi: Generation of a large-scale magnetic field in a convective full-sphere cross-helicity dynamo, May 2018, The Astrophysical Journal, Vol. 859, pp. 18 1-11.
- 3) Dmitry Sokoloff, Nobumitsu Yokoi: Path integrals for mean-field equations in nonlinear dynamos, June 2018, Journal of Plasma Physics, Vol. 84, pp. 735840307 1-7.
- 4) Nobumitsu Yokoi: Electromotive force in strongly compressible magnetohydrodynamic turbulence, September 2018, Journal of Plasma Physics, Vol. 84, pp. 735840501 1-26.
- 5) Kazuhiro Inagaki, Fujihiro Hamba: Energy transport due to pressure diffusion enhanced by helicity and system rotation in inhomogeneous turbulence, December 2018, Physical Review Fluids, Vol. 3, pp. 124601 1-23.
- 6) Nobumitsu Yokoi: Multiple-scale analysis of the strong compressibility effects on transport in magnetohydrodynamic turbulence, December 2018, Journal of Plasma Physics, Vol. 84, pp. 775840603 1-30.

国際会議予稿集

- 1) Hideaki Miura, Fujihiro Hamba: Direct and large eddy simulations of Hall MHD turbulence, June 2018, Proceedings of 19th International Congress of Plasma Science, P011.
- 2) Kazuhiro Inagaki, Fujihiro Hamba: Modeling the energy flux enhanced in rotating inhomogeneous turbulence, September 2018, Proceedings of the interdisciplinary Turbulence initiative (iT_i) 2018, p. 29.
- 3) Nobumitsu Yokoi: Multiple-scale analysis of the strong compressibility effects on transport in magnetohydrodynamic turbulence, September 2018, Proceedings of the interdisciplinary Turbulence initiative (iT_i) 2018, p. 45.
- 4) Hideaki Miura, Fujihiro Hamba: Anisotropic SGS modeling for large eddy simulation of magnetized plasma, November 2018, Proceedings of 27th International Toki Conference, P2-01.

学会講演論文

- 1) 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, 2018 年 4 月, ながれ, Vol. 37, pp. 111-117.
- 2) 半場藤弘: チャネル乱流におけるエネルギーカスケードと渦構造, 2018 年 9 月, 日本流体力学会年会 2018 講演論文集, 乱流(3)-2.
- 3) 稲垣和寛,有木健人,半場藤弘: 浮力の効果を伴う乱流における実現性条件とモデリング, 2018 年 9 月, 日本物理学会 2018 年秋季大会概要集, p. 2291.
- 4) 半場藤弘: チャネル乱流のエネルギー逆カスケードに伴う渦構造, 2019 年 3 月, 日本物理学会第 74 回年次大会概要集, p. 2691.
- 5) 稲垣和寛,半場藤弘: ヘリシティを伴う回転系非一様乱流におけるスケール間相互作用, 2019 年 3 月, 日本物理学会第 74 回年次大会概要集, p. 2779.

(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」

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) Yoshiyuki Morita, Tsukasa Matsuo, Shingo Maeda, Masamichi Oishi, and Marie Oshima: Three-dimensional displacement measurement of self-oscillating gel using digital holographic microscopy, 2018, Applied Optics Vol. 57, Issue 36, pp. 10541-10547, doi: 10.1364/AO.57.010541.
- 2) M. Oishi, H. Kinoshita, T. Fujii, M. Oshima: Phase-locked confocal micro-PIV measurement for 3D flow structure of transient droplet formation mechanism in T-shaped microjunction, 2018, Measurement Science and Technology, 29, 115204-1-115204-17.
- 3) A. Winzen, M. Oishi, M. Oshima: A numerical model-assisted experimental design study of inertia-based particle focusing in stepped microchannels, 2018, Microfluidics and Nanofluidics, pp. 22-28, DOI: 10.1007/s10404-018-2042-8.
- 4) N. Mukai, Y. Matsuura, M. Oishi, M. Oshima: Chromatic Aberration Based Depth Estimation in a Fluid Field, 2018, Journal of Image and Graphics, Vol.6, No. 1, pp. 59-63, DOI: 10.18178/joig.6.1.59-63.

国際会議予稿集

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

国際会議アブストラクト

- 1) T. Natsume, M. Oishi, N. Mukai, M. Oshima: Droplet Simulation for Cerebral Aneurysm Embolization, 2019, IWAIT-IFMIA2019.
- 2) N. Mukai, Y. Matsuura, M. Oishi, M. Oshima: Chromatic Aberration based Depth Estimation in a

Fluid Field, 2018, 2018 International Conference on Image and Graphics Processing.

- 3) C. Yuhn, K. Miyahara, K. Hoshina, M. Kobayashi, M. Oshima: Computational simulation of vascular remodeling of the pancreaticoduodenal arcades in the presence of celiac artery stenosis, 2018, 8th World Congress of Biomechanics.
- 4) K. Okada, C. Yuhn, H. Zhang, M. Kobayashi, S. Yamada, M. Oshima: Investigation of the effects of uncertainty in medical images on patient specific 1D-0D simulation for risk evaluation of cerebral hyperperfusion syndrome, 2018, 8th World Congress of Biomechanics.
- 5) Y. Chen, M. Kobayashi, C. Yuhn, H. Zhang, M. Oshima: Development of an Integrated 1D-0D Simulation System with functions of 3D Modeling & Visualization, 2018, 13th World Congress on Computational Mechanics (2018).

学会講演論文

- 1) K. Hirayama, K. Niki, S. Takenouchi, M. Sugawara, M. Tanaka, M. Oshima: 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, 2018 年, 第 82 回日本循環器学会学術集会.
- 2) 安田貴浩, 岩切拓海, 保科克行, 宮原和洋, 大島まり, 山本創太: 大動脈瘤簡易診断手法の適用性検証と改良, 2018 年, 第 31 回バイオエンジニアリング講演会.
- 3) 葛西健司, 保科克行, 大島まり, 山本創太: エアバック要素を用いた動脈瘤拡張予測シミュレーション手法の基礎研究, 2018 年, 第 31 回バイオエンジニアリング講演会.
- 4) 佐藤利彦, 山本創太, 早川基治, 小林匡治, 大島まり: 脳血管の血圧無負荷時における形状予測と流体構造連成解析, 2018 年, 第 29 回バイオフィロンティア講演会.
- 5) 立原一樹, 山本創太, 大島まり: 軸対称モデルを使用した血圧無負荷状態での血管形状推定手法の検討, 2018 年, 第 29 回バイオフィロンティア講演会.
- 6) 青柳美咲, 大島まり, 喜田壮馬, 島崎一夫, 大村進, 小野卓史: 上顎骨の後上方移動術前後における鼻呼吸機能の流体解析, 2018 年, 第 77 回日本矯正歯科学会学術大会.
- 7) 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滴形成シミュレーション, 2018 年, 映像情報メディア学会研究会.
- 8) 夏目拓也, 大石正道, 向井信彦, 大島まり: 脳動脈瘤塞栓術を対象とした安定的な液体注入シミュレーション, 2018 年, NICOGRAPH2018.

(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」

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分子軌道法で解析する」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の正準(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 にドット積によるフォック交換項計算ルーチンを実装した。サイズ依存性の見積もり等も含め、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。特にヘテロ分子の記述を拡張した。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。活性中心周り以外のアミノ酸残基に大きな分子軌道成分が張り出しており、これはグルコースオキシダーゼのカギとなるアミノ酸残基であることが推察された。なお、このような方法を拡張し、量子化学計算によるタンパク質のデザイン研究を提案した。

(5) 棄却法によるタンパク質分子軌道の雲状可視化法の研究

タンパク質正準分子軌道を雲状表示により効果的に可視化する方法を提案した。棄却法による軌道の値に応じた密度の点描を行い、タンパク質の巨大分子軌道を雲状に表現することに成功した。また擬等値面表示を開発した。本方法では表示する分子軌道の値に幅を持たせることが可能であるため、軌道の分布を情報の抜け落ちが少ない状態で可視化することができ、タンパク質の複雑な軌道の分析に適していると考えられる。

(6) 絶縁材料設計手法の研究

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。本研究は平野助教が推進しており、都市大三宅准教授、九工大小迫准教授、本学佐藤助教との共同研究である。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Shingo Hattori, Stefaan Vandendriessche, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato, Guy Koeckelberghs, Thierry Verbiest, Kazuyuki Ishii: Molecular Power Spring: Circular Dichroism Inversion of Polythiophene Aggregates from the Right-Handed Helix to Left-Handed Helix, J. Phys. Chem. B, Vol. 123, pp. 2925–2929 (2019).

和文論文

- 1) 平野敏行, 佐藤文俊: 大規模分子設計における電子状態計算法と期待, 放電研究, Vol. 61, pp. 13-18 (2018).
- 2) 江口晴輝, 平野敏行, 佐藤文俊: 棄却法を用いたタンパク質分子軌道の雲状可視化法の研究, J. Comput. Chem. Jpn., Vol. 17, pp. 189–192 (2018).

国際会議アブストラクト

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Automated Canonical Molecular Orbital Calculation Engine for Protein: ProteinDF/QCLObot, 2018.6.18, ICQC 2018.
- 2) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: GPU acceleration of a canonical molecular orbital calculation program by the third-generation density-functional-theory-based method, 2019.2.17, The 59th Sanibel Symposium.

学会講演論文

- 1) 平野敏行: 大規模分子設計における電子状態計算法と期待, 2018.6.15, 2018 年度 放電学会シンポジウム, 東京大学(本郷キャンパス).
- 2) 平野敏行, 佐藤文俊: GPU を用いた大規模電子状態計算プログラム ProteinDF の高速化, 2018.9.10, 第 12 回 分子科学討論会, 福岡国際会議場.
- 3) 江口晴輝, 平野敏行, 佐藤文俊: 雲状モデルによるタンパク質分子軌道の新規可視化手法の研究, 2018.11.3, 日本コンピュータ化学会 2018 秋季年会, 弘前大学.
- 4) 三宅弘晃, 熊田亜紀子, 小迫雅裕, 佐藤正寛, 平野敏行: 直流絶縁技術のブレークスルーに向けた計算科学を活用した絶縁材料設計手法の創成, 2019.3.16, パワーアカデミー研究助成 2019 年成果報告会, 北海道科学大学.

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」, 2018.11, スーパーコンピューティングニュース, Vol. 20, No. 6, (2018).

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

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

民間等との共同研究

- 1) 「グルコースオキシダーゼの反応機構の研究」
- 2) 「直流絶縁技術のブレークスルーに向けた計算科学を活用した絶縁材料設計手法の創成」, パワーアカデミー研究助成 特別推進研究, 平野敏行

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立

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 30 年度においては、Li イオン電池材料における core-excitation 状態の異方性や、スペクトルと機械学習を組み合わせた解析結果などを報告した。

(2) 液体・ガラスの原子分解能計測

液体中分子の状態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。また、ガラスの構造解析においては X 線回折や吸収分光などの手法が用いられてきた。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、局所領域の情報を取得することができない。本研究では球面収差補正走査透過型電子顕微鏡(STEM)で取得される像や分光法(ELNES)に着目し、液体およびガラスの原子分解能計測を実施した。さらに、分子動力学計算と第一原理バンド計算を複合利用してモデリングするとともに、ELNES の理論計算を行った。

まず、ガラスの分相組織形成の高温その場観察を行った。STEM 像観察と像シミュレーションを組み合わせることで、像一枚からガラスの組成を定量的に決定する手法を開発した。また、イオン液体に界面活性剤を添加した系の高分解能観察を行い、得られた結果を画像解析や像シミュレーションにより解析することにより、液体内部の分子/イオン数マッピングを作成することに成功した。

高い空間分解能により液体やガラスを解析できる本手法は、界面のような局所領域の化学反応や機能発現を理解する上で大いに役立つと期待される。

(3) インフォマティクス手法により界面・スペクトル解析法の開発

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。また、材料分析にはスペクトルの測定が行われ、近年では一度の実験で数千～数万のスペクトルを測定することが可能となり、スペクトルのビッグデータ化が急速に進んでいる。研究グループは、機械学習を活用した結晶界面やスペクトルの解析

法の開発を行ってきた。今年度は特にスペクトルを「解釈」する手法の開発を行ってきた。

具体的には、「物質情報の樹形図」と「スペクトルの樹形図」という2つの樹形図(2本の木)を利用する。お互いに相関した2本の木を利用することで、高速かつ高精度に内殻電子励起分光スペクトルの「解釈」ができる手法の開発に成功した。また、本手法を使えば物質の構造情報を入力することでスペクトル形状を「予測」することも可能であることが明らかとなった。

本手法により、専門の知識がなくても物質を高速かつ高精度に解析することが可能になると期待できる。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) S. Kobayashi, Y. Ikuhara and T. Mizoguchi: Lattice expansion and local lattice distortion in Nb- and La-doped SrTiO₃ single crystals investigated by x-ray diffraction and first-principles calculations, *Phys. Rev. B.*, 98 (2018) 134114-1-13.
- 2) M. Tsubaki and T. Mizoguchi: Fast and Accurate Molecular Property Prediction: Learning Atomic Interactions and Potentials with Neural Networks, *J. Phys. Chem. Lett.*, 9 (2018), 5733-5741. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.8b01837.
- 3) S. Kiyohara, T. Miyata, K. Tsuda, and T. Mizoguchi: Data-driven approach for the prediction and interpretation of core-electron loss spectroscopy, *Scientific Reports*, 8 (2018) 13548-1-12.
- 4) A. Seko, K. Toyoura, S. Muto, T. Mizoguchi, S. Broderick: Progress in nanoinformatics and informational materials science, *MRS Bulletin*, 43 (2018) 690-695 DOI:10.1557/mrs.2018.206.
- 5) J. Kikkawa, T. Mizoguchi, M. Arai, T. Nagai, and K. Kimoto: Identifying lithium K edge anisotropy in LiCoO₂, *Physical Review B*, 98 (2018) 075103-1-6 DOI: 10.1103/PhysRevB.98.075103.
- 6) K. Nakazawa, T. Miyata, S. Amma, and T. Mizoguchi: Identification of nanometer-scale compositional fluctuations in silicate glass using electron microscopy and spectroscopy, *Scripta Mater.*, 154 (2018) 197-201.
- 7) S. Kiyohara and T. Mizoguchi: Searching the stable segregation configuration at the grain boundary by a Monte Carlo tree search, *J. Chem. Phys.*, 148 (2018) 241741-1-6.

和文論文

- 1) 宮田智衆, 杉森悠貴, 橋口裕樹, 奥西栄治, 上杉文彦, 溝口照康:透過型電子顕微鏡を用いたイオン液体の原子分解能観察, *化学工業*, 69 (2018) 15-22.
- 2) 中澤克昭, 宮田智衆, 安間伸一, 溝口照康:シリカ系ガラスの分相構造観察, *NEW Glass*, 33 (2018) 27-32.

国際会議アブストラクト

- 1) T. Mizoguchi, T. Miyata, and Y. Sugimori: Investigation of liquid and gas using atomic resolution STEM-EELS, The 27th International materials research congress (IMRC), Cancun, Mexico, Aug. 20, 2018.
- 2) Y. Sugimori, T. Miyata, and T. Mizoguchi: Direct observation of three-dimensional distribution and dynamics of single ions in an ionic liquid, The 27th International materials research congress (IMRC), Cancun, Mexico, Aug. 20, 2018.
- 3) S. Kiyohara and T. Mizoguchi: Acceleration of interface structure search via Bayesian optimization and transfer learning, The 27th International materials research congress (IMRC), Cancun, Mexico, Aug. 20, 2018.
- 4) S. Kiyohara, T. Miyata, and T. Mizoguchi: Machine learning-aided interpretation and prediction of a core-loss spectrum, The 27th International materials research congress (IMRC), Cancun, Mexico, Aug. 22, 2018.
- 5) T. Miyata and T. Mizoguchi: Observation of the dynamic behaviors of ions and liquid structures in ionic liquids, International Microscopy Congress (IMC) 2018, Sydney, Australia, Sep. 10, 2018.
- 6) K. Nakazawa, T. Miyata, S. Amma, and T. Mizoguchi: High-resolution In-situ Observation of Spinodal Decomposition in Silicate Glass, ICG annual meeting 2018, Yokohama, Kanagawa, Sep. 25, 2018.

学会講演論文

- 1) 中澤克昭, 宮田智衆, 安間伸一, 溝口照康: spinodal 型相分離中期過程のその場 STEM 観察, 日本物理秋季大会, 同志社大学, 京田辺, Sep. 11, 2018.

著書

- 1) 宮田智衆, 杉森悠貴, 橋口裕樹, 奥西栄治, 上杉文彦, 溝口照康: 透過型電子顕微鏡を用いたイオン液体の原子分解能観察, 化学工業, 69 (2018) 15-22.
- 2) 中澤克昭, 宮田智衆, 安間伸一, 溝口照康: シリカ系ガラスの分相構造観察, NEW Glass, 33 (2018) 27-32.

(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
- 3) 「材料分析に関する研究」 国内材料分析メーカー

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」

大岡龍三研究室 都市エネルギー工学

大岡研究室では、都市空間における汚染物の拡散、ヒートアイランド、風環境などの評価と制御を風洞実験、数値シミュレーションを用いて行っている。更に人工知能を用いた都市と建築のエネルギーシステム最適設計・制御手法の構築を行っている。具体的内容を以下に示す。

(1) 格子ボルツマン法を用いた建物内外気流解析手法の開発

近年工学分野において注目されている新たな解析手法である格子ボルツマン法(LBM)に着目し、建築・都市風環境に適用する解析手法の開発を実施した。まず、LBM による Large-eddy simulation (LBM-LES)を取り上げ、等温条件下の室内気流と都市境界層に置かれた単体建物周辺風環境を調査した。従来の有限体積法による LES (FVM-LES)との解析精度と計算性能の比較を行った。LBM-LES は FVM-LES と同様の構造の流れ場を与え、実験値の分布も妥当に再現できたが、FVM-LES と同等的解析精度を達するために、LBM-LES はより細かい格子解像度が必要であることを明らかにした。LBM-LES の並列計算効率は、FVM-LES より大きく、CPU のコア数が大きいほどその並列計算効率はより優れることが判明した。その上、更なる解析精度の向上を目指し、これらの検証結果を総合し、Spalding 則の Wall function を LBM-LES にの実装、及び WALE subgrid-scale 乱流モデルの編入を行い、LBM の改善を行った。これらを通じて、LBM を建築・都市風環境への応用の優位性を証明することができた。

(2) 単体建物モデル周辺における高温排気ガスの拡散予測

ボイラーや発電機の運転時には、建物周辺で極めて高温な排気ガスが放出される。人々の安全性や建物への影響を解析し適切な対応策を立案するためには、事前の高温排気ガスの拡散予測が必要となる。従来の数値流体力学解析 (Computational Fluid Dynamics: CFD) では、非圧縮性の仮定およびブジネスク近似によって密度の変化は直接扱わず、運動方程式での浮力効果のみを考慮することが多い。しかし、流体密度の変化が無視できない高温ガスの拡散においては、従来手法の解析精度は十分に検討されていない。そこで本研究では、流体の圧縮性を考慮する簡易圧縮性 $k-\epsilon$ モデルを導入し、予測結果に対する予測モデルの圧縮性からの影響を調査した。同時に、CFD の予測結果を検証するため、風洞実験による高浮力ガスの拡散実験を行い、実験データを蓄積した。

(3) モデル予測制御を用いた建築物の省エネルギーな最適制御手法に関する研究

建築物の空調設備システムを最適に制御するためには、時刻毎に変動する電気料金や在室者数など不確実な要素の影響を考慮する必要がある。モデル予測制御手法では、対象システムの挙動をモデルによって予め予測し、未来のある期間を通じて目的を満足させるように最適制御量を決定する。当手法の逐次的な予測と最適化を用いると、設備システム制御における不確実要素の影響が考慮できる。しかし、適切なモデル予測制御の実装においては、予測精度は良い反面計算負荷は低い予測モデルの構築と複数の制御変数の最適解を効果的に探索することができる最適化アルゴリズムの適用が必要

である。本研究ではこの点に着目し、ニューラルネットワークの予測モデルとメタヒューリスティクスの最適化アルゴリズムを組み合わせたモデル予測制御手法を提案した。なお、変動型電気料金と在室者数が時刻毎に変動する条件下での建築物の運用コストを検討した。その結果、提案したモデル予測制御手法を用いると、従来のルールベース制御手法より運用コストを効率的に削減できることが明らかになった。

(4) 再生可能エネルギー利用のための水循環・分散型ヒートポンプシステムの開発

太陽放射及び地球放射、並びにそれから派生する各種の自然エネルギーをヒートポンプの熱源(集熱と放熱)として利用する新しい技術の研究開発を目的とし、昨年その実用性と効果を検証するための試験建屋が建設された。このシステムは、冬期に熱源機器である天空熱源ヒートポンプや二重らせん地中熱交換器を通じて集熱し、夏季に放熱して水循環ループを介して熱を運搬して冷暖房や床暖房などの温冷熱を供給するものである。冬期と夏期の運転実験をそれぞれ行い、天空熱源ヒートポンプ等機器を運転させ、データロガーに記録された外気条件や水ループ流量といった計測データを用いて各機器及びシステム全体の運転性能についての解析・評価を行った。その一方、収集したデータに基づき、人工ニューラルワークをはじめとする機械学習モデルを用いて各機器とシステム全体の運転性能を高精度で予測するモデルを構築した。特に、天空熱源ヒートポンプの冬期運転性能に影響する要素を明らかにした。さらに、今後モデル構築のためには必要とされる質の高い学習用のデータベースを作った。なお、学習曲線をべき乗則で近似するという手法を用いて予測モデルに必要な学習データ数に関する基礎的研究を行った。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Wonjun Choi, Ryoza Ooka, Yujin Nam: Impact of long-term operation of ground-source heat pump on subsurface thermal state in urban areas, April 2018, Sustainable Cities and Society, 38, pp.429-439.
- 2) Keigo Nakajima, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto: Evaluation of k- ϵ Reynolds stress modeling in an idealized urban canyon using LES, April 2018, Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 175, pp.213-228.
- 3) Fei Xue, Hideki Kikumoto, Xiaofeng Li, Ryoza Ooka: Bayesian source term estimation of atmospheric releases in urban areas using LES approach, May 2018, Journal of Hazardous Materials, Volume 349, pp. 68-78.
- 4) Wonjun Choi, Kathrin Menberg, Hideki Kikumoto, Yeonsook Heo, Ruchi Choudhary, Ryoza Ooka: Bayesian inference of structural error in inverse models of thermal response tests, October 2018 Applied Energy, 228, pp.1473-1485.
- 5) Wonjun Choi, Hideki Kikumoto, Ryoza Ooka: Two thermal performance test (TPT) datasets of a single U-tube borehole heat exchanger with inlet setpoint temperatures of 30 °C and 40 °C, October

2018, Data in Brief, Volume 20, pp.1769-1774.

- 6) Wonjun Choi, Hideki Kikumoto, Ryoza Ooka: New perspectives in thermal performance test: Cost-effective apparatus and extended data analysis, December 2018, Energy and Buildings, Volume 180, pp. 109-121.
- 7) Mengtao Han, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto: Lattice Boltzmann method-based large-eddy imulation of indoor isothermal airflow, March 2019, International Journal of Heat and Mass Transfer, Volume 130, pp. 700-709.

国際会議予稿集

- 1) Wonjun Choi, Hideki Kikumoto, Ryoza Ooka: Comparison of thermal response test and thermal performance test, 2018.04-25-28, EnerSTOCK.
- 2) Toshiyuki Hino, Ryoza Ooka: Water-Loop heat pump system that stores multiple renewable energies in the ground, 2018.4-25-28, EnerSTOCK.
- 3) Wonseok Oh, Ryoza Ooka, Junta Nakano, Hideki Kikumoto, Osamu Ogawa: Study on thermal indices under mist spray condition through thermal sensation and comfort, 2018 4.12-15, WINDSOR CONFERENCE 2018.
- 4) Mengtao Han, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto: Comparison between lattice Boltzmann method and finite volume method for LES approach in outdcor turbulent flow, 2018.6.18-22, The 7th International Symposium on Computational Wind Engineering 2018.
- 5) Wonjun Choi, Ryoza Ooka, Masanori Shukuya: Unsteady-state exergy analysis on two types of building envelopes under time-varying boundary condition, 2018.9.23-26, 7th International Building Physics Conference 2018.
- 6) Mengtao Han, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto: Comparison of Lattice Boltzmann Method and Finite Volume Method of Large Eddy Simulation in Isothermal Room Flow, 2018.9.23-26, 7th International Building Physics Conference 2018.

学会講演論文

- 1) 李度胤, 大岡龍三, 池田伸太郎, 崔元準: ANN を用いたモデル予測制御の開発 蓄熱槽及び地中熱ヒートポンプの高精度予測のためのANNモデル, 2018.04.18-2, 第52回空気調和・冷凍連合講演会, 東京海洋大学.
- 2) 文可, 大岡龍三, 日野俊之, 劉明哲, 崔元準, 李度胤, 池田伸太郎: 再生可能エネルギー利用のための水循環・分散型ヒートポンプシステムの開発 その8冬期運転試験及び暖房運転性能の実測, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
- 3) 劉明哲, 大岡龍三, 日野俊之, 文可, 崔元準, 李度胤, 池田伸太郎: 再生可能エネルギー利用のための水循環・分散型ヒートポンプシステムの開発 その9システム概要及び天空熱源ヒートポンプの冬期集熱運転特性, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
- 4) 呉元錫, 大岡龍三, 中野淳太, 菊本英紀, 小川修: 屋外およびミスト噴霧環境での環境指標の開

- 発(その1) 2ノードモデルの評価及び解析精度に関する研究, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
- 5) 李度胤, 大岡龍三, 池田伸太郎, 崔元準: ANN 及びメタヒューリスティクスを用いたモデル予測制御手法の開発 (その3) 蓄熱槽を含むオフィス建築物の冷房運転へのモデル予測制御の適用, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
 - 6) 池田伸太郎, 大岡龍三: 熱源運用最適化におけるメタヒューリスティクスと動的計画法の比較, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
 - 7) 韓夢濤, 大岡龍三, 菊本英紀: 格子ボルツマン法を用いた建築周辺気流のLES その1 単体建物モデル周りの流れを対象としたベンチマークテスト, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
 - 8) 日野俊之, 大岡龍三: 地中熱利用と地中蓄熱を統合するシステムのコンセプト, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
 - 9) 崔元準, 菊本英紀, 大岡龍三: 熱性能試験データを用いた地中熱交換器設計パラメータのベイズ推論, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
 - 10) 林超, 大岡龍三, 菊本英紀, 佐藤大樹: 建物周辺における高温排気ガスの拡散予測に関する研究その1 簡易圧縮性 $k-\epsilon$ モデルの概要と既往実験値との比較, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
 - 11) 菊本英紀, 林超, 大岡龍三, 佐藤大樹: 建物周辺における高温排気ガスの拡散予測に関する研究 その2 高浮力条件における簡易圧縮および非圧縮性 $k-\epsilon$ モデルの比較, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
 - 12) 高姍, 大岡龍三, 呉元錫, 郭倩文: 対流放射連成解析による周壁温度が人体周辺微気象に及ぼす影響 (その1) 計算条件及び人体表面温度の検討, 2018.09.4-6, 日本建築学会大会, 東北大学.
 - 13) 郭倩文, 大岡龍三, 呉元錫, 高姍: 対流放射連成解析による周壁温度が人体周辺微気象に及ぼす影響 (その2) 熱伝達率と熱損失の検討, 日本建築学会大会, 東北大学.
 - 14) Wonseok Oh, Ryoza Ooka, Junta Nakano, Hideki Kikumoto, Osamu Ogawa: Development of a new environmental index for outdoor and mist spray environments (Part 2) Proposal of a new index using thermal sensation votes, 2018.9.12-14, 空気調和・衛生工学会大会, 大同大学.
 - 15) Toshiyuki Hino, Ryoza Ooka: Integrated Utilization of Renewable Energy by 2-Stage Heat Pump System, 2018.9.12-14, 空気調和・衛生工学会大会, 大同大学.
 - 16) 李度胤, 大岡龍三, 池田伸太郎, 崔元準: ANN 及びメタヒューリスティクスを用いたモデル予測制御手法の開発(第4報) 蓄熱槽を含むオフィス空調設備の在室者変動を考慮した冷房運転への適用, 2018.9.12-14, 空気調和・衛生工学会大会, 大同大学.
 - 17) 劉明哲, 大岡龍三, 文可, 日野俊之, 李度胤, 崔元準, 池田伸太郎, Djafar Reza Palasz: 再生可能エネルギー利用のための水循環・分散型ヒートポンプシステムの開発(第10報) 冬期運転試験及び実測による暖房運転性能評価, 2018.9.12-14, 空気調和・衛生工学会大会, 大同大学.
 - 18) 文可, 大岡龍三, 日野俊之, 劉明哲, 李度胤, 崔元準, 池田伸太郎, Djafar Reza Palasz: 再生可

能エネルギー利用のための水循環・分散型ヒートポンプシステムの開発(第11報) ANNによる天空熱源ヒートポンプの冬期集熱運転性能の予測, 2018.9.12-14, 空気調和・衛生工学会大会, 大同大学.

- 19) 高姍, 大岡龍三, 呉元錫, 永野秀明:サーマルマネキンを用いた静穏環境における異なる温度条件下の対流熱伝達率に関する研究, 2018.9.12-14, 空気調和・衛生工学会大会, 大同大学.
- 20) 郭倩文, 大岡龍三, 呉元錫, 崔元準:床暖房システムを用いた環境試験建屋の温冷感快適感の検討, 2018.9.12-14, 空気調和・衛生工学会大会, 大同大学.
- 21) 菊本英紀, 大岡龍三:都市境界層流におけるピーク風速の確率的予測に関する風洞実験, 2018.9.3-6, 日本流体力学会年会2018, 大阪大学.

総説・解説

- 1) 大岡龍三:スマートシティに資する建物・都市のエネルギーシステム:AI活用の期待, City planning review, 2018-11-15, 67(6), pp. 58-61.

主催シンポジウム

- 1) Asian Symposium on Urban Environment and Energy, 2018.11.29-30, Institute of Industrial Science, the University of Tokyo.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(A)「学習的探索手法を応用した建築・都市エネルギーシステム最適化手法の開発」

民間等との共同研究

- 1) 屋外ミスト機器における暑さ評価手法の研究
- 2) 高温排気ガスの大気拡散予測手法の開発
- 3) 大規模展示場における空調制御・最適化システムの開発
- 4) 新たな価値を創出する次世代ものづくり技術に可能性探索と企画立案

受託研究

① 公的資金

- 1) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構「再生可能熱エネルギー利用のための水循環・分散型ヒートポンプシステムの開発」

② 公的資金以外

- 2) 高層建築物による風環境の変化に関する解析

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。これまでの研究で、放物型の偏微分方程式に対しては、問題の条件にも依存するが、パイプライン化等により数倍から数百倍の加速が可能であることを示してきた。このクラスの実アプリであるフェーズフィールド法(非保存形の Allen-Cahn 方程式, 保存形の修正 Allen-Cahn 法と Cahn-Hilliard 方程式など)に対しては、2 倍から 13 倍の加速が可能であることが確認できた。

双曲型の偏微分方程式については、収束加速が放物型よりも小さい原因について検討を進め、その原因となる時間領域界面における波の位相の食い違いが精度低下を引き起こしていることを明らかにした。この対策として、高精度の位相計算ができる CIP 法による位相計算精度向上は効果的で、修正緩和法の有効性を確認した。現在、更なる加速のため、エイトケン加速の実装を進めている状況である。

(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、疎行列の反復法に対して、直接法と反復法のハイブリッド解法である LSOR 法を SIMD 向けに実装した。三次元の計算空間 ijk 軸に対して、ある軸(例えば k)方向に直接法を適用し、残りの方向に対して反復緩和処理を行う。 ϕ を解ベクトル、 h を格子幅、 ϕ を Poisson 方程式のソース項とし、 k 方向に直接法を適用すると、次式のように書ける。

$$-\frac{1}{6}\bar{\phi}_{k-1}^m + \bar{\phi}_k^m - \frac{1}{6}\bar{\phi}_{k+1}^m = \frac{1}{6}(\phi_{i-1}^{m-1} + \phi_{i+1}^{m-1} + \phi_{j-1}^{m-1} + \phi_{j+1}^{m-1}) + h^2 \psi$$

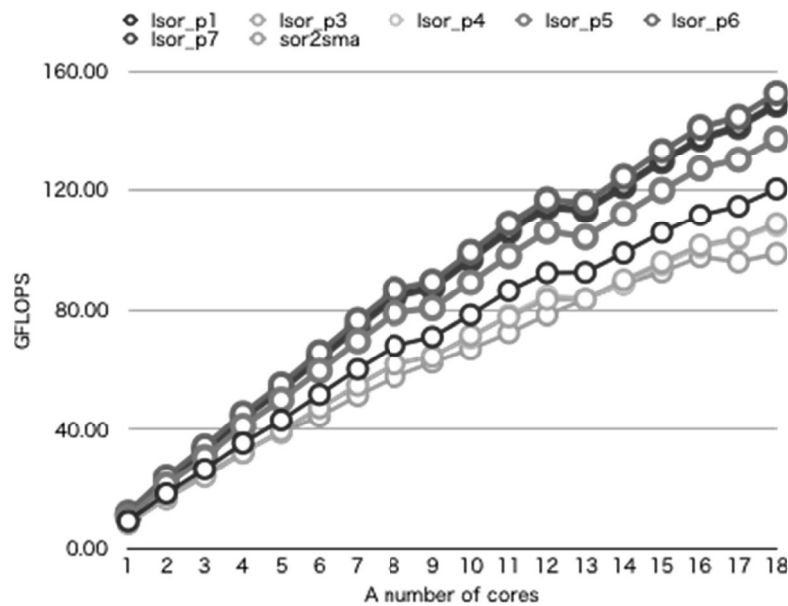
ここで m は反復回数である。 K 方向の一次元の行列反転で解が更新される。続いて、反復過程は、

$$\Delta\phi = (\bar{\phi}^m - \phi^{m-1})\omega$$

$$\phi^m = \phi^{m-1} + \Delta\phi$$

となる. ω は速係数である. 最初のステップである直接法は演算量が最小となる LU 分解を用いる. 続く反復過程からみると, 直接法は前処理に相当し, ここで固有値分布を改善し, 収束を早める効果がある. 収束性の解析によると, 古典的な SOR 法よりも $\sqrt{2}$ 倍反復階数が少なくなる.

反復法にはスレッド並列化が可能な 2 色のオーダリング (Red-Black SOR) を用いる. 直接法には LU 分解が最適であるが, LU は逐次アルゴリズムであるため, 並列処理の点で問題がある. スイープ方向を k 方向から ij 方向に変更することにより LU を並列化できるが, 右辺のソース項の計算で最新の値が利用できず, 収束性の向上代が小さい. また, LU 自体が効率的なアルゴリズムであるため, 皮肉なことに, ループボディの B/F は大きくなる. そこで, スイープ方向は k 方向のまま並列化する方法として, Parallel Cyclic Reduction (PCR) を用いる. PCR は LU よりも演算量は多くなるが, 並列化の効率がよく, SIMD 化にも適する特徴をもつ. PCR の解法自体は 1980 年代に提案されている方法であるが, SIMD や GPU 向けの実装として, 最近幾つかの提案がある. 完全スレッド化, L1 キャッシュの有効利用, SIMD 化などのチューニングにより, 最終的にベクトル版の SOR 法 (RB-SOR) に対して, 1.5 倍の計算速度の向上を得た. 下図に Xeon Gold 6140@3 GHz を利用した場合の性能測定結果を示す. 参照とする SOR2SMA(RB-SOR)の性能 98GFLOPS に比べて Isor_p6 は 152 GFLOPS であり, 約 1.5 倍の性能向上を果たした. 単精度の 18 コア (1 ソケット) 時のピーク性能 (AVX2) は 1500 GFLOPS であり, ピーク性能比は約 6.5 % から 10 % へと改善した. この結果はテストカーネルでループボディの B/F=3.4 程度であるが, 実際のコードではメトリック計算などで B/F=1 程度になるため, ルーフライン解析に基づく最終的な性能は 20~30 % となることが見込める.

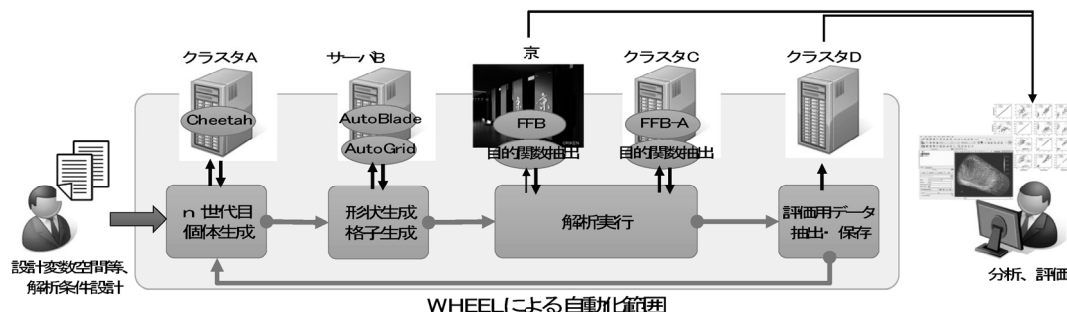


(3) 上流設計システムの設計

上流設計プラットフォームのプロトタイプ開発として、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 WHEEL (Workflow in Hierarchical distributEd parallel) の開発を行っている。WHEEL は 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。これまでの進捗として、下記が挙げられる。

- 1) Cheetah を用いた多目的設計探索ワークフロー(マツダベンチ利用)の動作を確認した。
- 2) ABINIT-MP (重点課題⑥アプリ) + WHEEL による京 micro キューを用いた 6000 ジョブ自動実行を実現し、Capacity Computing 事例における WHEEL の有用性を確認。
- 3) 萌芽的課題②(東京理科大)の交通流シミュレーションワークフローを WHEEL で構築し、テストデータで試行中。

本年度はワークフロープロジェクト構築・実行履歴管理機能を開発し、より簡便にプロジェクトの管理実行を行えるようにした。今後、より具体的な事例の取り組みとして、重点課題⑧のサブ課題 C と連携し、ボックスファンの最適化設計を FFB+Cheetah+WHEEL で実施する予定である。



(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Kenji Ono and Takanori Uchida: High-Performance Parallel Simulation of Airflow for Complex Terrain Surface, Modelling and Simulation in Engineering, 5231839, 2019.
- 2) E. C. Inacio, J. Nonaka, K. Ono, M. A. R. Dantas, and F. Shoji: Characterizing I/O and Storage Activity on the K Computer for Post-Processing Purposes, IEEE Symposium on Computers and Communications, ISCC 2018. Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Vol. 2018-June. pp. 730-735, 2018.

- 3) J. Nonaka, E. C. Inacio, K. Ono, M. A. R. Dantas, Y. Kawashima, T. Kawanabe and F. Shoji: Data I/O management approach for the post-hoc visualization of big simulation data results, *International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*, 9, 3, 1840006, 2018.
- 4) T. Kawanabe, J. Nonaka, K. Hatta and K. Ono: ChOWDER: An adaptive tiled display wall driver for dynamic remote collaboration, *Cooperative Design, Visualization, and Engineering - 15th International Conference, CDVE 2018, Proceedings*. Y. Luo (ed.). Springer Verlag, vol. 11151 LNCS, pp. 11-15, 2018.

和文論文

- 1) 田中俊太朗, 原田利宣, 小野謙二: 畳み込みニューラルネットワークを用いた自動車の三次元モデルにおける各車型の特徴抽出と視覚化, *日本感性工学会論文誌*, 18, 1, pp. 113-121, 2019.
- 2) K. Mikami and K. Ono, : PMLib を用いた計算性能測定と性能可視化手法, *研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC)*, 2018-HPC-163(1), 2018.

国際会議予稿集

- 1) Kazunori Mikami, Kenji Ono, Jorji Nonaka: Performance evaluation and visualization of scientific applications using PMLib, *Proceedings - 2018 6th International Symposium on Computing and Networking Workshops, CANDARW 2018*, pp. 243-249, 2018.
- 2) T. Kawanabe, J. Nonaka, K. Ono: Chowder: Dynamic contents sharing through remote tiled display system, *VINCI 2018 - 11th International Symposium on Visual Information Communication and Interaction. Association for Computing Machinery*, pp. 108-109, 2018.

国際会議アブストラクト

- 1) I. Koga and K. Ono: Effective Pre-processing of Genetic Programming for Solving Symbolic Regression in Equation Extraction, *The 12th International Workshop on Information Search, Integration, and Personalization*, May 15, Fukuoka, Japan, 2018.
- 2) M. Iizuka and K. Ono: Investigation of Convergence of Parareal Method for Advection Equation using Accurate Phase Calculation Method, *7th Workshop on Parallel-in-Time methods*, Roscoff, France, May 3 2018.
- 3) K. Ono: Dynamic selection of the number of padding to improve the performance caused by slushing, *2018 Conference on Advanced Topics and Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing*, Tainan, Taiwan, Province of China, 2018.

学会講演論文

- 1) 小野謙二, 三上和徳: スレッド性能を備えた性能モニタライブラリ PMLib, 第 32 回数値流体力学シンポジウム, B06-1, 2018.
- 2) 飯塚幹夫, 小野謙二: 移流問題に対する Parareal 法による時間並列計算の収束挙動, 第 32 回数値流体力学シンポジウム, B07-2, 2018.

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・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、有限要素法解析によるき裂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、セラミックコーティングの信頼性評価といった様々な問題に取り組んでいる。

(1) 反応分子動力学のためのポテンシャルモデルの開発と酸化ニッケル還元反応の解析

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酸化ニッケルの還元反応を再現できるポテンシャル関数の開発に注力した。第一原理計算に基づく適切なリファレンスデータの設定とフォースマッチング法の援用により、従来のポテンシャルで問題であった非現実的な NiO クラスターの脱離や鎖状 HO 分子の生成を取り除くとともに酸化ニッケルの融点大幅に過小評価されるという問題も抑えることができ、酸化ニッケル還元反応の原子レベルメカニズムを再現することに成功した。

(2) ナノチューブ座屈変形との原子モデル解析

ナノチューブの座屈変形を利用することにより、小さいひずみ幅で急激な物性変化を起こす新しいナノデバイスの創製が期待できる。本年度は、圧縮静水圧を受けるカーボンナノチューブの径方向座屈による断面形状変化のメカニズムを分子動力学シミュレーションによって詳細に検討した。径方向に潰された形状でカーボンナノチューブが安定する場合には二面角効果(分子構造のねじりによるエネルギー変化)がその安定構造に大きく寄与していることが明らかとなった。また、静水圧の荷重及び除荷に伴う変形を追跡したところ、最外殻のナノチューブ層における構造欠陥がその挙動に強く影響を及ぼすことも明らかとなった。

(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った結果、ひずみ速度の関

数としての降伏応力を取得した。WLF 則により温度効果を統一的に取扱うことでマスターカーブが得られることを示すとともに、荷重モードがボイド生成支配型・せん断変形支配型の二つに分類されそれぞれのマスターカーブが得られることを示した。さらに、降伏挙動に対する分子量の影響を検討し、分子量の増加に伴い絡み合いが増え、そのため降伏後に保持可能な応力が増大することで脆性-延性遷移が生じることを示した。

(4) 耐環境セラミックコーティング(EBC)の機械的信頼性評価

次世代の航空機エンジンタービン材料へのセラミック材料の適用が進められているが、高温水蒸気環境における減肉を防止するため、複雑な多層構造を持つ耐環境コーティング(EBC)が必須となるが、その構造の複雑さのため力学設計は簡単ではなく精密な数値シミュレーションが求められる。我々は実測に基づいた材料物性値を忠実に反映した有限要素法解析を実施し、製造プロセスにおける熱応力状態および実機での熱サイクル環境下における界面き裂のエネルギー解放率を計算することで、EBCの機械的信頼性を評価した。実験による破壊靱性値評価(他機関実施)との比較により、き裂を生じないための膜厚範囲の提案および熱サイクル条件における信頼性確保を行った。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) M. Kondo, N. Shishido, S. Kamiya, A. Kubo, Y. Umeno, Y. Ishikawa and N. Koshizaki: High-strength sub-micrometer spherical particles fabricated by pulsed laser melting in liquid, 2018, Particle and Particle Systems Characterization Vol. 35, 1800061.
- 2) M. Sato, H. Shima, M. Sato and Y. Umeno: Axial buckling behavior of single-walled carbon nanotubes: Atomistic structural instability analysis, 2018, Physica E Vol. 103, pp. 130-142.
- 3) Y. Umeno, Y. Yachi, M. Sato and H. Shima: On the atomistic energetics of carbon nanotube collapse from AIREBO potential, 2019, Physica E Vol. 106, pp. 319-325.
- 4) K. Edagawa, Y. Kamimura, A.M. Iskandarov, Y. Umeno and S. Takeuchi: Peierls stresses estimated by a discretized Peierls-Nabarro model for a variety of crystals, 2019, Materialia Vol. 5, 100218.

和文論文

- 1) 殿塚一希, 戸高義一, 足立望, 堀井基弘, 戸田健一, 光原昌寿, 岩崎眞澄, 椎原良典, 梅野宜崇, 西田稔, 中島英治: 鉄鋼材料におけるリン系添加剤配合潤滑油中の高摩擦係数化に及ぼす高密度格子欠陥の影響, 2019, 鉄と鋼, Vol. 105, No. 2, pp. 282-289.

国際会議アブストラクト

- 1) Y. Umeno, M. Sato and A. Kubo: Atomistic modeling of multiphysics in nanostructures, ACE-X2018: The 12th International Conference on Advanced Computational Engineering and Experimenting, 2018.7.1-5, Amsterdam, The Netherlands.
- 2) Y. Umeno and E. Kawai: Computational modeling for fracture criteria of environmental barrier coating

structure for SiC/SiC composite, THERMEC2018: International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials, 2018.7.8-13, Paris, France.

- 3) Y. Umeno and A. Kubo: Continuum model of slow-fast mode transition of crack propagation in viscoelastic materials, WCCM2018: 13th World Congress on Computational Mechanics, 2018.7.22-27, New York, USA.
- 4) E. Kawai and Y. Umeno: Finite element method model of damage initiation due to thermal stress in environmental barrier coatings with columnar layer for ceramics, APCFS2018: Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength 2018, 2018.10.21-25, Xi'an, China.
- 5) Y. Umeno, A. Kubo and Y. Sudo: Friction mechanism of nanostructured steel in lubricant: A coarse-grained molecular dynamics study, MMM2018: The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling, 2018.10.28-11.2, Osaka, Japan.
- 6) A. Kubo and Y. Umeno: Development of artificial neural network model for prediction of electronic density of states in atomistic systems, MMM2018: The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling, 2018.10.28-11.2, Osaka, Japan.
- 7) A. Kubo and Y. Umeno: Numerical analysis of crack propagation velocity transition in elastomers, 28th Annual Meeting of MRS-J, International Symposium F-9: Design and Characterization of Tough Polymers, 2018.12.19-20, Kitakyushu International Conference Center, Fukuoka, Japan.

学会講演論文

- 1) 梅野宜崇, 上野尊史, 久保淳: 酸化ニッケル水素還元反応のためのReaxFFポテンシャル構築および分子動力学解析, 第3回マルチスケール材料力学シンポジウム, 2018年5月25日, 高知工科大学永国寺キャンパス, 講演論文集USB.
- 2) 佐藤誠修, Wu CHANG, 梅野宜崇: Dipole potentialを用いたPbTiO₃ナノワイヤの分極構造変化に関する分子動力学解析, 第3回マルチスケール材料力学シンポジウム, 2018年5月25日, 高知工科大学永国寺キャンパス, 講演論文集USB.
- 3) 久保淳, 梅野宜崇: 機械学習を用いた原子構造体の電子状態密度の推定, 第3回マルチスケール材料力学シンポジウム, 2018年5月25日, 高知工科大学永国寺キャンパス, 講演論文集USB.
- 4) 梅野宜崇, 須藤佑太, 久保淳: ナノヘテロ構造を持つ鉄鋼の摩擦メカニズム解明のための粗視化分子動力学シミュレーション, 第23回計算工学講演会, 2018年6月6日～8日, ウィンクあいち, 講演論文集CD-ROM.
- 5) 上野尊史, 久保淳, 梅野宜崇: 酸化ニッケルの水素還元反応シミュレーションのための反応力場構築, 第23回計算工学講演会, 2018年6月6日～8日, ウィンクあいち, 講演論文集CD-ROM.
- 6) 久保淳, 梅野宜崇: 非晶性高分子の変形・破壊挙動の分子量依存性に関する粗視化分子動力学解析, 第23回計算工学講演会, 2018年6月6日～8日, ウィンクあいち, 講演論文集CD-ROM.
- 7) 作道直幸, 久保淳, 梅野宜崇, 奥村剛: ガラス転移が引き起こすゴムの亀裂進展速度ジャンプ, 日本物理学会2018年秋季大会, 2018年9月9日～12日, 同志社大学, 講演論文集CD-ROM.
- 8) 梅野宜崇, 久保淳: 構造用ポリマーの破壊メカニズム解明のためのマルチスケールモデリング, 高

分子学会第67回高分子討論会, 2018年9月12日～14日, 北海道大学, 講演論文集CD-ROM.

- 9) 河合江美, 梅野宜崇:耐環境性セラミックスコーティングの損傷に関する理論と数値解析:柱状構造層寸法の影響, 日本セラミックス協会 第31回秋季シンポジウム, 2018年9月5日～7日, 名古屋工業大学, 講演論文集CD-ROM.
- 10) 近藤光彦, 越崎直人, 宍戸信之, 神谷庄司, 久保淳, 梅野宜崇, 石川善恵:SEM用ナノインデンテーション装置を用いたサブミクロン球状粒子の圧縮試験(II), 日本セラミックス協会 第31回秋季シンポジウム, 2018年9月5日～7日, 名古屋工業大学, 講演論文集CD-ROM.
- 11) 河合江美, 梅野宜崇:柱状構造層を有する耐環境性セラミックスコーティングの熱応力によるき裂発生条件の数値解析, 日本機械学会2018年度年次大会, 2018年9月9日～12日, 関西大学, 講演論文集CD-ROM.
- 12) 河合江美, 梅野宜崇:数値解析による柱状構造層を有する耐環境性セラミックスコーティングのき裂発生条件の予測:クリープの影響, 日本機械学会M&M2018材料力学カンファレンス, 2018年12月22日～24日, 福井大学, 講演論文集CD-ROM.

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 挑戦的研究(萌芽)「機械学習による反応分子動力学ポテンシャル自動作成システムの構築」

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」

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) 乱流熱流動場の最適制御に関する研究

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。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、異なる制御を施した壁乱流場のエネルギー収支を解析し、抵抗低減効果が平均場と乱流場の粘性エネルギー散逸の変化に与える影響を明らかにした。また、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た。更に、同手法を熱交換器の形状最適化に応用し、数値的に得られた伝熱面形状を3Dプリンタで試作し、実証するための実験システムの構築を進めている。

(2) 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に基づく物質放出源の特定は、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、それらの計測情報のみを用いて、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、原理的に計算負荷が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。

(3) 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ミクロな流れや基板上に堆積する微粒子の配列パターンの解明を目指して、実験的研究を進めている。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Davide Gatti, Alexander Stroh, Bettina Frohnapfel, Yosuke Hasegawa: Predicting turbulent spectra in drag-reduced flows, *Flow Turbulence Combust*, Vol. 100, pp. 1081-1099 (2018).
- 2) Davide Gatti, Andrea Cimarelli, Yosuke Hasegawa, Bettina Frohnapfel, Maurizio Quadrio: Global energy fluxes in turbulent channels with flow control, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 857, 345-373 (2018).
- 3) Kanji Kaneko, Takayuki Osawa, Yukinori Kametani, Takeshi Hayakawa, Yosuke Hasegawa, Hiroaki Suzuki: Numerical and experimental analyses of three-dimensional unsteady flow around a micro-pillar subjected to rotational vibration, *Micromachines*, Vol. 9, E668 (2018).
- 4) Qi Wang, Yosuke Hasegawa, Tamer Zaki: Adjoint algorithm for spatial reconstruction of scalar sources from remote measurements in turbulent flow, *Journal of Fluid Mechanics*, in press.

国際会議予稿集

- 1) Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Adjoint-based shape optimization for turbulent convective heat transfer with a hybrid RANS-DNS approach, 16th International Heat Transfer Conference (IHTC16), Beijing, China, Aug. 10-15 (2018).
- 2) Arjun J. Kaithakkal, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Optimal control of heat and fluid flow in a channel at low Reynold's numbers, 16th International Heat Transfer Conference (IHTC16), Beijing, China, Aug. 10-15 (2018).
- 3) Yukinori Kametani, Yutaka Fukuda, Takayuki Osawa, Yosuke Hasegawa: Experimental assessment of heat transfer and pressure loss characteristics of optimal heat transfer surfaces, 12th European Fluid Mechanics Conference (EFMC12), Vienna, Austria, Sept. 9-13 (2018).
- 4) Yuki Akechi, Yuya Yamada, Takayuki Osawa, Takahiro Tsukahara, Yosuke Hasegawa: Flow estimation behind a cylinder using data assimilation, 12th European Fluid Mechanics Conference (EFMC12), Vienna, Austria, Sept. 9-13 (2018).
- 5) Kanji Kaneko, Takayuki Osawa, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa, and Hiroaki Suzuki: A numerical model for three-dimensional analysis of vibration-induced flow, The 22nd International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences (μ TAS 2018), Kaohsiung, Taiwan, Nov. 11-15 (2018).
- 6) Kanji Kaneko, Taiji Okano, Takeshi Hayakawa, Yosuke Hasegawa, and Hiroaki Suzuki: A pumpless mixer for efficient capturing of small particles utilizing vibration-induced flow, The 32nd International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS 2019), Seoul, Korea, Jan. 27-31 (2019).
- 7) Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Adjoint-based shape optimization for complex heat transfer surfaces in turbulent flows, Adjoint-based shape optimization for complex heat transfer surfaces in turbulent flows, Bad Herrenalb, Germany, Mar. 26-29 (2019).

- 8) Arjun J. Kaithakkal, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Dissimilar response of the streamwise velocity and temperature field under traveling wave-like wall blowing and suction, Bad Herrenalb, Germany, Mar. 26-29 (2019).

国際会議アブストラクト

- 1) Bettina Frohnapef, Andra Cimorelli, Yosuke Hasegawa, Maurizio Quadrio, Davide Gatti: Turbulent Dissipation in Drag Reduced Flows, 90th Annual Meeting of the International Association of Applied Mathematics and Mechanics (GAMM2019), Vienna, Austria, Feb 18-22 (2019).

学会講演論文

- 1) 亀谷幸憲, 長谷川洋介: 乱流場における伝熱面形状最適化アルゴリズムの構築と実証1, 第55回日本伝熱シンポジウム, 札幌, 2018年5月29-31日.
- 2) 福田豊, 大澤崇行, 亀谷幸憲, 長谷川洋介: 乱流場における伝熱面形状最適化アルゴリズムの構築と実証2, 第55回日本伝熱シンポジウム, 札幌, 2018年5月29-31日.
- 3) 金子完治, 大澤崇行, 鈴木宏明, 長谷川洋介: 旋回振動によりマイクロ構造物周りに誘起される3次元非定常流れ場の数値解析及びPIV計測, 第55回日本伝熱シンポジウム, 札幌, 2018年5月29-31日.
- 4) 深淵康二, 山本誠, 岩本薫, 長谷川洋介, 塚原隆裕, 福島直哉, 守裕也, 青木義満: 機械学習を用いた乱流の特徴抽出手法の構築に向けて, 日本流体力学会年会2018, 大阪, 2018年9月3-6日.
- 5) 明智ゆき, 大澤崇行, 塚原隆裕, 長谷川洋介: データ同化を用いた粘弾性流体における円柱後流の流れ場推定, 日本機械学会 第96期 流体工学部門 講演会, 室蘭, 2018年11月29-30日.
- 6) 金子完治, 大澤崇行, 岡野太治, 長谷川洋介, 鈴木宏明: 微量液体の効率的攪拌に向けたポンプレスキサの開発, 日本機械学会第9回マイクロ・ナノ工学シンポジウム, 札幌, 2018年10月30日-11月1日.
- 7) 金子完治, 岡野太治, 早川健, 長谷川洋介, 鈴木宏明: 微粒子の効率的な捕捉に向けた振動誘起流によるポンプレスキサ, 公益社団法人 精密工学会 2019年度春季大会, 東京, 2019年3月13日-15日.

著書

- 1) 長谷川洋介, 中山雅敬: 生物の優れた機能から着想を得た新しいものづくり(第5章「毛細血管リモデリングと流路ネットワーク最適化」分担執筆), pp.146-155, シーエムシー出版 (2018).

総説・解説

- 1) 長谷川洋介: 制御から見る壁乱流, ながれ, Vol. 37, pp. 475-480 (2018).
- 2) 深淵康二, 山本誠, 岩本薫, 長谷川洋介, 塚原隆裕, 福島直哉, 守裕也, 青木義満: 機械学習を用いた乱流の特徴抽出手法の構築に向けて, ながれ, Vol. 37, pp. 524-527 (2018).

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 国際共同研究加速基金(国際共同研究強化)「生体内毛細血管網のマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーション」
- 2) 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) 「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」
- 2) 「車載用送風機の最適設計のための解析技術開発」
- 3) 「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」

長井宏平研究室 成熟社会インフラ学

長井研究室は「成熟社会インフラ学」研究室として、都市の骨格をなす道路や橋梁などのインフラ施設について、主に維持管理の観点からの構造物の力学特性に関する先端研究に留まらず、社会実装のための知識の体系化を、国内に留まらず国際活動を通して進め、新たな国際研究分野を構築・展開することに取り組んでいる。そのために、研究活動を通じた社会実装を行うことと、国際性を生かした展開を、国内と主にアジアの途上国を対象に進めている。

主たる研究分野は構造工学であり、コンクリート構造を中心に、鋼構造、地盤工学まで取り組んでいる。また、成熟した社会に移行しつつある日本が直面している、インフラの老朽化と、少子高齢化・過疎化等の社会問題が顕在化する中でのインフラ維持管理の研究を、データ分析や空間情報を活用したマネジメントの側面からも進めている。ここでは、劣化した橋梁等の構造物を個別と群の両方としての捉えるために、構造工学の知識が生かされている。さらに、主にアジアの途上国も遠くない将来に迎える維持管理の問題に、建設が進む段階から取り組むための国際展開に取り組んでいる。特にインフラ維持管理に伴う課題は、日本の地方自治体とアジア諸国で、人員・予算・技術力が不足している点などで類似しており親和性が高く、研究や社会実装を国内・国外の両方で取り組むことで相乗効果を上げる。以上の「構造工学」「日本の地方自治体のインフラ維持管理」「国際展開」の3要素を有機的に連動させることで、「インフラ維持管理の国際研究分野」の確立と展開を果たすことが、現在と今後の研究活動の目標である。

(1) 鉄筋コンクリート構造物の離散解析手法による微細構造解析

鉄筋コンクリートの破壊シミュレーションを、離散解析(Rigid Body Spring Model)を用い、コンクリートのひび割れ発生と進展を直接的に表現する微細スケールにて実施している。ここでは鉄筋の節形状までモデル化し、複雑な配筋を一本ずつ全て再現し、例えば柱梁接合部の破壊のような複雑な応力とひび割れ状態を直接的に表現する。さらに、損傷した鉄筋コンクリートの構造性能を評価するために、鉄筋腐食の伴う鉄筋膨張とコンクリートへのひび割れ導入や、腐食原因となる塩化物イオンや水分などの物質移動を表現するトラスネットワークも導入している。社会基盤インフラの老朽化問題への適用を進めている。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Koji MATSUMOTO, Hirofumi YAMAGUCHI, Kohei NAGAI: Fatigue Pull-out Failure of Deformed Bars in Concrete under the Effect of Liquid Water, Cement and Concrete Composites, Vol. 91, August, pp.198-208, 2018.
- 2) Koji MATSUMOTO, Carlos Arturo Linan PANTING, Nuntikorn KITRATPORN, Wataru TAKEUCHI, Kohei NAGAI, Eiji IWASAKI: Performance Assessment Using Structural Analysis and Spatial Measurement of a Damaged Suspension Bridge: Case Study of Twantay Bridge, Myanmar, Journal of Bridge Engineering, ASCE, Vol. 23, Issue 10, 2018.
- 3) Chika YAMASAKI, Michael HENRY, Kohei NAGAI, Koji MATSUMOTO, Hiroshi YOKOTA:

Internal Knowledge Sharing by Infrastructure Maintenance Engineers in Small and Medium Size Construction Companies in Japan, Engineering Journal, Volume 22, Issue 3, pp.243-255, 2018. DOI:10.4186/ej.2018.22.3.243.

- 4) Liyanto EDDY, Koji MATSUMOTO, Kohei NAGAI, Piyaphat CHAEMCHUEN, Michael HENRY, Kota HORIUCHI: Investigation on Quality of Thin Concrete Cover using Mercury Intrusion Porosimetry and Non-destructive Tests, Journal of Asian Concrete Federation, Vol.4, No.1, pp.47-66, 2018.
- 5) Rajamurugan SUNDARAM, Koji MATSUMOTO, Kohei NAGAI, Anupam AWASTHI: Visual Investigation Method and Structural Performance Evaluation for DEF Induced Damaged Indian Railway PC Sleepers, Journal of Asian Concrete Federation, Vol.4, No.2, pp.103-115, 2018.

和文論文

- 1) 安藤陽子, 片山哲哉, 浅本晋吾, 長井宏平: インドで発生した PC 枕木のひび割れの原因究明と ASR および DEF の相互作用, コンクリート工学年次論文集, Vol.40, No.1, pp. 909-914, 2018.

国際会議予稿集

- 1) Liyanto EDDY, Koji MATSUMOTO, Kohei NAGAI, Zhen WANG: Investigation of Effect of Local Bond Model on Crack Propagation in RC using 3D RBSM, Proceeding of the Computational Modelling of Concrete and Concrete Structures (Euro-C 2018), pp.755-766, 2018.
- 2) Ahmed OKEIL, Koji MATSUMOTO, Kohei NAGAI: Investigation on Local Bond Deformations in Concrete and Cement Paste by Using DIC, Proceedings of Academicera 15th International Conference, pp. 32-37, 2018.
- 3) Punyawut JIRADILOK, Kohei NAGAI, Koji MATSUMOTO: Development of Spatial Corrosion Damage Simulation Based on Rigid Body Spring Model, Proceedings of 12th fib International PhD Symposium in Civil Engineering, pp. 467-475, 2018.
- 4) Osama HEGEIR, Tsukasa MIZUTANI, Koji MATSUMOTO, Kohei NAGAI: The Cause Estimation of Damages in Pathein Suspension Bridge Based on Vibration Measurements. Proceedings of The 18th International Conference on Experimental Mechanics (ICEM 2018), vol. 2(8), 379, 2018. <http://www.mdpi.com/2504-3900/2/8/379>, <https://doi.org/10.3390/ICEM18-05209>.
- 5) Takahiro KASHIWA, Kohei NAGAI, Hitoshi TATSUTA, Helmut PRENDINGER, Koh IBAYASHI, Juan Josee Rubio GUILLAMON: Development of Delamination Detection System for Concrete Decks by Using Convolutional Neural Network, Proceedings of The 18th International Conference on Experimental Mechanics (ICEM 2018), vol. 2(8), 418, 2018.
- 6) Hitoshi TATSUTA, Kohei NAGAI, Takanori NOMURA: Automatic Judgement of Steel Bridge's Degrade by Deep Learning, Proceedings of The 8th International Conference of Asian Concrete Federation (ACF2018), pp.1189-1193, 2018.
- 7) Kohei NAGAI, Naoki SUZUKI, Yukihiro ISHIHARA, Taro UCHIMURA: An Investigation of Effect

of Distance and Shape of Pile on the Displacement of Gag Pile by 3D FEM Analysis, Proceedings of the First International Conference on Press-in Engineering 2018, Kochi Session D: Piling process / Use of piling data, NO.0713, pp.429-434, 2018.

- 8) Kohei NAGAI, Punyawut JIRADILOK, Koji MATSUMOTO: Development of Bond Deterioration Model in Corroded RC Member for Discrete Analysis Model, Proceedings of 17th International Symposium on New Technology for Urban Safety of Mega Cities in Asia (USMCA), Paper No.08, 2018. (in Conference USB).
- 9) Koji MATSUMOTO, Kohei NAGAI, Rajamurugan SUNDARAM, Anupam AWASTHI: Cause Estimation and Proposal of Inspection Method for Damaged PC Sleepers of Indian Railways, Proceedings of 17th International Symposium on New Technology for Urban Safety of Mega Cities in Asia (USMCA), Paper No.09, 2018. (in Conference USB).

学会講演論文

- 1) 龍田 斉, 長井 宏平, 野村 貴律, 平山 博, 横山 広, 宮川 輝幸: 鋼製支承の自動損傷判定に関する Deep Learning の有効性検証, 土木情報学シンポジウム講演集, vol.43, pp.133-136, 2018.
- 2) 松本 浩嗣, Rajamurugan Sundaram, 長井 宏平, Anupam Awasthi : インド鉄道・損傷 PC マクラギの構造性能評価と外観目視点検手法, 既設コンクリート構造物の構造性能評価に関するシンポジウム講演概要集, pp. II-23-28, 2018.
- 3) 柏 貴裕, 長井 宏平, 龍田 斉, Helmut Prendinger, 井林 康, Juanjo Rubio: 畳み込みニューラルネットワークを用いたコンクリート床版の損傷検出, CS10-016, pp.31-32, 土木学会第 73 回年次学術講演会, 2018.
- 4) 龍田 斉, 平山 博, 長井 宏平, 横山 広, 野村 貴律, 宮川 輝幸: Deep Learning を用いた鋼製支承の自動損傷判定の検証, 土木学会第 73 回年次学術講演会, CS10-011, pp.21-22, 2018.
- 5) 鬼木 浩二, 龍田 斉, 長井 宏平, 横山 広, 野村 貴律, 宮川 輝幸: Deep Learning を用いた鋼製支承画像の自動生成, 土木学会第 73 回年次学術講演会, CS10-013, pp.25-26, 2018.
- 6) 菅沼 久忠, 梅川 雄太郎, 長井 宏平, 松本 浩嗣: ミャンマー国道への B-WIM の適用性の検討に関する研究, 土木学会第 73 回年次学術講演会, 1-029, pp.183-184, 2018.
- 7) 佐々木 勇凱, 長井 宏平, 藤原 康宣, 井林 康: 利用頻度の低い山間部橋梁の重要度評価のための簡易交通量計測, 土木学会第 73 回年次学術講演会, 6-126, pp.431-432, 2018.
- 8) 長井 宏平, 佐々木 勇凱, 藤原 康宣, 井林 康: 市街地密集橋梁の簡易交通量計測による利用状況把握, 土木学会第 73 回年次学術講演会, 6-127, pp.433-434, 2018.

総説・解説

- 1) 松本 浩嗣, 長井 宏平: ミャンマーで吊橋が崩落 日本の大学と企業の合同チームが調査を実施, 橋梁と基礎, 9 月号, pp. 64-65, 2018,

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(B)【代表】三次元微細構造解析による劣化した橋梁構造部材の残存性能評価と補修補強
- 2) 国際共同研究加速基金(国際共同研究強化(A))【代表】三次元微細構造離散解析システムの拡張によるRC内部鉄筋腐食分布の逆推定への展開
- 3) 基盤研究(B)【分担】硬化過程の温度履歴によるコンクリートの異種材料界面の状態変化と耐久性の関連性評価

民間等との共同研究

- 1) 人工知能(AI)を用いた橋梁維持管理に係る共同研究(大日本コンサルタント株式会社)
- 2) 量産型海中・海底ステーションの構築(成光精密株式会社)
- 3) 社会基盤インフラデータ分析とマネジメントサイクルへの実装の研究(株式会社ベイスンコンサルティング)

受託研究

①公的資金

- 1) 戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)「インフラ維持管理・更新・マネジメント技術」【分担】道路インフラマネジメントサイクルの展開と国内外への実装を目指した統括的研究
- 2) 地球規模課題対応国際科学技術協力プログラム(SATREPS)【分担】ミャンマーの災害対応力強化システムの開発と普及のためのプラットフォーム構築
- 3) 情報通信研究機構委託研究「ソーシャル・ビッグデータ利活用・基盤技術の研究開発」【分担】現場の知、市民の知を有機的に組み込んだ 次世代型市民協働プラットフォームの開発

革新的シミュレーション研究センター 平成 30 年度 活動報告 Vol. 11

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

