



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

令和元年度
活動報告

Vol. 12

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 年度から令和元年度までは、『「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きました。令和 2 年度からは「富岳」成果創出加速プログラムの課題の一つである「「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」の代表機関として、スーパーコンピュータ「富岳」を利用して、ポスト「京」重点課題⑧で開発したアプリケーションの実証研究を実施しています。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。

「富岳」をはじめとした最新鋭のスーパーコンピュータを駆使した、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 2 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

令和元年度 活動報告

Vol. 12

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. 各研究室の活動実績	35

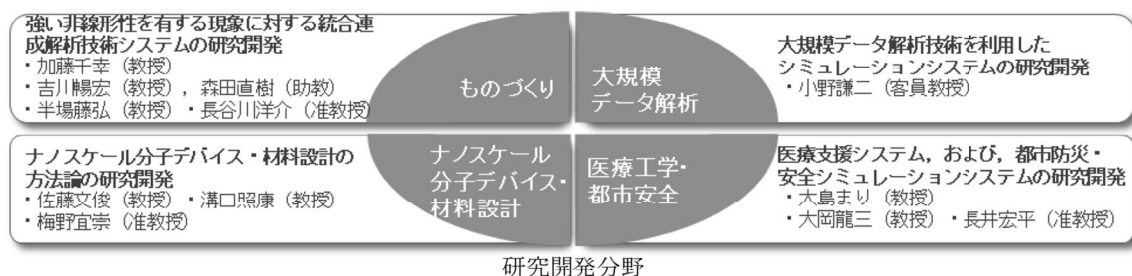
1. 革新的シミュレーション研究センターの概要

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、平成 14 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、平成 20 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(第 1 期 CISS)、平成 25 年 4 月に一度目の改組を実施し(第 2 期 CISS)、さらに、平成 30 年 4 月に二度目の改組を実施しました(第 3 期 CISS)。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、平成 20 年 10 月から平成 25 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、また、平成 22 年から平成 27 年 3 月に掛けては文部科学省「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その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、その普及に努めてきました。

第 2 期 CISS では、第 1 期 CISS の成果を基にして、我が国で開発された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、我が国産業界が国際的リーダーシップを発揮し、また、産業競争力を抜本的に強化することに貢献することを目指して、精力的な研究・教育活動を展開してまいりました。

第 3 期 CISS では、わが国のものづくり分野におけるシミュレーションの代表拠点として、「京」を駆使して得られた先端的な成果の実用化を加速するとともに、AI と HPC を融合した、シミュレーションの新しい方法論とそれを実現するアプリケーションの研究開発をおこなっています。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。これらの将来に向けた方法論の研究開発を推進すると同時に、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ました(実施期間:平成 26～令和元年度)などの大型研究プロジェクトを代表機関として推進してきました。



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 HAMBA, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 流体物理学

Fluid Physics



大島 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

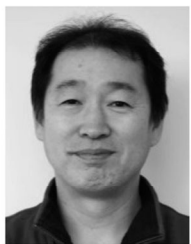
Ryoza OOKA, Professor

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

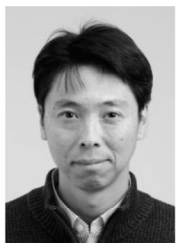
Yoshitaka UMENO, Associate Professor

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

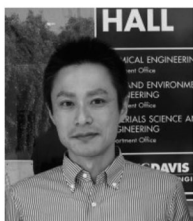
Yosuke HASEGAWA, Associate Professor

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

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、国立大学法人山梨大学、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、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ている。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した。

令和元年度は、平成30年度までの成果を踏まえ、開発されたキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による効果の推定とポスト「京」を利用した場合のアプリケーションの性能の推定を実施し、成果創出フェーズにつながるデータを取得した。また、ポスト「京」を開発する理化学研究所計算科学研究センターと連携してコ・デザインを実施した。具体的には、サブ課題Cの主要アプリであるFrontFlow/blueを中心に、アプリの最適化を進め、その成果を他のサブ課題の主要なアプリにも展開した。以下に、各サ

ブ課題の主要な成果について記す。

[詳 細]

(i) 研究開発

(サブ課題 A) 設計を革新する多目的設計探査・高速計算技術の研究開発

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査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，多目的設計探査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。

令和元年度は，以下の項目について，開発されたキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による効果の推定とポスト「京」を利用した場合のアプリケーションの性能の推定を実施し，成果創出フェーズにつながるデータを取得した。これまでに，多目的設計探査技術については，これまでに開発された技術を統合し，実問題で従来のアルゴリズムと比較して 1/3~1/30 程度のターンアラウンドタイムで優れた解集合の探査が可能であることが示された。高速計算技術として開発した時間並列計算については，フェーズフィールド法のオリジナルのコードに比べ，目標の加速率 7 倍に対して 14~40 倍になることを確認した。令和元年度に実施した内容に関して以下に記す。

a) 多目的設計探査技術

a)-1 開発された多目的設計探査技術の統合およびターボ機械設計等の実問題での検証解析に関しては，多目的設計探査技術の統合および実問題での検証解析を，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，開発された手法は実問題において従来のアルゴリズムと比較し 1/3~1/30 程度のターンアラウンドタイムで優れた解集合の探査が可能であることが示された。

b) 高速計算技術

b)-1 時間領域並列化法の「京」レベルの計算機でのキラーアプリ実装と性能評価に関しては，フェーズフィールド法の非線形方程式へ適用を，国立大学法人九州大学が実施した。この結果，拡散支配型の方程式に対しては，線形問題で 15 倍，非線形問題では 4~40 倍高速化されることを，また，双曲型方程式に対しては数倍高速化されることを確認した。

b)-2 低 B/F アルゴリズムの「京」レベルの計算機でのキラーアプリへの実装と性能評価に関しては，98%以上のキャッシュ再利用が可能な新しい SLOR-PCR 法の開発を，国立大学法人九州大学が実施した。この結果，開発した SLOR-PCR 法はメモリーコアのポテンシャルを引き出せることがわかった。

c) 上流設計技術

- c)-1 上流設計プラットフォームとキラーアプリによる、実問題への適用と検証に関しては、サブ課題 C との連携による、ファンの性能・騒音最適化設計ワークフローの構築と評価と、萌芽的課題②「堅牢な輸送システムモデルの構築と社会システムにおける最適化の実現」と連携による、Capacity Computing ワークフローの構築と評価を、国立研究開発法人理化学研究所および国立大学法人九州大学が実施した。この結果、多目的最適化設計のような複雑かつ長時間なワークフローや、分子・創薬系アプリユーザが求めるキャパシティ・コンピューティングのワークフローなど、幅広い利用事例での有効性を実証した。

(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。

令和元年度は、以下の項目について、開発されたキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による効果の推定とポスト「京」を利用した場合のアプリケーションの性能の推定を実施し、成果創出フェーズにつながるデータを取得した。これまでに、実車空力解析に対してプリ処理・コアカーネル高速化により解析ターンアラウンドタイム 24 時間以内を実現し、そして、オイラー構造解析・圧縮性解析・6 自由度移動境界解析の基本プログラムが開発された。令和元年度に実施した内容に関して以下に記す。

- a) 流体・構造統一連成解析システムを用いた産業応用最適設計解析に関しては、マツダおよびサブ課題 A との連携による空力多目的形状最適化解析および機械学習によるサロゲートモデルの構築、オイラー構造解析手法を用いた設計システムによるトポロジー最適設計解析、スズキ・日産自動車との連携による WLTP 手法に基づく最適空力設計支援解析、トヨタとの連携による空力車体運動連成解析フレームワークの構築、スズキとの連携によるボンネット周り狭帯域空力音解析を、国立大学法人神戸大学が実施した。この結果、空力多目的形状最適化においては、実設計で得られた知見と同様の目的関数値の傾向が再現されていることが確認でき、また構築したニューラルネットワークが妥当であることが確かめられた。トポロジー最適設計解析においては、自動車のホワイトボディフレームに対し、実形状の知見に近い結果を得ることができた。WLTP 実証空力解析では、11+16 仕様の実車フルモデル CAD データ群に対して、概ね実験と良い一致を示す $\Delta C_d A$

の予測結果が得られた。空力車体運動連成解析では、ハッチバック型実車モデルを用いた操縦安定性解析を実現し、官能試験での報告と整合する結果が得られた。狭帯域空力音解析では、車体モデルに対する大規模解析を行い、音響フィードバックに基づく音響振動の再現に成功した。

- b) ポスト「京」システムを対象とした基盤アプリの性能推定と高速化に関しては、非圧縮性統一解法に対する「富岳」に向けた性能評価チューニングを、国立研究開発法人理化学研究所が実施した。この結果、プログラム全体について京 8,192 ノードで 2.9 倍の性能向上が得られた。なお、圧縮性解法では「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はすでに確認済である。
- 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解析の大規模化に関しては、スズキとの連携による実車ホワイトボディ剛性解析を、国立大学法人山梨大学が実施した。この結果、実車モデルに対して定性的に概ね妥当な結果が得られ、大規模計算資源を用いることで、計算ターンアラウンドタイムを大幅に短縮化できることが確かめられた。

(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。

令和元年度は、以下の項目について、開発されたキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による効果の推定とポスト「京」を利用した場合のアプリケーションの性能の推定を実施し、成果創出フェーズにつながるデータを取得した。これまでに、「富岳」で流体解析コード FrontFlow/blue (FFB) の 100 倍高速化(ノード性能比)が達成できる見込みを得ており、また、FFB に対する圧縮性流れ解析機能の実装、および、Lattice Boltzmann 法 (LBM) によるプロトタイププログラム (FFX) の開発を実施した。令和元年度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 高速化技術を統合した流れソルバーの開発と性能評価に関しては、「富岳」共用前評価環境による性能評価を実施した。この結果、24,576 ノードまでスケールすることを確認した。
 - a)-2 複数ベクトル計算技術活用に関する研究開発に関しては、IDR マトリックスソルバーにおける多ベクトル同時計算機能の実装を実施した。この結果、最大で単体性能 1.4 倍の見込みを得

た。

b) 大規模流体解析における収束性改善のための乱流解析手法の研究開発

b)-1 圧縮性ソルバーによるターボ機械の性能予測精度の検証に関しては、圧力ベース圧縮性ソルバーの実装および検証を実施した。この結果、圧力ベース圧縮性ソルバーをターボ機械内部流れに適用できる目途を得た。

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 LBM プロトタイプアプリケーションによる空力騒音の予測精度の検証に関しては、国立大学法人九州大学が、マルチレベルキューブ計算機能の検証および乱流予測精度の検証を実施した。この結果、有限要素ベースの FFB と同等の乱流予測精度を確認し、プロトタイプを完成させた。

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 ターボ機械内部流れ解析への LES 壁面モデル適用に関しては、FFB に実装されたサブ課題 D で開発した壁面モデルを船体まわり流れ解析に適用し、プロペラを含めて船体抵抗の予測を実施した。この結果、壁面モデルを用いた LES (Wall-Modeled LES) により、船体抵抗の定量予測の目途を立てることができた。

(サブ課題 D) 航空機的设计・運用革新を実現するコア技術の研究開発

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

令和元年度は、以下の項目について、開発されたキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による効果の推定とポスト「京」を利用した場合のアプリケーションの性能の推定を実施し、成果創出フェーズにつながるデータを取得した。これまでに、実機複雑形状を対象にした、階層型等間隔直交構造格子生成を達成して、格子の自動生成および大規模解析が実施できていることを確認し、そして、新たな壁面モデルの開発により、高速バフエット、低速失速の再現に成功した。令和元年度に実施した内容に

関して以下に記す。

a) 高速・高精度乱流解析技術の研究開発

a)-1 直交格子ベース基盤ソルバーのポスト「京」向け高速化に関しては、理研シミュレータによる高速化チューニングと「富岳」共用前評価環境による性能予測を、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構が実施した。

a)-2 直交格子ソルバーにおける LES (Large Eddy Simulation) 壁面モデルの開発と検証に関しては、物体非適合直交格子に対する壁面モデルの実装手法の開発を、国立大学法人東北大学が実施した。この結果、壁面に適切な滑り速度を与えるとともに、せん断応力バランスを考慮した渦粘性の修正を行う手法を開発・提案し、平板乱流境界層解析において従来の物体適合格子と同様の対数則速度分布が得られることを実証した。

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 Wall-resolved LES 参照データベース構築と LES 壁面モデルの予測精度検証に関しては、複数の迎角・レイノルズ数における Wall-resolved LES および 壁面モデル LES とそのデータ解析を、国立大学法人東北大学が実施した。この結果、高速バフエット解析・低速失速解析ともに、壁面モデル LES が平均圧力分布や乱流統計量などについて Wall-resolved LES と同等の予測精度を持つことを実証した。さらに設計上重要となるレイノルズ数効果についても、壁面モデル LES で過去の文献等と比較して、定性的に一致した傾向が予測できることを確認した。

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と計算規模・精度の見積もりに関しては、小型航空機を対象とした非線形機体運動シミュレータの構築と計算規模・精度の見積もりを、学校法人東京理科大学が実施した。この結果、機体運動を 3 つのパラメータで規定し全 330 ケースの計算を用いて構築した飛行力学データベースと Kriging 法を用いた応答曲面によるデータベース補間を機体運動解析と組み合わせることで非線形機体運動シミュレータを実現した。また小型航空機を用いた飛行試験データと比較し良好な結果が得られた。その際、計算規模・精度を決める要因である流体計算の精度と DB 構築のサンプル点数に関する知見を得た。

(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 μm 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。

令和元年度は、以下の項目について、開発されたキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による効果の推定とポスト「京」を利用した場合のアプリケーションの性能の推定を実施し、成果創出フェーズにつながるデータを取得した。これまでに、材料構成則を整備、熱構造一体型連成手法の構築、そして実際の複雑な入熱条件を模擬するために溶接金属部メッシュの出現を段階的に切り替える機能などを開発してきた。これらの要素技術をもとに、実証例題への適用を進めた。実証例題の適用に際しては、主に並列反復法ソルバーの大規模実問題への適用と性能評価、非線形問題を安定・高速に進展させるためのアルゴリズム開発、プリポストの機能拡充が本プロジェクトの柱となった。これらの成果を総合することで、ターゲットとした 2 つの実証例題について施工条件・溶接工程に沿った現象の再現が可能であること、その結果として得られる変形、溶接金属部における応力・塑性ひずみ分布、永久変形量などが評価可能であることを確認した。令和元年度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ターゲット問題への適用と並列性能評価に関しては、「京」を利用することで、接触を含む数億自由度規模の実問題に対し、本プロジェクトで開発する陽的自由度消去による前処理付き反復解法の適用を実施した。この結果、直接法では解けない規模の問題が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機能改善と並列性能最適化に関しては、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、MPC 処理のリファイナ対応を整備する中で、既存の領域分割処理の最適化と MPC 条件処理にあたる陽的自由度消去アルゴリズムの改良を実施した。この結果、MPC 条件を含むメッシュモデルでもリファインおよび陽的自由度消去による反復法の適用が可能となった。
- c) 全体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、複雑な溶接工程に沿って溶接金属部メッシュが段階的に出現する等、より現実的な入熱条件が模擬できるような機能拡張を行った上で、2 つの実証例題(超大型望遠鏡架台部のアーク溶接工程、ジブクライミングクレーンマストの要素試験モデルにおけるアーク溶接工程)への適用を進めた。その中で直面した既存の解析アルゴリズムの不安定性や収束性をについて検討し改善することで、非線形問題に対するアルゴリズムの安定化・高速化を実施した。この結果、2 つの実証例題について、その施工条件・溶接工程に沿った現象の再現が可能であり、その結果として得られる変形、溶接金属部における応力・塑性ひずみ分布、永久変形量などが評価可能であることを確認した。
- d) プリポストによるプレス成形から溶接まで一連の工程の解析・動作検証に関しては、複雑かつ複数の溶接線部の抽出機能や入熱条件設定、接触ペアの抽出機能、複数段階の解析を想定した機能拡充を実施した。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形状モデルに対する入熱設定などが対応可能となった。

(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)熱と接触変形の強連成解析シミュレータである。

令和元年度は、以下の項目について、開発されたキラーアプリケーションの「京」レベルの計算機による効果の推定とポスト「京」を利用した場合のアプリケーションの性能の推定を実施し、成果創出フェーズにつながるデータを取得した。これまでに、高精度の熱可塑 CFRP 成形シミュレーションが可能なミクロスケール熱可塑成形シミュレータ、およびプリプレグシート単位での直交異方性連続体マクロスケール材料モデルの構築によるマクロスケール熱可塑成形シミュレータを完成し、さらにミクロスケールブリーディングシミュレーション手法を構築した。以上の研究開発により、実部品のマルチスケール熱可塑 CFRP 成形シミュレーションが実施可能となった。令和元年度に実施した内容に関して以下に記す。

- a) 「京」クラスコンピュータにおけるジェットエンジン部品を対象とした熱可塑成形シミュレーションの実施に関しては、Structural Guide Vane(SGV)のマクロスケール熱間プレス成形シミュレーションを実施した。この結果、「京」レベル計算機では 1,700 万自由度規模モデルまで解析可能であり、ポスト「京」を利用した場合プリプレグ層レベルを精緻に解像可能な 91 億自由度規模モデルまで解析可能であることを推定した。
- b) 実成形品との照合によるジェットエンジン部品を対象としたシミュレーション結果の検証に関しては、SGV に関するミクロスケールブリーディングシミュレーションを実施した。この結果、繊維周りの残留応力を詳細に算出することにより、層レベルの知見に加えて繊維レベルの新たな知見が得られる見通しを立てることができた。

(ii) プロジェクトの総合的推進

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

2) 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構『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」(平成26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。更に平成29年12月には再生可能エネルギー・水素等関係閣僚会議にて「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」(平成28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令和2年160箇所、令和7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。

平成20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、平成26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。平成25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、KHKTD5202(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]

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，疲労寿命設計線図を用いた疲労設計，累積損傷則の適用を可能とし，実容器疲労試験費用および試験時間の削減を図ると共に使用寿命の延長を図る。具体的には以下の2つのサブテーマを実施する。

- 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
- ②複合圧力容器の技術基準の整備に向けた技術開発

令和元年度の具体的な研究開発内容および成果は以下の通りである。

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)

最適疲労曲線の構築を目的にタイプ3複合圧力容器に使用される JIS H 4080(アルミニウム合金継目無管)から試験片採取を行い，引張試験と疲労試験を実施した。各試験において以下の2点を見出した。

- ・引張試験では引張強さ異方性があること
- ・疲労試験では， $N < 10^7$ 回の領域において明瞭な疲労限度が無いこと

平均応力補正方法の検討については圧縮平均応力条件下での疲労試験を行う予定である。

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評価するため，CFRP 疲労試験片に使用したエポキシ樹脂(2種類:FW(フィラメントワインディング)用，プリプレグ用)について軸荷重疲労試験を

実施し、応力比 0.1 の疲労試験データを取得した。応力比の高い条件について疲労試験を実施する予定である。

(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調べるため繊維角度 0° の CFRP 材料(2 種類:蓄圧器用炭素繊維/FW 用エポキシ樹脂, 炭素繊維/プリプレグ用エポキシ樹脂)について軸荷重試験疲労試験を実施した。疲労試験を中断し残存強度を確認した。繊維角度 45° および 90° の CFRP 材料について疲労試験を実施する予定である。

(3) ミクロスケール有限要素シミュレーション

炭素繊維と樹脂に生じる応力を詳細に評価するために、炭素繊維と樹脂を分けて解像するミクロスケールモデルを作成し、有限要素シミュレーションを実施した。昨年度検討したマイクロモデル作成方法にしたがい、一方向強化 CFRP 試験片の樹脂の応力評価を行った。炭素繊維は直交異方性弾性材料、樹脂は等方弾性材料を割り当て、変位の周期境界条件を付与して計算を行った。これらミクロスケール有限要素シミュレーションから推定した応力場から、繊維方向と荷重方向が一致する試験片については樹脂の引張方向ひずみで CFRP 試験片の疲労寿命予測を適切に行えるであろうことを示した。

①-3 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

寸法を定めた円筒試験体ライナーにフープ層 1 層、ヘリカル層 1 層を施し仮に作成した試験体を用いて破裂試験と圧力サイクル試験を実施した。その結果、鏡部で漏洩したためライナーの寸法および CFRP 層厚さを検討し直した。胴部での漏洩を期待できる試験体を設計できたが、圧力サイクル

試験の最大圧力を 90 MPa ではなく 60 MPa 程度とすることでタイプ 3 複合圧力容器蓄圧器同等の応力サイクル状態が実現できることを確認した。新たな設計の試験体について破裂試験を行い、圧力サイクル試験を開始した。

①-4 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

タイプ 3 複合圧力容器蓄圧器の疲労強度を、ライナーでのき裂発生寿命とき裂進展寿命に区分して予測方法を検討することとした。自緊処理が疲労強度に与える影響は、き裂進展寿命に主に現れるとの仮定の下、き裂進展寿命の予測方法を検討した。ASME BPVC Section VIII Division 3 の方法でき裂進展速度を予測すると実蓄圧器の圧力サイクル試験で観測されたストライエーション間隔から得られたき裂進展速度より大きな値を予測することとなった。き裂先端の応力解析からき裂進展に有効な圧力範囲を求めることで予測の精度を向上できることを示した。

(2) CFRP 材料の設計疲労曲線作成手法の開発

樹脂単体軸荷重試験片を用いた疲労試験結果とミクロスケール有限要素シミュレーションの解析結果を用いて、CFRP 材料の疲労寿命設計線図を作成する手法について検討した。炭素繊維中心軸を結ぶ線分を法線とする面に関する垂直応力である Interfacial Normal Stress (INS) を評価の指標とすることで、樹脂単体の疲労試験結果から CFRP 材料の疲労試験結果を推定することとした。荷重方向と繊維方向が一致する一方向強化 CFRP 試験片については、INS ではなく荷重方向の最大ひずみで疲労試験結果を適切に推定できることを示した。一致しない場合は INS によるものが有効であると予想する。

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) フラップ複合圧力容器の技術基準の整備(JPEC)

フ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 KHKS0225 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]

自動車用圧縮水素容器の安全性を保持し、コスト削減ならびに量産性向上などもあわせて成立させるためには、容器および周辺機器に使用される鉄鋼材料に関して、高压水素中の材料特性と使用条件を正確に把握した上で、供用期間中に十分な信頼性が確保できる基準を設定可能な合理的材料試験法の確立と国際基準調和・国際標準化が極めて重要である。そのためには高压水素中の材料特性検証結果に基づいた合理的でかつ安全性を確保した鋼種を限定しない材料評価方法を提案し、GTR フェーズ2の審議を通して国際標準化活動を進める必要がある。

本年度は国際合意に向けて顕在化している課題について対応策を作成し、他事業で実施する国内インフラ整備に関わる項目との連携もしつつ、国内合意を得た評価方法案を基に、国際的な合意に向けてSAEの材料専門家会議にて議論した。さらに各国の専門家間で合意した内容に基づいて高压水素中における材料の水素適合性評価方法案を作成して、令和元年11月のGTR13 フェーズ2 IWG会議で提案し、その内容について議論を進めた。

[詳 細]

昨年度に引き続いて国内 HFCV 基準検討委員会関係者間、SAE 材料専門家会議、GTR フェーズ 2 IWG 会議等にて自動車搭載用高压水素部品の水素適合性評価方法について議論し、試験法案の修正を進めた。今まで主としてオーステナイト系ステンレス鋼で得られたデータを基に議論を進めてきたが、対象材料をオーステナイト系ステンレス鋼から全ての金属材料に拡大したことによって、いくつかの矛盾が生じるようになった。そこで SSRT 試験の評価基準の見直しを行い、判定基準を水素中において降伏強度の低下しないことだけに限定し、試験片あるいは試験装置等に起因するばらつきを考慮して、水素中の降伏強度が同一温度において大気中にて求められた降伏強度の 80%を超えることとした。疲労試験については従来の評価基準どおり、引張強度の三分の一の応力にて所定回数(切欠き試験片: 105 回, 平滑試験片: 2×105 回)で破断しないこととした。

水素適合性試験の最終的な形として、アメリカなど海外の主張する切欠き疲労試験 (Option 1) と、日本が主張する SSRT 試験 + 平滑疲労試験を併記した試験方法 (Option 2) を並列し、どちらか一方の試験でパスすれば合格とすることで合意した。Option 1 では SSRT 試験は課さず、切欠き疲労試験のみで評価する。一方 Option 2 ではまず SSRT 試験で評価した後、基準をクリアした材料を平滑疲労試験で評価する。

試験条件に関しては、SSRT 試験、疲労試験ともそれぞれ試験データに基づいた最も厳しい条件のみに限定することとした。疲労試験は室温試験における疲労限度力が低温試験による値よりも低くなることから、切欠き試験片、平滑試験片とも室温 ($293 \pm 5\text{K}$) とした。一方 SSRT 試験ではオーステナイト系ステンレス鋼の試験データに基づいて、高圧水素中において伸び等の劣化度が低温試験の方が室温試験より大きいことから、低温 ($228 \pm 5\text{K}$) 条件とした。その他の試験条件は従来どおりで変更はなかった。

なお本試験方法議論のベースになったのはオーステナイト系ステンレス鋼を中心とした試験データであるので、全ての材料に対象を拡大することによって、今後本試験方法だけでは評価しきれない材料が出てくることも懸念される。そこで SAE J2579 Appendix B の中に材料選択のためのガイドライン表を設け、材料選択の助けになるようにした。また本試験方法に従って行われた試験データの一覧表を作成し、新たなデータもそのフォーマットに従って追記できるようにした。

また Rationale に関しては、試験法案に書ききれない詳細な説明等を付け加える目的で、以下の内容につきデータおよびその説明文を追記した。

① SSRT 試験結果で合格のデータ (SUS304)、および不合格のデータ (SUS630)

→ SSRT 試験は降伏応力を超えた後も延性が求められることを示す

② SSRT 試験結果で水素中と大気中の降伏応力値の比較データ

→ 従来の試験データから 20% の範囲で誤差が生じることを示す

③ 平滑疲労データ

→ オーステナイト系ステンレス鋼のニーポイントが 2×10^5 以下であることを示す

→ 低温の疲労限度力が室温より高いことを示す

→ 疲労限付近の応力において 0.01Hz ~ 1Hz の間で周波数の影響がないことを示す

今後改定した Rationale 案を GTR13 IWG 会議に提出し、議論を進める予定である。

(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」 (以下、「富岳」) 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 倍の実効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 つの各重点課題から 9 本の「ターゲットアプリケーション」が選定され、「富岳」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た(コ・デザイン)。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、「富岳」の利用に向けて抜本的な高速化が実施された。令和元年度は、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「富岳」において、上述のように、ターゲットアプリケーション(FFB)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、計算機の挙動をアセンブラー言語レベルで忠実に再現できるシミュレータも利用し、「富岳」における実効性能の高精度に評価した。さらに、株式会社富士通の協力を得て、最適化された主要なカーネルを実装したフルアプリ(FFB Version 49.0)を開発し、現在、「富岳」実機(共用前評価環境 III)を用いて、性能評価とさらなる最適化を実施している。また、重点課題⑧における FFB 以外の、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の機関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 FFB のコ・デザインの成果の展開を図ることにより、これらのアプリケーションの実効性能も大幅に向上させた。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「富岳」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、1 本のカーネルに対しては計算のループ構成を抜本的に変更することにより高速化を図った。その結果、「富岳」において、「京」の計算ノード性能の 20 倍以上の高速化を実現するとともに、「富岳」の 2 万 7 千ノード(100 コア)を用いた並列ベンチマーク計算を実施し、全系を用いた場合、「京」の 40 倍以上の高速化を実現できる目途が得られている。FFB ではさらに、演算器の利用効率(前述の Flops per Byte)を向上させるように、非圧縮性流れの解析で主要な計算部分となる圧力ポアソン方程式に対するマトリックスソルバー(IDR 法: Induced Dimension Reduction method)の改良を進め、現在、性能評価を進めている。また、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。平成 21 年度冬学期に試験的に導入し、平成 22 年度から夏学期に移行して本格始動させ、令和元年度現在 11 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、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), 平野敏行,
西村勝彦

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;(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.
- ・高橋英男, “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.21, No.5, 2019 年 9 月.
- ・第 9 回 情報システム教育コンテスト (ISECON2016) については, 以下を参照:
<http://miyagawa.si.aoyama.ac.jp/wiki/isecon2016>.

(4) 広報活動

1) シンポジウム・ワークショップ・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5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（開催中止）

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、スパコン「富岳」(ポスト「京」)時代のものづくりシミュレーションについて議論する。(開催中止のため、予稿集を作成し、参加申込者に配布した。)

開催日: 令和2年3月16日(月)10:00-17:25

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,
日本流体力学会(50音順)

資料作成: 予稿集 126 頁

○プログラム

10:00-10:15 開会の挨拶

岸 利治

東京大学生産技術研究所 所長

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

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

10:45-11:20 (サブ課題 A) 設計を革新する多目的設計探査・高速計算技術の研究開発

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

平岡 武宜

マツダ株式会社技術研究所 アシスタントマネージャー

II. 次世代 CFD ソルバー開発戦略

- 11:20-11:55 (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
大島 宗彦 日産自動車株式会社先行車両性能開発部
エキスパートリーダー
- 13:10-13:45 (サブ課題 C)準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの研究開発
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
渡邊 啓悦 株式会社荏原製作所風水力機械カンパニー 技術開発部長
宮澤 真史 株式会社本田技術研究所先進技術研究所 研究員
- 13:45-14:20 (サブ課題 D)航空機的设计・運用革新を実現するコア技術の研究開発
高木 亮治 宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 准教授
杉浦 貴明 三菱航空機株式会社技術本部機体設計部 主席技師

III. 次世代材料・構造ソルバー開発戦略

- 14:20-14:55 (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
柴原 正和 大阪府立大学大学院工学研究科 准教授
- 14:55-15:30 (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
森田 直樹 筑波大学システム情報系 助教

IV. パネルディスカッション

- 15:50-17:20 ポスト「京」重点課題で得られた成果の利活用について
モデレータ
吉村 忍 東京大学 副学長・大学院工学系研究科教授
パネラー
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
大島 宗彦 日産自動車株式会社先行車両性能開発部
エキスパートリーダー
渡邊 啓悦 株式会社荏原製作所風水力機械カンパニー 技術開発部長
宮川 淳一 名古屋大学大学院工学研究科 特任准教授
高野 直樹 慶應義塾大学理工学部 教授
- 17:20-17:25 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 35 回生研 TSFD シンポジウム（開催中止）

「乱流シミュレーションと流れの設計 ―数値計算による熱流体現象の理解、予測、制御―」

乱流数値シミュレーション研究者の意見交換の場として、様々な研究分野からご参加を得てきた「生研 TSFD (Turbulence Simulation and Flow Design) シンポジウム」(旧「生研 NST シンポジウム」)は本年度で 35 回目となり、乱流シミュレーションの研究全般に加えて、特に熱流体現象の数値計算についての 15 件の講演を行い、乱流シミュレーションと流れの設計について意見交換する。(開催中止のため、講演資料のみを公開した。)

開催日: 令和 2 年 3 月 12 日(木) 9:00-17:50

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

○プログラム

9:00-12:00 セッション 1:乱流基礎 司会 加藤 千幸(東京大学)

Budget analysis of dissimilarity between turbulent heat and momentum transfer in wall turbulence

Arjun J. KAITHAKKAL (東京大学)

低波数モードの壁面吹き出し・吸い込みによる壁乱流抵抗低減のための最適制御

伊藤 宗嵩(東京大学)

気泡混入による壁面まさつ抵抗低減のための数値的研究

大島 伸行(北海道大学)

入口に局所乱れから発達する円管内乱流境界層に関する DNS 研究

服部 博文(名古屋工業大学)

SGS 応力輸送方程式型モデルによる平面乱流噴流の LES

松山 新吾(宇宙航空研究開発機構)

様々なスケール相似モデルを用いた安定化混合 SGS モデルの検証

稲垣 和寛(東京大学)

13:00-15:30 セッション 2:応用 1 司会 半場 藤弘(東京大学)

Shape Optimization Problem considering Snapshot POD

中澤 嵩(大阪大学)

乱流スポットによる効率的熱輸送状態の発現

福留 功二(東京理科大学)

縦渦から放射される空力騒音の数値解析

尾川 茂(呉高等専門学校)

乱れを含む流れの中に置かれた翼から発生する空力音に関する研究

小林 典彰(東京大学)

片持ち平板を有するキャビティ流れの音響共鳴を伴う自励振動

横山 博史(豊橋技術科学大学)

15:50-17:20 セッション3:応用2 司会 北澤 大輔(東京大学)

数値気象モデルを用いた風車配列境界層の計算

中尾 圭佑(電力中央研究所)

遠心ポンプ内部流れの LES 解析による非定常軸スラストの予測

山出 吉伸(みずほ情報総研・東京大学)

建物の自然風による片側換気一周期的渦離脱と「ポンプ式の通風」

仲 懷玉(東京大学)

データ駆動型代理モデルによる患者個別 1D/0D 血流シミュレーションの不確かさ評価

尹 彰永(東京大学)

b) ワークショップ

ポスト「京」重点課題⑧・重点課題⑥ 第3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「富岳」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、成果の効率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、「今後の HPC とデータ科学・AI との関連について」に焦点をあて議論した。

開催日: 令和元年9月19日(木) 10:00-17:10

場 所: 東京大学生産技術研究所内 An 棟 4 階セミナー室 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: 95 名

資料作成: HPC の現状セッション予稿集 53 頁,

今後のデータ科学・AI との関連セッション予稿集 41 頁

○プログラム

●A. HPC の現状 セッション

(司会 吉川 暢宏 東京大学生産技術研究所 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

- 10:05-10:30 スパコン「富岳」時代の HPC とデータ科学
加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 センター長・教授
- 10:30-10:55 FFB の高速化
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
- 10:55-11:20 FFVHC-ACE の高速化
高木 亮治 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 准教授
- 11:20-11:45 FFR-REVOCAP-ADVENTURE 並列双方向連成解析の高速化
吉村 忍 東京大学大学院工学系研究科 教授
- 11:45-12:10 SOFC 電極解析の高速化
大西 順也 東京大学生産技術研究所 特任助教

●B. 今後のデータ科学・AI との関連 セッション

(司会 大西 順也 東京大学生産技術研究所 特任助教)

- 13:30-14:10 機械学習による SiC 結晶成長プロセスの最適化と大口径化の試み
宇治原 徹 名古屋大学未来材料・システム研究所 教授
- 14:10-14:50 空力問題における不確かさの定量的評価のためのデータ科学的アプローチ
下山 幸治 東北大学流体科学研究所 准教授
- 14:50-15:30 マルチエージェント交通シミュレーションとディープラーニングの連携活用
内田 英明 東京大学大学院工学系研究科 助教
- (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)
- 15:45-16:25 乱流を機械学習: 粘弾性流体乱流の代理モデルと乱流物質輸送の拡散源推定
塚原 隆裕 東京理科大学理工学部 准教授
- 16:25-17:05 大域的最適化手法と機械学習を組み合わせた核融合プラズマ温度分布予測
本多 充 量子科学技術研究開発機構核融合エネルギー部門 上席研究員
- 17:05-17:10 閉会挨拶
吉村 忍 東京大学大学院工学系研究科 教授

c) 研究会

LES 研究会

さまざまな分野の研究者が集まり LES のモデルや計算法などの情報交換を行う場として、平成 20 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 55 回 LES 研究会

開催日: 令和元年 5 月 14 日(火)14:00-17:00

場 所: 東京大学生産技術研究所 As 棟 3 階 小セミナー室 5 (As309)

「乱流モデルによる H 型流路内対向流の温度分布に関する数値解析」

斎藤 寛之 公益財団法人鉄道総合技術研究所

「大規模竜巻発生装置における竜巻状渦の乱流特性の把握」

服部 康男, 江口 譲, 中尾 圭佑

一般財団法人電力中央研究所

第 56 回 LES 研究会

開催日: 令和元年 7 月 12 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)

「分割型移流項と近似リーマン解法を組み合わせた圧縮性流れの陰的 LES」

芳賀 臣紀 宇宙航空研究開発機構

「複雑形状における渦構造の同定手法について」

中村 優佑 広島大学

第 57 回 LES 研究会

開催日: 令和元年 9 月 17 日(火)14:00-17:00

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

「High-Re flows past a square cylinder: spanwise resolution effects and emerging flow features」

Yong Cao Tokyo Institute of Technology

「乱流熱対流場における複雑伝熱面の多自由度形状最適化: アルゴリズム構築と実証」

亀谷 幸憲 東京大学生産技術研究所

第 58 回 LES 研究会

開催日: 令和元年 11 月 8 日(金)14:00-17:00

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

「MSSG を用いた建物・樹冠解像 LES による暑熱環境解析」

松田 景吾 国立研究開発法人海洋研究開発機構

「LES を用いた単体建物モデル周辺気流における瞬時最大風速の予測と評価に関して」

菊本 英紀 東京大学生産技術研究所

第 59 回 LES 研究会

開催日: 令和 2 年 1 月 14 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)

「実走行環境における自動車の空力特性について」

中島 卓司 広島大学

「スケール相似項を用いた安定化 SGS モデルにおける物理効果の検討」
稲垣 和寛 東京大学生産技術研究所

d) セミナー・講習会

第 12 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: 令和元年 5 月 24 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: 12 名

第 13 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: 令和 2 年 2 月 21 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 5

主 催: 東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター

参加者数: 13 名

e) 共催・後援・その他

第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会

開催日: 令和元年 11 月 1 日(金)10:00~17:40

場 所: THE GRAND HALL

主 催: 一般財団法人高度情報科学技術研究機構

HPCI フォーラム“「京」時代の成果から、「富岳」への期待”(開催中止)

開催日: 令和 2 年 3 月 4 日(水)

場 所: ステーションコンファレンス東京

主 催: 一般社団法人高度情報科学技術研究機構

国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター

KOBE HPC サマースクール(初級) スーパーコンピュータで並列計算の基礎を学ぼう!

開催日: 令和元年 8 月 25 日(日)~8 月 29 日(木)

場 所: 理化学研究所計算科学研究センター 講堂, セミナー室

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

国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター

KOBE HPC スプリングスクールー並列計算をさらに勉強したい方にー（開催中止）

開催日： 令和2年3月9日(月)～3月11日(水)
場 所： 兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科 実習室2(312)
神戸大学計算科学教育センター 208 セミナー室
主 催： 神戸大学計算科学教育センター

The 2nd R-CCS International Symposium（開催中止）

開催日： 令和2年2月17日(月)～18日(火)
場 所： ニチイ学館大会議室
主 催： 国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター

The 4th RIKEN R-CCS HPC Youth Workshop

開催日： 令和2年2月18日(火)～2月20日(木)
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： 国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター

スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー2019

開催日： 令和元年9月9日(月) 11:00～16:30
場 所： ザ マーカスクエア神戸 5階 ザ ボールルーム(ホテルクラウンパレス神戸 内)
主 催： 公益財団法人計算科学振興財団

第6回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム ― 物質構造の階層性とフォノン物性の理解 ―

開催日： 令和元年9月17日(火) 9:30～17:00
場 所： 東京・秋葉原 UDX 4階 NEXT-1
主 催： 公益財団法人高輝度光科学研究センター, 一般財団法人総合科学研究機構,
一般財団法人高度情報科学技術研究機構

第11回 HPC ものづくりワークショップ

開催日： 令和元年5月22日(水) 13:30～17:30
場 所： 東京大学生産技術研究所 中セミナー室3
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12回 HPC ものづくりワークショップ

開催日： 令和2年2月4日(火) 13:30～17:00

場 所： 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 3
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 53 回 FrontISTR 研究会

開催日： 令和元年 5 月 24 日(金)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 3 号館 32 講義室
主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

FrontISTR ハンズオン(第 54 回 FrontISTR 研究会)

開催日： 令和元年 6 月 7 日(金)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 3 号館 32 講義室
主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

第 55 回 FrontISTR 研究会

開催日： 令和元年 7 月 5 日(金)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 3 号館 32 講義室
主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

第 56 回 FrontISTR 研究会

開催日： 令和元年 8 月 30 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 1 回 FrontISTR シンポジウム

開催日： 令和元年 10 月 18 日(金)
場 所： 東京大学生産技術研究所 An 棟 4F 中セミナー室 (An401/402)
主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

FrontISTR 講習会 ITO を用いたハンズオン

開催日： 令和元年 12 月 3 日(火)
場 所： 九州大学伊都キャンパス 情報基盤研究開発センター 2 階多目的教室
主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

第 57 回 FrontISTR 研究会

開催日： 令和元年 12 月 10 日(火)
場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 85 講義室
主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

第 58 回 FrontISTR 研究会

開催日： 令和 2 年 1 月 24 日(金)

場 所： 東京大学本郷キャンパス工学部 8 号館 85 講義室

主 催： FrontISTR 研究会 (FrontISTR Commons)

The Computational Science Alliance of the University of Tokyo

4th International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS2019)

東京大学計算科学アライアンス 第 4 回計算科学の研究と教育に関するシンポジウム(RECS2019)

開催日： 令和元年 10 月 2 日 (水)

場 所： 東京大学本郷キャンパス 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 2019

開催日： 令和元年 12 月 11 日

場 所： 学術総合センター (竹橋) 2F 一橋大学 一橋講堂 中会議場

主 催： 国立研究開発法人物質・材料研究機構

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 2019

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： 令和元年 9 月 5 日 (木)～6 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： 令和元年 11 月 9 日 (土)

場 所： 理化学研究所 計算科学研究センター

第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会

～スーパーコンピュータ「富岳」の胎動、計算科学、AI の融合に向けて～

研究開発したアプリケーションソフトウェアを紹介するポスターの展示を行った。

開催日： 令和元年 11 月 1 日 (金)

場 所： THE GRAND HALL (品川)

SC19

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: 令和元年 11 月 18 日(月)～22 日(金)

場 所: 米国 コロラド州デンバー

3) ニュースレターの発行

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

今年度は Vol. 29, Vol. 30 を発行した.

(1) Vol. 29

発 行 日: 令和元年 5 月

発行部数: 800 部

内容: 1 面	巻頭言「令和時代のものづくりに貢献するシミュレーション技術の研究開発を推進」
2 面－3 面	第 4 回ポスト「京」重点課題⑧シンポジウム開催報告
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. 30

発 行 日: 令和 2 年 1 月

発行部数: 700 部

内容: 1 面	巻頭言 「スパコン「富岳」時代に向けたシミュレーション技術の研究開発を強力に推進」
2 面	ポスト「京」重点課題⑧・重点課題⑥「第 3 回 HPCI ものづくり統合ワークショップ」開催報告
3 面	国際会議 SC19(デンバー)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

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) に関して、プログラムの心臓部である 4 つのカーネルの徹底したプロファイリングと高速化を実施するとともに、機能強化を実施した。高速化に関しては、次期フラッグシップ計算機「富岳」において、136 GFLOPS という「京」の 27 倍のノード性能を達成した。また、27,000 ノード(100 万コア)を超える並列計算を実施し、「富岳」全系を用いた場合、「京」と比較して 50 倍以上の高速な計算が可能であることを実証した。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、自動車のような複雑な形状の物体まわりの流れ解析を実用化するために、計算格子を完全に自動で生成することを可能な、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 FFX を開発した。FFX を正方キャビティ流れやチャネル乱流の解析に適用し、FFB と同等、あるいは、それ以上の解析精度を有することを実証した。また、実車の空力解析に関してテスト計算を実施した。さらに、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の定量的な予測が可能であることを実証した。

(2) 基本的な流れ場の数値計算や風洞実験に関する基礎研究

翼に流入する流れに変動があると、翼の揚力が大きく変動したり、翼から発生する騒音が大幅に増大したりすることが知られているが、特に、騒音が増大する理由に関してはいくつかの仮説はあるものの解明は進んでいなかった。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。また、ファンや飛行機の翼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。さらに、ポンプ吸い込み水槽において発生する渦に関して、渦の起源、発生メカニズム、およびその動的挙動を完全に解明した。これらの成果はいずれも論文に掲載されている。

(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压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が連携して実施した。この連携研究の成果として、形式が異なるいくつかのファンに対して、定量的な予測を実現するための基準を明確にした。また、ボックスファンの動翼形状の設計最適化計算を試験的に実施し、本格的な実施に向けた課題を明確にした。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato, Takahide Nagahara, Jun Matsui: Suction Vortices in a Pump Sump—Their Origin, Formation, and Dynamics, Journal of Fluids Engineering, The American Society of Mechanical Engineers, MARCH 2020, Vol. 142 / 031110-1, Manuscript ID: FE-19-1687.

和文論文

- 1) 山出吉伸, 加藤千幸, 長原孝英, 松井 純: ポンプ吸込水槽における吸込渦発生メカニズム(第一報), 日本機械学会論文集, 2019 年 85 巻 875 号, DOI:<https://doi.org/10.1299/transjsme.19-00072>.
- 2) 山出吉伸, 加藤千幸, 長原孝英, 松井 純: ポンプ吸込水槽に発生する水中渦の流れ構造, 日本機械学会論文集, 2019 年 85 巻 878 号, DOI:<https://doi.org/10.1299/transjsme.19-00294>.
- 3) 小林典彰, 鈴木康方, 加藤千幸: 乱れを含む流れの中に置かれた翼から発生する空力音に関する研究(第1報: 翼が一様な乱れの影響を受ける場合), 日本機械学会論文集 2020 年 86 巻 881 号, DOI:<https://doi.org/10.1299/transjsme.19-00336>.
- 4) 小林典彰, 鈴木康方, 加藤千幸: 乱れを含む流れの中に置かれた翼から発生する空力音に関する

研究(第2報:翼が円柱後流の影響を受ける場合), 日本機械学会論文集 2020 年 86 巻 885 号(掲載予定(論文№19-00455)).

国際会議予稿集

- 1) Taku Iwase, Daiwa Sato, Hideshi Obara, Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato: Prediction of Aerodynamic Noise for Centrifugal Fan of Air-conditioner by Tetra-prism grids, ASME - JSME - KSME Joint Fluids Engineering Conference 2019, Hyatt Regency, 2019.7.28 – 8.1, San Francisco, CA, USA.
- 2) Romain Pruniercs, Chisachi Kato: Flow Field and Perofmanccs Analysis of a Ccntrifugal Pump During Unstable Operating Conditions, ASME - JSME - KSME Joint Fluids Engineering Conference 2019, Hyatt Regency, 2019.7.28 – 8.1, San Francisco, CA, USA.
- 3) Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato, akahide Nagahara, Jun Matsui: Large Eddy Simulation of a Submerged Vortex in a Simplified Computational Model, ASME - JSME - KSME Joint Fluids Engineering Conference 2019, Hyatt Regency, 2019.7.28 – 8.1, San Francisco, CA, USA.
- 4) Shigeyuki Tomimatsu, Chisachi Kato: Consideration of CFD Analysis Accuracy of Box Fan, ASME - JSME - KSME Joint Fluids Engineering Conference 2019, Hyatt Regency, 2019.7.28 – 8.1, San Francisco, CA, USA.

国際会議アブストラクト

- 1) Chisachi Kato: Applications of Very Large Scale Fluid-Flow Computations to Industrial Problems, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2019, 2019.7.28-8.31, Hyatt Regency, San Francisco, CA.
- 2) Chisachi Kato: Applications of Very Large Scale Fluid-Flow Computations to Industrial Problems, 26th National Computational Fluid Dynamics Conference, Keelung Evergreen Laurel Hotel, 2019.8.12-13, Keelung, Taipei, Taiwan.

学会講演論文

- 1) 鈴木康方, 亀山琢磨, 池山克行, 加藤千幸: 翼の遠方後流と乱れの長さスケールの計測, 第 24 回動力エネルギー技術シンポジウム, 2019.6.19, 東大生研.
- 2) Tatsuya Mizumoto, Yasumasa Suzuki and Chisachi Kato: Numerical Prediction of Flow Field and Turbulence Length Scale in Far Wake of an Airfoil by Using the Large Eddy Simulation, The 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, 2019, 2019.9.3-7, Tokyo University of Science.
- 3) 渡邊雄一郎, 加藤千幸: 迎え角変動がある翼端渦挙動と発生する空力騒音に関する研究, 日本機械学会第 97 期流体工学部門講演会, 2019.11-7-8, ホテルアソシア豊橋.
- 4) 白藤拓, 鈴木康方, 加藤千幸: ボックスファンの内部流れ非圧縮性 LES 解析と放射音の響解析, 日本機械学会第 97 期流体工学部門講演会, 2019.11-7-8, ホテルアソシア豊橋.
- 5) 山出吉伸, 渡邊啓悦, 加藤千幸: 単段遠心ポンプ内部流れの LES 解析, 日本機械学会第 97 期

流体工学部門講演会, 2019.11-7-8, ホテルアソシア豊橋.

- 6) 三木悠也, 加藤千幸: 平板乱流境界層の数値解析を用いた LES 壁面モデルの検討, 日本機械学会第 97 期流体工学部門講演会, 2019.11-7-8, ホテルアソシア豊橋.
- 7) 加藤千幸: 「富岳」を活用したものづくり(次世代ものづくり), 日本機械学会第 97 期流体工学部門講演会, 2019.11-7-8, ホテルアソシア豊橋.
- 8) 煎谷晴輝, 山出吉伸, 飯田明由, 加藤千幸: タンデム配置された風車の空力特性, 日本機械学会第 97 期流体工学部門講演会, 2019.11-7-8, ホテルアソシア豊橋.

総説・解説

- 1) 加藤千幸: ターボポンプ分科会とポンプの研究, 「ターボ機械」2019 年 5 月号特集, ターボ機械協会.
- 2) 小林典彰, 鈴木康方, 加藤千幸: 乱れを含む流れの中に置かれた翼まわりの流れと発生する空力音に関する研究, 生産研究 72 巻 1 号(2020).
- 3) 山出吉伸, 加藤千幸, 渡邊啓悦: 有限要素法流れ解析ソルバーにおける陰的オーバーセット手法, 生産研究 72 巻 1 号(2020).

(2) 研究プロジェクト

民間等との共同研究等

- 1) 「実環境風下における空力特性解析技術の開発」
- 2) 「CFD による船舶性能推定精度向上に関する研究」
- 3) 「大規模圧縮性流体解析ソルバの高精度化と製品内非定常現象の分析手法の開発」
- 4) 「一般社団法人ターボ機械協会 ターボ機械 HPC 実用化分科会」

受託研究

① 公的資金

- 1) 文部科学省 平成 31 年度(2019 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「富岳」に代表される人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。設計変数が膨大となる容器の最適設計問題を解決するためディープラーニングを活用した手法を検討している。

(3) CFRP 成形プロセスシミュレーターの研究開発

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 の成形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、成形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) Hongzhou Zhai, Qi Wu, Ke Xiong, Nobuhiro Yoshikawa, Tong Sun and Kenneth T. V. Grattan: Investigation of the viscoelastic effect on optical-fiber sensing and its solution for 3D-printed sensor packages, June 2019, Applied Optics, Vol. 58, No. 16, pp.4306-4314. <https://doi.org/10.1364/AO.58.004306>.
- 2) Yoshinori Shiihara, Shoki Tanaka and Nobuhiro Yoshikawa: Fast quasi-implicit NOSB peridynamic simulation based on FIRE algorithm, June 2019, Bulletin of the JSME, Mechanical Engineering Journal, Vol.6, No.3, Paper No.18-00363, [DOI: 10.1299/mej.18-00363] .
- 3) Yoshihiko Hangai, Hayato Matsushita, Ryosuke Suzuki, Shinji Koyama, Kenji Amagai, Ryohei Nagahiro, Takao Utsunomiya, Masaaki Matsubara and Nobuhiro Yoshikawa: Refoaming of deformed aluminum foam by precursor foaming process, July 2019, Journal of Porous Materials, Vol.26, No.4, pp. 1149-1155.
- 4) Yoshihiko Hangai, Masataka Ohashi, Ryohei Nagahiro, Kenji Amagai, Takao Utsunomiya and Nobuhiro Yoshikawa: Press Forming of Aluminum Foam during Foaming of Precursor, November 2019, Materials Transactions, Vol.60, No.11, pp.2464-2469. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-M2019192>.
- 5) Yoshihiko Hangai, Keisuke Takada, Hidetoshi Fujii, Yasuhiro Aoki, Yuma Aihara, Ryohei Nagahiro, Kenji Amagai, Takao Utsunomiya and Nobuhiro Yoshikawa: Foaming of A1050 aluminum precursor by generated frictional heat during friction stir processing of steel plate, January 2020, The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, Vol.106, No.7, pp.3131-3137. <https://doi.org/10.1007/s00170-019-04834-4>.
- 6) Qi Wu, Hongzhou Zhai, Nobuhiro Yoshikawa and Tomotaka Ogasawara: Localization simulation of a representative volume element with prescribed displacement boundary for investigating the thermal residual stresses of composite forming, March 2020, Composite Structures, Vol.235, 111723. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2019.111723>.

和文論文

- 1) 半谷禎彦, 小林龍聖, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏: アルミニウムリサイクル材を原料としたポラスアルミニウム充填アルミニウムパイプのfriction stir back extrusionによる作製, 2019年8月, 日本金属学会誌, 第83巻, 第8号, pp.288-291. <https://doi.org/10.2320/jinstmet.J2019013>.
- 2) 竹本真一郎, 吉川暢宏: メゾスケールブリーミング解析によるCFRP 製圧力容器の強度評価, 2020年2月, 日本機械学会論文集, Vol.86, No.883. [DOI: 10.1299/transjsme.19-00338].

国際会議アブストラクト

- 1) Kuroki, H., Hosaka, T., Takeda, T., Hojo, M., Nishizawa, T., Yoshikawa, N.: Development of Hollow Composite Fan Blade, November 2019, International Gas Turbine Congress (IGTC) 2019 Tokyo,

学会講演論文

- 1) 安藤瑞季, 半谷禎彦, 天谷賢児, 永廣怜平, 吉川暢宏:異なる気孔形態からなる傾斜機能ポーラスアルミニウムの圧縮特性, 2019年5月, 軽金属学会第136回春期大会講演概要集, pp.325-326.
- 2) 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:複数プリカーサの発泡過程におけるプレス加工を利用したポーラスアルミニウムの接合, 2019年5月, 軽金属学会第136回春期大会講演概要集, pp.329-330.
- 3) 大橋政孝, 半谷禎彦, 永廣怜平, 天谷賢児, 鈴木良祐, 宇都宮登雄, 吉川暢宏:ADC12を母材としたポーラスアルミニウムの発泡過程における接合法の検討, 2019年5月, 日本鋳造工学会 第173回全国講演大会 講演概要集, p.16.
- 4) 安藤瑞季, 半谷禎彦, 天谷賢児, 永廣怜平, 鈴木良祐, 吉川暢宏:AC4CHと異種アルミニウム合金を用いた傾斜機能ポーラスアルミニウムの作製, 2019年5月, 日本鋳造工学会 第173回全国講演大会 講演概要集, p.17.
- 5) 美濃耀介, 森田直樹, 吉川暢宏, 佐野尊, 小林拡:ミクロスケールシミュレーションに基づくCFRP材の疲労強度評価法に関する研究, 2019年5月, 計算工学講演会論文集, Vol. 24, B-13-01.
- 6) 吉川暢宏, 針谷耕太, 魚住忠司, 岡崎昌人:多給糸フィラメントワインディングによる複合圧力容器の製造, 2019年9月, [No.19-1]日本機械学会2019年度年次大会講演論文集, J04423.
- 7) 吉川暢宏, 小笠原朋隆, 森田直樹, 呉奇:熱可塑CFRP 材料のマルチスケール成形シミュレーション, 2019年9月, [No.19-19]日本機械学会 第32回計算力学講演会(CMD2019)講演論文集, 253.
- 8) 川戸大輔, 半谷禎彦, 大橋政孝, 永廣怜平, 藤井英俊, 森貞好昭, 青木祥宏, 小倉卓哉, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏:プレス加工によるポーラスアルミニウムの気孔の変形挙動の非破壊観察, 2019年9月, 日本鋳造工学会第174回全国講演大会講演概要集, p.45.
- 9) 永井孝直, 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:発泡中のプレス加工によって作製した傾斜機能ポーラスアルミニウム, 2019年9月, 日本鋳造工学会第174回全国講演大会講演概要集, p.46.
- 10) 山本貴也, 半谷禎彦, 松島慶喜, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏:溶湯発泡法で作製したポーラスアルミニウムへの点群型を用いた形状付与, 2019年10月, 第70回塑性加工連合講演会講演論文集, pp.163-164.
- 11) 大橋政孝, 半谷禎彦, 永廣怜平, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏:プリカーサ発泡中のプレス加工による材料流動を利用したポーラスアルミニウムの接合, 2019年10月, 第70回塑性加工連合講演会講演論文集, pp.167-168.
- 12) 竹田智, 北條正弘, 黒木博史, 穂坂俊彦, 福重進也, 吉川暢宏, 松田哲也, 久保 凱:複合材ファンブレード前縁接着部の構造解析モデリング, 2019年10月, 構造物の安全性および信頼性Vol.9, JCOSSAR2019論文集, pp.201-204.
- 13) 吉川暢宏, 針谷耕太, 魚住忠司, 岡崎昌人:多給糸フィラメントワインディング複合圧力容器の強

- 度評価, 2019年10月, 構造物の安全性および信頼性Vol.9, JCROSSAR2019論文集, pp.263-264.
- 14) キムサンウォン, 吉川暢宏, 小林弘, 佐野尊: タイプⅢ複合容器蓄圧器の疲労強度評価, 2019年10月, 構造物の安全性および信頼性Vol.9, JCROSSAR2019論文集, pp.265-266.
 - 15) 吉川暢宏, 黒木博史, 穂坂俊彦, 福重進也, 竹田智, 北條正弘, 松田哲也, 久保凱: CFRP 積層板の動的剥離強度モデルに関する研究, 2019年10月, 構造物の安全性および信頼性Vol.9, JCROSSAR2019論文集, pp.470-474.
 - 16) キムサンウォン, 吉川暢宏, 小林弘, 林郁孝: タイプⅢ複合容器蓄圧器の疲労き裂解析, 2019年11月, [No.19-301]日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス講演論文集(電子版), OS0601.
 - 17) 人橋政孝, 半谷禎彦, 永廣怜平, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: プリカーサ発泡過程におけるプレス加工を利用したポーラスアルミニウムの接合法の検討, 2019年11月, [No.19-301]日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス講演論文集(電子版), OS1603.
 - 18) 都丸拓海, 半谷禎彦, 宇都宮登雄, 吉川暢宏, 天谷賢児, 永廣怜平: ポーラスアルミニウムに3次元形状付与可能な点群型の開発, 2019年11月, [No.19-301]日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス講演論文集(電子版), OS1604.
 - 19) 今井洋輔, 森田直樹, 吉川暢宏: 短繊維熱可塑CFRPの不確定強度モデルの開発, 2019年11月, [No.19-301]日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス講演論文集(電子版), OS2101.
 - 20) 金子智徳, 西原寅史, 山本拓矢, 吉川暢宏, 青野昌弘: CFRP繊維束交差形状を考慮した高圧水素タンク強度モデル開発, 2019年11月, [No.19-301]日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス講演論文集(電子版), OS2106.
 - 21) 美濃耀介, 森田直樹, 吉川暢宏: 一方向強化CFRP試験片のマイクロ応力に基づく疲労強度評価法に関する研究, 2019年11月, [No.19-301]日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス講演論文集(電子版), OS2107.
 - 22) 安藤瑞季, 半谷禎彦, 天谷賢児, 永廣怜平, 大橋政孝, 吉川暢宏: オープンセルクローズドセル傾斜機能ポーラスアルミニウムへの形状付与, 2019年11月, 軽金属学会第137回秋期大会講演概要, pp.345-3461.
 - 23) 大塚 駿, 半谷禎彦, 永廣怜平, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: プレス加工による発泡直後のポーラスアルミニウムと金属板との接合, 2019年11月, [No.19-332]日本機械学会第27回機械材料・材料加工技術講演会(M&P2019), No.216.
 - 24) 安藤瑞季, 半谷禎彦, 天谷賢児, 永廣怜平, 大橋政孝, 吉川暢宏: オープンセル構造とクローズドセル構造からなる傾斜機能ポーラスアルミニウムのクローズドセル構造へのプレス加工, 2019年11月, [No.19-332]日本機械学会第27回機械材料・材料加工技術講演会(M&P2019), No.405.
 - 25) 諸橋寛海, 半谷禎彦, 藤井英俊, 青木祥宏, 吉川暢宏: 摩擦攪拌接合によるプリカーサと発泡アルミニウムの連続作製法の開発, 2019年11月, [No.19-332]日本機械学会第27回機械材料・材料加工技術講演会(M&P2019), No.514.
 - 26) 吉川暢宏, 小笠原朋隆: CFRP製圧力容器の熱硬化プロセスシミュレーション, 2020年3月, 第11回

日本複合材料会議 JCCM-11講演論文集, 1S-01.

- 27) 金子智徳, 吉川暢宏, 青野昌弘: CFRP削減に向けた高圧水素タンク強度モデル開発の課題,
2020年3月, 第11回 日本複合材料会議 JCCM-11講演論文集, 1S-04.

(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2)
- 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) 鋼製ワイヤー平織りジャケットの力学特性評価
- 6) フレキシブルホースの強度評価に関する研究
- 7) オーステナイト系ステンレス鋼の高圧水素適合性に関する研究

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・エディー・シミュレーション (LES) モデルとレイノルズ平均 (RANS) モデルの改良およびハイブリッド乱流モデルの基礎研究、また複雑流体の一つである電磁流体乱流の物理とモデリングに関する研究を行っている。

乱流シミュレーション技術の進展とコンピューターの進歩に伴い、LES を用いた乱流シミュレーションソフトウェアが開発され、実用問題に適用されつつある。しかし、シミュレーションの基礎となるモデルと計算法についてはまだ課題が残され改良が必要である。例えば高レイノルズ数の壁乱流の LES を行うには壁面の取扱いが大きな問題であり、LES と RANS モデル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。数値計算を用いて非等方解像 SGS 乱流モデルにおける非等方項の物理的役割を考察した。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。さらに電磁流体乱流の輸送に対する強い圧縮性効果について理論的に考察した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) F. Hamba, K. Kanamoto: Analysis of destruction term in transport equation for turbulent energy dissipation rate, April 2019, Theoretical and Computational Fluid Dynamics, Vol.33, pp.181-196.
- 2) K. Kuroha, S. Nambu, S. Hattori, Y. Kitagawa, K. Niimura, Y. Mizuno, F. Hamba, K. Ishii: Chiral supramolecular nanoarchitectures from macroscopic mechanical rotations: Effects on enantioselective aggregation behavior of phthalocyanines, October 2019, Angewandte Chemie International Edition, Vol.58, pp.18484-18459.
- 3) F. Widmer, J. Büchner, N. Yokoi: Analysis of fast turbulent reconnection with self-consistent determination of turbulence timescale, October 2019, Physics of Plasmas, Vol.26, pp.102112 1-9.
- 4) K. Inagaki, T. Ariki, F. Hamba: Higher-order realizable algebraic Reynolds stress modeling based on the square root tensor, November 2019, Physical Review Fluids, Vol.4, pp.114601 1-18.
- 5) F. Hamba: Inverse energy cascade and vortical structure in the near-wall region of turbulent channel flow, November 2019, Physical Review Fluids, Vol.4, pp.114609 1-18.

国際会議予稿集

- 1) F. Hamba: Energy cascade and vortex structure in turbulent channel flow, July 2019, Proceedings of 11th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, 2A-1.
- 2) K. Inagaki, T. Ariki, F. Hamba: A realizable turbulence model for the Reynolds stress based on the square root tensor, September 2019, Proceedings of 17th European Turbulence Conference, 151.
- 3) N. Yokoi, T. Takiwaki, Y. Masada: Turbulence transport modelling in core-collapsed supernovae explosion, September 2019, Proceedings of 17th European Turbulence Conference, 484.
- 4) K. Inagaki, F. Hamba: Modeling the energy flux enhanced in rotating inhomogeneous turbulence, December 2019, Progress in Turbulence VIII, Springer Proceedings in Physics 226, pp.139-144.
- 5) N. Yokoi: Multiple-scale analysis of the strong compressibility effects on transport in magnetohydrodynamic turbulence, December 2019, Progress in Turbulence VIII, Springer Proceedings in Physics 226, pp.241-246.
- 6) N. Yokoi: Strong compressibility effects on velocity and magnetic fluctuation generation in magnetohydrodynamic turbulence, December 2019, American Geophysical Society Fall Meeting 2019, NG41A-06.

学会講演論文

- 1) 半場藤弘: チャネル乱流対数層のエネルギー逆カスケードと渦構造, 2019 年 6 月, 第 65 回理論応用力学講演会, C000026.
- 2) 稲垣和寛, 小林宏充: サブグリッドスケール乱流モデルにおける生成散逸非平衡効果の検討, 2019 年 9 月, 日本流体力学会年会 2019 講演論文集, 乱流(1)-3.
- 3) 稲垣和寛, 小林宏充: サブグリッドスケール乱流モデルにおける生成散逸非平衡効果の検討, 2019 年 12 月, ながれ: 日本流体力学会誌, Vol. 38, pp. 403-406.
- 4) 半場藤弘: チャネル乱流におけるエネルギー逆カスケードと衝突流, 2019 年 12 月, 第 33 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, A06-3.
- 5) 稲垣和寛, 小林宏充: 非等方解像 SGS 乱流モデルにおける非等方項の物理的役割, 2019 年 12 月, 第 33 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, A07-3.
- 6) 稲垣和寛: 一様ヘリカル乱流の統計解析, 2020 年 3 月, 日本物理学会第 75 回年次大会概要集, 17pK45-8.

(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) 予測医療に向けた不確かさ解析を取り入れた 1D-0D 全身循環血流解析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。

シミュレーションを予測に用いる際に、医用画像および数値モデルに含まれる不確かさを定量化し、さらにそれらの不確かさがシミュレーションのプロセスでどのように伝搬し、結果に影響を与えるかを検証することが重要である。そこで、ニューラルネットワークを組み入れて代理モデルの開発を行っている。

(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。

また、3 次元モデリングが全体のシミュレーションの中で一番時間がかかるため、深層学習を採り入れて領域分割を効果的、かつ効率的に行うことができるよう研究を進めている。

(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) N. H. Johari, N. B. Wood, Z. Cheng, R. Torii, M. Oishi, M. Oshima and X. Y. Xu: "Disturbed Flow in a Stenosed Carotid Artery Bifurcation: Comparison of RANS-Based Transitional Model and LES with Experimental Measurements", International Journal of Applied Mechanics, Vol. 11, No. 04, 1950032-1-21, (2019).
- 2) C. Yuhn, K. Hoshina, K. Miyahara, M. Oshima: "Computational simulation of flow-induced arterial remodeling of the pancreaticoduodenal arcade associated with celiac artery stenosis", Journal of Biomechanics, Vol. 92, pp. 146-154, (2019).
- 3) K. Miyahara, K. Hoshina, J. Nitta, M. Kimura, S. Yamamoto, M. Oshima: "Hemodynamic Simulation of Pancreaticoduodenal Artery Aneurysm Formation Using an Electronic Circuit Model and a Case Series Analysis.", Ann Vasc Dis., Vol.12(2), pp.176-181 (2019).
- 4) Kiyoshi Takagi, Ryota Watahiki, Toru Machida, Kenji Onouchi, Kazuyoshi Kato, Marie Oshima: "Reliability and Inter-observer Variability of Evans' Index and Disproportionately Enlarged Subarachnoid Space Hydrocephalus as Diagnostic Criteria for Idiopathic Normal Pressure Hydrocephalus", Asian Journal of Neurosurgery, Vol. 15(1), pp.107-112 (2020).

和文論文

- 1) 夏目拓也, 大石正道, 向井信彦, 大島まり: "界面張力モデルによる脳動脈瘤用塞栓材液滴形成の比較", 日本バイオレオロジー学会誌, Vol. 33(2), p. 36 (2019).

- 2) T. Natsume, M. Oishi, M. Oshima, N. Mukai:「粒子法による液滴の滴下挙動再現と定量的評価」, 芸術科学会論文誌, Vol. 18, No. 3, pp. 106-113, (2019).
- 3) 大島まり, F. Liang:「マルチスケール血流シミュレーションを用いた血行力学的刺激の予測」, 生体の科学 70 (4), pp. 339-343, 医学書院 (2019).

国際会議予稿集

- 1) T. Natsume, M. Oishi, N. Mukai, M. Oshima, "Droplet Simulation for Cerebral Aneurysm Embolization", IWAIT-IFMIA2019 (2019).
- 2) M. Oshima, M. Oshi: "Development of measurement techniques using micro-PIV and DIIM for microfluidic applications", The 1st Workshop on Microscaled Flow, Heat Transfer and Rheology of Complex Fluids (2019).
- 3) T. Natsume, M. Oishi, M. Oshima, N. Mukai: "Particle based Droplet Simulation in Liquid-Liquid Two-phase Flow", 23rd International Congress on Modelling and Simulation (2019).
- 4) X. Yu, C. Yuhn, M. Kobayashi, S. Yamada, M. Oshima: "Investigation of the effects of 0D stenosis model and inflow rate on prediction accuracy of cerebral hyperperfusion syndrome", CMBE 2019 Proceedings, Vol. 1, pp. 36-39 (2019).
- 5) Y. Chen, M. Kobayashi, M. Oshima: "Development of an Interface for Computer-assigned Surgery Using 1D-0D Blood Flow Simulation", CMBE 2019 Proceedings, Vol. 1, pp. 473-476 (2019).
- 6) C. Yuhn, F. Liang, S. Takagi, M. Oshima: "Impact of clinical data uncertainties on the patient-specific prediction of hemodynamics following carotid artery surgery", CMBE 2019 Proceedings, Vol. 1, pp. 497-500 (2019).
- 7) M. Oshima, "Patient-specific hemodynamic simulations based on a reduced-order 1D-0D model for predictive medical care of cardiovascular diseases", ASME-JSME-KSME Joint Fluid Engineering Conference 2019 (2019) (Invited Lecture).
- 8) M. Oshima: "Challenges towards clinical applications: Computational hemodynamics for cerebral circulation", AJK FLUIDS 2019 (2019) (Invited Lecture).

学会講演論文

- 1) 「EV×未来社会創造ワークショップの実践報告」, 日本 STEM 教育学会 第 2 回年次大会 一般研究発表予稿集 (2019).
- 2) 高山利夫, 松浦壮平, ユンチョンヤン, 大島まり, 花田和正, 大片慎也, 佐野允哉, 宮原和洋, 福原菜摘, 伊佐治寿彦, 赤井隆文, 保科克行:「当科における内頸動脈狭窄に対する治療戦略:コンピュータシミュレーションを用いた脳血流予備能の検討」, 第 60 回日本脈管学会総会 (2019).
- 3) 宮原和洋, 鈴木裕二, 花田和正, 松浦壮平, 佐野允哉, 福原菜摘, 白須拓郎, 赤井隆文, 伊佐治寿彦, 高山利夫, 大島まり, 保科克行:「腹部内臓動脈瘤と 3 次元的血管形状の関連の検討」, 第 60 回日本脈管学会総会 (2019).
- 4) 大島まり:「医工連携で切り拓く予測医療」, SSH サイエンスフォーラム講演会 (2019).

- 5) 三木智祐, 大島まり:「薬剤内包ミセル投与法評価に向けた腹部大動脈瘤壁における物質輸送解析」, 日本機械学会 第 32 回バイオエンジニアリング講演会 (2019).
- 6) 尹彰永, 大島まり:「低次元モデルを用いた脳循環の解析における一次元ネットワーク形状の影響の考察」, 日本機械学会 第 32 回バイオエンジニアリング講演会 (2019).
- 7) 大石正道, 木下晴之, 藤井輝夫, 大島まり:「マイクロ T 字ジャンクションにおける液滴生成機構の実験的考察」, 日本機械学会第 97 期流体工学部門講演会 (2019).
- 8) 大島まり:「脳動脈瘤に関するデータ駆動と血流シミュレーションによるアプローチ」, 第 35 回NPO 法人日本脳神経血管内治療学会学術総会 (2019).
- 9) 大島まり:「血液の流れを診る」, 令和元年度まほろば・けいはんな SSH サイエンスフェスティバル (2019).
- 10) 大島まり:「ジェンダー・地域格差に配慮した STEAM 才能教育カリキュラムに関する学際的研究 (3)ー地域特性に応じた科学才能教育と企業等との連携による加速化・継続化ー」, 日本科学教育学会第 43 回年会 (2019).
- 11) 大島まり:「医用画像と低次元モデルの融合による全身循環系シミュレーション」, MSC Software 2019 Users Conference (2019).
- 12) 大島まり:「データと数値シミュレーションによる血行動態分析」, JSPS 第 1 回「食による生体恒常性維持の指標となる未病マーカーの探索戦略」に関する先導的研究開発委員会 (2019).

(2)研究プロジェクト

民間等との共同研究

- 1) 「鉄道ワークショップのための教育コンテンツの開発」
- 2) 「飛行機ワークショップのための教育コンテンツの開発」

受託研究

①公的資金

- 1) 日本学術振興会「複合マイクロ流体回路の流れ特性とメカニズムの解明」
- 2) 科学技術振興機構「次世代人材育成事業 グローバルサイエンスキャンパス」

佐藤文俊研究室 計算生体分子科学

佐藤文俊研究室では、タンパク質を中心にナノサイズの巨大分子の機能を理論的に研究している。「ナノサイズ分子の電子構造を正統な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、分子全体の正準(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などを明らかにしてきた。ProteinDF/QCLO により、分子の化学的性質を表す分子軌道が得られるため、量子効果を直接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) 第3世代密度汎関数法の研究開発

本研究室では密度汎関数法の全計算過程を解析的に計算実行する第3世代密度汎関数法アルゴリズムを開発、これを ProteinDF に実装を施している。毎年度、性能をアップデートしており、今年度は特に、コレスキーベクトル保存形式の改良、grid-free 法の評価を行った。来年度も引き続き実施する。

(2) QCLO の改良

任意のフラグメントが定義でき、フレキシブルな計算分子構造拡張シナリオが利用できる自動計算プログラム QCLO 法の新コードを整備した。今年度は特に、ジスルフィド結合周辺の精度向上シナリオについて研究した。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) タンパク質正準分子軌道計算における相互作用解析の研究

タンパク質設計などにおいて、アミノ酸残基間の相互作用を計算化学によって見積もることは大変有用である。正準分子軌道に基づく方法では、これらの計算は通常高コストとなるため、本研究では相互作用解析手法に Energy density analysis (EDA) 法を採用した。EDA 法では Mulliken population と同様の計算方法で、エネルギー行列要素からサブユニットに属するエネルギーとその構成要素が得られる。交換相関エネルギーの行列要素計算法として grid-free 法を採用することで、密度汎関数法で EDA 法に基づく相互作用解析法が実行できるようになった。小規模タンパク質で相互作用計算と評価を行った。

(5) インスリン様成長因子1とインスリンの電子状態研究

インスリン様成長因子1 (IGF-1) はインスリンとよく似た構造を持つタンパク質分子であり、細胞の成長、分化などを促進する。一方、インスリンは血糖値を下げる作用をもつタンパク質である。すなわち、IGF-1 とインスリンは似た構造を持っているものの、それぞれ異なる受容体に結合している。それには、これら2つの分子のどのような差異を利用しているかを推測するために、IGF-1 とインスリンの電子構造

の比較を行った。その結果、これらの中で静電ポテンシャルの分布ならびに電子密度分布の特徴的な部位を確認することができた。

(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、丸工大小迫准教授、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, April 2019, J. Phys. Chem. B, Vol. 123, pp. 2925–2929.
- 2) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Recent progress of protein canonical molecular orbital calculation by the third generation density functional method, 2019, AIP Conference Proceedings 2186, 030009.

国際会議アブストラクト

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Recent Progress of Protein Canonical Molecular Orbital Calculation by the Third Generation Density Functional Method, 2019.5.1, ICCMSE 2019.
- 2) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Interaction energy analysis based on canonical Kohn-Sham molecular orbital calculation of protein, 2019.7.22, DFT 2019.
- 3) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Study of interaction energy analysis of proteins by canonical Kohn-Sham molecular orbital calculation, 2020.2.17, The 60th Sanibel Symposium.

学会講演論文

- 1) 平野敏行, 佐藤文俊: タンパク質カノニカル分子軌道計算における相互作用解析の研究, 2019.9.17, 第 13 回分子科学討論会, 名古屋大学.
- 2) 佐々木光, 平野敏行, 佐藤文俊: インスリン様成長因子1 の電子状態の研究, 2019.9.20, 第 13 回分子科学討論会, 名古屋大学.
- 3) 平野敏行, 佐藤文俊: Analyzing intramolecular interaction using canonical Kohn-Sham molecular orbital calculation in protein, 2019.10.22, CBI 学会 2019 年大会, タワーホール船堀.
- 4) 佐藤文俊: 分子軌道計算を用いたタンパク質の設計, 2019.11.8, LOOK 東大 “CO2 削減技術デー”, 東京大学.

総説・解説・紀要

- 1) 江口晴輝, 平野敏行, 佐藤文俊: タンパク質分子軌道の棄却法による雲状可視化法の研究, 2019.7, 生産研究, Vol. 71, No. 4, pp. 769-773.
- 2) 高橋英男: 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」, 2019.9, スーパーコンピューティングニュース, Vol.21, No.5.

(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。令和元年度においては以下の研究を行ってきた。

(1) ガラスの高分解能その場高温観察と振動状態解析

ガラス材料の結合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、そのランダムな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、ガラスの相分離減少を高温その場観察するとともに、その振動構造解析を行った。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て、像一枚からガラスの組成と厚さを定量的に決定する手法を開発した。また、セノクロメーターを備えた新たな走査透過型電子顕微鏡を用いた解析を行い、高分解能 EELS 計測を行った。得られた EELS スペクトルのゼロロス近傍に現れる振動スペクトルを第一原理計算や分子動力学計算を組み合わせて解析し、ガラス中の酸素の局所環境を明らかにすることに成功した。

高い空間分解能により物質の高温挙動や振動状態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。

(2) 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) H. Oda, S. Kiyohara and T. Mizoguchi: Machine learning for structure determination and investigating the structure-property relationships of interfaces, *J. Phys.: Materials*, 2, 034005-1-8, 2019.
- 2) S. Kiyohara, M. Tsubaki, Kunyen Liao, and T. Mizoguchi: Quantitative estimation of properties from core-loss spectrum via neural network, *J. Phys.: Materials*, 2, 024003-1-9, 2019.
- 3) Y. Sugimori, T. Miyata, H. Hashiguchi, E. Okunishi, and T. Mizoguchi: Atomic-scale investigation of the heterogeneous structure and ionic distribution in an ionic liquid using scanning transmission electron microscopy, *RSC Advances*, 9, 10520-10527, 2019.
- 4) W. Olovsson, T. Mizoguchi, M. Magnuson, S. Kontur, O. Hellman, I. Tanaka, and C. Draxl: Vibrational Effects in X-ray Absorption Spectra of 2D Layered Materials, *J. Phys. Chem. C* 123, 9688–9692, 2019.

和文論文

- 1) 溝口照康:機械学習を活用した結晶界面研究, 応用物理学会誌, 88, 745-749, 2019.
- 2) 溝口照康, 清原慎:機械学習を活用したスペクトル解析, *Isotope News*, 764, 20-23, 2019.
- 3) 溝口照康, 清原慎:EELSと第一原理計算によるエキシトン, 原子振動および van derWaals 力の解析, セラミックス, 54, 456-463, 2019.
- 4) 清原慎, 溝口照康:機械学習を活用した界面構造探索とスペクトル解析, 人工知能, 34巻 3号, 345-350, 2019.
- 5) 溝口照康, 宮田智衆, 清原慎, 中澤克昭, 杉森悠貴:走査透過型電子顕微鏡法によるガラス, イオン液体, および気体の構造解析, セラミックス, 54, 66-71, 2019.
- 6) 清原慎, 溝口照康:機械学習を用いた物質界面構造の高速決定, 表面と真空, 62, 130-135, 2019.
- 7) 溝口照康, 清原慎, 大谷龍剣:機械学習を利用した結晶界面構造決定と構造機能相関, 触媒, 62, 1, 35-41, 2020.
- 8) 大谷龍剣, 清原慎, 溝口照康:結晶界面インフォマティクス:構造決定と構造機能相関, まてりあ, 59, 134-138, 2020.

国際会議アブストラクト

- 1) R. Otani, S. Kiyohara, Y. Sugimori, and T. Mizoguchi, "Machine Learning for Structure Property Relationship of Crystalline Interface", 6th International symposium on advanced microscopy and theoretical calculations (AMTC6), Nagoya, Aichi, June 14th, 2019.
- 2) S. Kiyohara and T. Mizoguchi, "Machine learning for Core-loss spectrum: Automated interpretation via both supervised and unsupervised learning", 6th International symposium on advanced microscopy and theoretical calculations (AMTC6), Nagoya, Aichi, June 14th, 2019.

- 3) K. Liao, A. Masuno, H. Inoue, and T. Mizoguchi, "Probing Nanoscale Phase Separation in Aluminosilicate Glass with Electron Energy Loss Spectroscopy", 6th International symposium on advanced microscopy and theoretical calculations (AMTC6), Nagoya, Aichi, June 14th, 2019.
- 4) K. Nakazawa and T. Mizoguchi, "In-situ Observation of Spinodal Decomposition Process in Silicate Glass", 6th International symposium on advanced microscopy and theoretical calculations (AMTC6), Nagoya, Aichi, June 14th, 2019.
- 5) T. Miyata and T. Mizoguchi, "Observation of Single Atoms and Nano Structures in Liquid using Scanning Transmission Electron Microscopy", 6th International symposium on advanced microscopy and theoretical calculations (AMTC6), Nagoya, Aichi, June 14th, 2019.
- 6) R. Otani, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi, "Crystalline interface property prediction without the interface structure via machine learning", Tronto University-University of Tokyo workshop, Tronto, Canada, June 27th, 2019.
- 7) R. Otani, S. Kiyohara, K. Shibata, and T. Mizoguchi, "Comprehension of interfacial structure and property relationship via machine learning", Pacific Rim conference on ceramics society (PacRIM2019), Ginowan, Okinawa, Oct.28, 2019.
- 8) Kun-Yen Liao, A. Masuno, H. Inoue, and T. Mizoguchi, "Nanoscale Investigation on Crack-resistant Aluminosilicate Glasses with STEM EELS", Pacific Rim conference on ceramics society (PacRIM2019), Ginowan, Okinawa, Oct.30, 2019.
- 9) Kun-Yen Liao, A. Masuno, H. Inoue, and T. Mizoguchi, "Nanoscale Investigation on Crack-resistant Aluminosilicate Glasses with STEM EELS", National Taiwan University (NTU)-Univeristy of Tokyo (UT) workshop, Hongo, Tokyo, Dec.9, 2019.
- 10) Shin Kiyohara, M. Tsubaki, and T. Mizoguchi, "Data-driven approach for core-loss spectroscopy: Prediction of spectra and Quantification of properties", Materials Research Society (MRS 2019), Boston, USA, Dec 5, 2019.

学会講演論文

- 1) 清原慎, 椿真史, 溝口照康 : 機械学習を用いた ELNES の予測と物性定量化, 日本顕微鏡学会学術講演会, 名古屋国際会議場, 名古屋, June 18, 2019.
- 2) Liao Kunyen, 増野敦信, 井上博之, 溝口照康 : STEM-EELS Analysis on Local Structures of Aluminosilicate Glasses, 日本金属学会 2019 年度秋季大会, 岡山大学, 岡山, 9/18, 2019
- 3) 大谷龍剣, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康 : 構造決定を伴わない粒界物性予測, 日本金属学会 2019 年度秋季大会, 岡山大学, 岡山, 9/18, 2019.
- 4) 中澤克昭, 溝口照康 : 4D-STEM を用いた相分離・結晶化過程のその場観察, 新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019.
- 5) 大谷龍剣, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康 : "完全結晶の原子配列を用いた結晶界面物性の予測", 新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019.

- 6) 鈴木勲輝, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康: 吸着反応の理解に向けた情報科学的手法による表面構造解析, 新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019.
- 7) 菊政翔, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康: 機械学習を利用した ELNES/XANES スペクトル解析, 新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019.
- 8) Liao Kunyen, 増野敦信, 井上博之, 柴田基洋, 溝口照康: Probing Cation Local Coordination and Vibration Modes at Silicate Glass with STEM EELS, 新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019.
- 9) Yaoshu Xie, 大谷龍剣, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康: Database Generation and Machine Learning Application in Grain Boundary Structure and Properties, 新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019.
- 10) 菊政翔, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康: ニューラルネットワークを用いた炭素 K 端 ELNES/XANES からの物性予測, 応用物理学会春季大会, 上智大学, 東京, 3/14, 2020.
- 11) 鈴木勲輝, 柴田基洋, 溝口照康: 機械学習を用いた原子結合及び状態密度の予測, 日本金属学会春季大会, 東工大, 東京, 3/18, 2020.
- 12) Yaoshu Xie, 柴田基洋, 溝口照康: 網羅的粒界構造決定アルゴリズムの開発と Si 非対称粒界構造解析への利用, 日本金属学会春季大会, 東工大, 東京, 3/18, 2020.

(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関連の解明」
- 2) 科研費 基盤(A) 代表, 「原子分解能“振動”計測法の開発と革新的材料創製」
- 3) 科研費 新学術領域(計画班) 代表「情報科学による機能コア計算設計」

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) 実験と数値解析による着衣熱伝達率に関する研究

人の熱的快適性を研究するには、人体と周囲の環境との間の熱交換を理解することが重要である。人体表面の熱交換特性は、対流および放射熱伝達係数を使用して評価できる。近年、サーマルマネキンまたは数値サーマルマネキンを使用して、対流および放射熱伝達係数を計算する実験的および数値的な方法が提案されている。ただし、多くの研究は裸体のマネキンに対して行われ、衣服を着たマネキンの熱伝達係数に焦点を当てた例は非常に少ない。本研究では、着衣状態のマネキンに対してチャンバー実験、風洞実験、並びに数値解析により熱伝達特性の解明を行い、衣服表面上の対流および放射熱伝達係数の同定を行った。

(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。本年は高浮力ガスの拡散に関するCFDと風洞実験結果の比較を行い、その予測精度を検証した。

(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。本年は共同研究先において、建物エネルギーシステムのスケールモデルを作成し、モデル予測制御検証用の基礎的データの収集を行った。

(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，一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．本年は，シミュレーションソフト・モデリカを利用して，本システムをコンピュータ上に再現し，昨年行った実験結果と照合し，シミュレーションの予測精度の確認を行った．

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Doyun Lee, Ryoza Ooka, Shintaro Ikeda, Wonjun Choi: Artificial neural network models of stratified thermal energy storage system and borehole heat exchanger for model predictive control, May 2019, Science and Technology for the Built Environment, 25, pp.534-548.
- 2) Mingzhe Liu, Ryoza Ooka, Wonjun Choi, Shintaro Ikeda: Experimental and numerical investigation of energy saving potential of centralized and decentralized pumping systems, May 2019, Applied Energy, 251, 113359.
- 3) Shan Gao, Ryoza Ooka, Wonseok Oh: Formulation of human body heat transfer coefficient under various ambient temperature, air speed and direction based on experiments and CFD, August 2019, Building and Environment, 160, 106168.
- 4) Wonjun Choi, Ryoza Ooka, Masanori Shukuya: Unsteady-state exergy analysis for heat conduction of homogeneous solids under periodic boundary conditions, August 2019, International Journal of Heat and Mass Transfer, 139, pp.773-799.
- 5) Wonseok Oh, Ryoza Ooka, Junta Nakano, Hideki Kikumoto, Osamu Ogawa: Environmental index for evaluating thermal sensations in a mist spraying environment, August 2019, Building and Environment, 161, 106219.
- 6) Shintaro Ikeda, Ryoza Ooka: Application of differential evolution-based constrained optimization methods to district energy optimization and comparison with dynamic programming, August 2019, Applied Energy, 254, 113670.
- 7) Wonjun Choi, Hideki Kikumoto, Ryoza Ooka: Critical comparison between thermal performance test (TPT) and thermal response test (TRT): Differences in heat transfer process and extractable information, November 2019, Energy Conversion and Management, 199, 111967.

和文論文

- 1) 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(第17報)CFDによるREハウス配管システムの圧力と温度の解析, 2019.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.

- 2) 崔元準, 菊本英紀, 大岡龍三: 風環境評価におけるベイジアンモデリングの実装 (第1報) 日最大平均風速と風向の確率論的モデリング, 2019.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 3) 菊本英紀, 崔元準, 大岡龍三: 風環境評価におけるベイジアンモデリングの実装 (第2報) 風環境指標の確率的評価, 2019.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 4) 稲垣大侑, 大岡龍三, 崔元準, 宿谷昌則: 冬期における様々な太陽エネルギー利用システムのエクセルギー解析 マルチソース&マルチユースヒートポンプと既存システムの比較, 2019.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 5) 郭倩文, 大岡龍三, 呉元錫, 崔元準, 李度胤: 床暖房を用いた環境試験建屋の室内温熱環境に関するシミュレーション, 2019.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 6) 文可, 大岡龍三, 劉明哲, 日野俊之, 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 (第16報) ANNとRNNによるREハウスの冬期集熱運転消費電力の予測性能の比較, 2019.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 7) 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4) ミストを噴霧する屋外環境における皮膚温変化と温熱感覚に関する研究, 2019.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 8) 周琦, 大岡龍三: 深層学習による室内気流予測手法の開発 (第2報) 異なるニューラルネットワークの予測精度の比較, 2019.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 9) 高姍, 大岡龍三, 呉元錫: サーマルマネキンを用いた人体周辺温熱環境の評価に関する研究 風速と風向が着衣人体の対流熱伝達率に与える影響, 2019.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 10) 高姍, 大岡 龍三, 呉元錫: サーマルマネキンを用いた人体周辺温熱環境の評価に関する研究 風速と風向が人体対流熱伝達率に及ぼす影響, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 11) 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5) ANN 予測モデルのハイパーパラメータ設定がMPC最適化計算時間に及ぼす影響, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 12) 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14: 夏期運転試験及び運転性能実測, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 13) 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3) ミスト噴霧システムの制御条件が環境因子と人の感覚に及ぼす影響, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 14) 周琦, 大岡龍三: 深層学習による室内気流予測手法の開発 (その1) 二次元等温流れの再現結果に関する検討, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 15) 崔元準, 菊本英紀, 大岡龍三: 熱性能試験, 熱応答試験データを用いた地中熱交換器の単位熱交換率に関する実験的比較, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 16) 張秉超, 大岡龍三, 菊本英紀: 風環境評価における風速超過確率評価法の改良 その1 建物周

辺における最大風速発生風向の考慮, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.

- 17) 文可, 大岡龍三, 日野俊之, 劉明哲, 崔元準, 池田伸太郎, 李度胤: 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15: 天空熱源ヒートポンプの回帰モデルの予測性能に必要な学習データ数に関する検討, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 18) 大岡龍三, 林超, 菊本英紀, 佐藤大樹, 新井舞子: 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3) 高浮力ガス拡散の風洞実験の概要, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 19) 佐藤大樹, 林超, 大岡龍三, 菊本英紀, 新井舞子: 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4) 排気ガスの吐出速度および風向の影響に関する風洞実験結果, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 20) 稲垣大佑, 大岡龍三, 宿谷昌則, 崔元準: マルチソース&マルチユースヒートポンプと太陽熱温水器の床暖房利用におけるエクセルギー解析, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 21) 郭倩文, 大岡龍三, 呉元錫, 崔元準, 李度胤: 床暖房システムを用いた戸建住宅の快適感に対する断熱性能に関する研究, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 22) 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2 Turbulent channel flowを対象としたベンチマークテスト, 2019.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.

国際会議予稿集

- 1) Wonseok Oh, Ryoza Ooka, Junta Nakano, Hideki Kikumoto, Osamu Ogawa: Validation of thermoregulation human model considering mist wettedness on mist spraying environment, September 2019, IAQVEC 2019.
- 2) Doyun Lee, Ryoza Ooka, Shintaro Ikeda, Wonjun Choi, Younghoon Kwak: Model predictive control of a building energy system including thermal energy storage, September 2019, Building Simulation 2019.
- 3) Daisuke Inagaki, Ryoza Ooka, Masanori Shukuya, Wonjun Choi: Exergy analysis of solar thermal energy utilization for buildings: Comparison between Multiple source & Multiple use Heat Pump (MMHP) and Solar Water Heater (SWH) systems for winter season, January 2020, IAQVEC 2019.

国際会議アブストラクト

- 1) Shan Gao, Ryoza Ooka, Wonseok Oh: Effects of ambient temperature, airspeed, and wind direction on heat transfer coefficient for the human body by means of manikin experiments and CFD analysis, May 2019, Clima 2019.
- 2) Mingzhe Liu, Ryoza Ooka, Ke Wen, Wonjun Choi, Doyun Lee, Shintaro Ikeda, Djafar Palasz: Experimental performance analysis of a multiple-source and multiple-use heat pump system: winter field experiment and heating operation performance evaluation, May 2019, Clima 2019.
- 3) Qianwen Guo, Ryoza Ooka, Wonseok Oh, Wonjun Choi, Doyun Lee: Effect of insulation on indoor thermal comfort in a detached house with a floor heating system, May 2019, Clima 2019.

- 4) Ke Wen, Mingzhe Liu, Ryoza Ooka, Wonjun Choi, Doyun Lee, Shintaro Ikeda, Djafar Palasz: Experimental performance analysis of a multiple-source and multiple-use heat pump system: a predictive ANN model of sky-source heat pump. May 2019, Clima 2019.

学会講演論文

- 1) 林超, 大岡龍三, 菊本英紀, 佐藤大樹, 新井舞子: 単体立方体建物モデル周辺における高浮力ガス拡散の風洞実験, 2019.05, 日本風工学会年次研究発表会.

(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) AIを活用した熱源・空調システムの制御に関する研究
- 2) 屋外ミスト機器における暑さ評価手法の研究
- 3) 高温排気ガスの大気拡散予測手法の開発

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「再生エネルギー熱利用システムの最適運転制御技術の開発」

② 公的資金以外

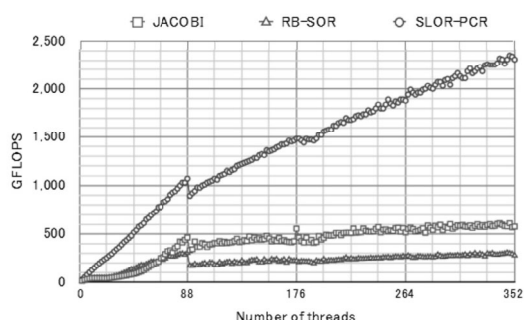
- 1) 風害に関する研究
- 2) 高層建築物による風環境の変化に関する解析

小野謙二研究室 大規模計算機工学

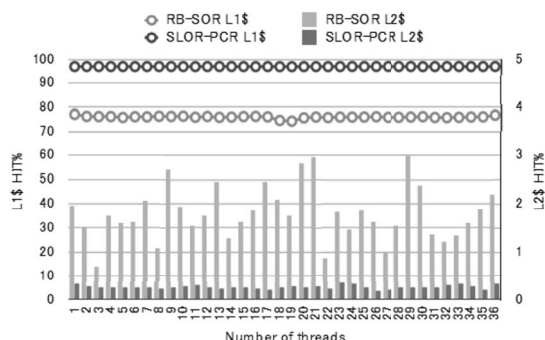
シミュレーションはものづくりを始めとして様々な分野に役立つ技術である。近年は高精度化のため計算規模が大きくなり、スパコンの利用が広まっているが、その性能を引き出すことが難しくなりつつある。例えば、多くのシミュレーションのコア技術である線形方程式の求解であるが、大規模疎行列を係数行列にもつものは、近年のスパコンアーキテクチャでは性能を引き出しにくい問題の一つである。ちょうど、「京」コンピュータがその使命を終え、次の「富岳」に変わる端境期である。「富岳」はメニーコアで低 B/F アーキテクチャである特徴をもつため、その性能を引き出すためにはキャッシュの有効利用を図る必要がある。本年度は、科学技術試験研究事業重点課題⑧に関して、「富岳」向けの大規模疎行列ベクトル積アルゴリズムの開発とその実証にとり組んだ。

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 法の SIMD 向け実装を実施した。三次元の圧力のポアソン方程式を差分法により離散化する。Line SOR 法に倣い、座標軸の一軸方向で三重対角行列を形成し、残りを右辺項に移すと、三重対角行列は効率的な LU 分解により反転できる。その後、残りの二軸方向に反復的に緩和計算を行うと収束解が得られる。ここで問題は LU 分解がそのままでは並列化できない点であるが、Parallel Cyclic Reduction (PCR)法を導入し、並列化する SLOR-PCR 法を提案した。左図は富岳と類似したアーキテクチャをもつ SGI UV300 での性能測定結果である。構成単位である 1 シャーシ内の性能は 88 コアに対して 80 倍という際だったスケラビリティを示している。また、4 シャーシ 352 コアまでスケールするメニーコア向けの実装であることがわかる。この要因は、右図に示すように L1 キャッシュの優れた再利用性にあり、LU 分解の低 B/F 特性が反映されたものになっている。

「富岳」の評価結果は、48 コアの倍精度計算時 792 GFlops であり、理論性能 2.7 TFlops に対して実行性能 29%となる性能が確認できた。提案する SLOR-PCR 法は富岳においても従来の反復法に比べて3倍強の演算速度を達成できる計算方法であることが確認できた。



UV300 のスレッド並列性能



SLOR-PCR 法のキャッシュヒット率

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) T. Kawanabe, J. Nonaka, D. Sakurai, K. Hata, S. Okayama and K. Ono: Showing Ultra-High-Resolution Images in VDA-Based Scalable Displays, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 11792, pp. 116-122, doi: 10.1007/978-3-030-30949-7_13, 2019.
- 2) S. Kimura, T. Sakamoto, T. Sera, H. Yokota, K. Ono, D. J. Doorly, R. C. Schroter and G. Tanaka: Voxel-based modeling of airflow in the human nasal cavity, Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, Vol. 22, No.3, pp. 331-339, doi: 10.1080/10255842.2018.1555584, 2019.
- 3) I. Koga, and K. Ono: Effective Pre-processing of Genetic Programming for Solving Symbolic Regression in Equation Extraction, Communications in Computer and Information Science, Vol.1040, pp. 89-103, 2019.

国際会議予稿集

- 1) T. Kawanabe, J. Nonaka and K. Ono: ChOWDER: A VDA-Based Scalable Display System for Displaying High-Resolution Visualization Results, Poster session presented at International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, Fukuoka, Japan, 2019.
- 2) M. Munekata, G. Kitamura, N. Tsuzaki, A. Tsurumaru, H. Yoshikawa, K. Ono and T. Watanabe: Collecting Performance in a Cyclone Separator with a Hemispherical Head, 14th International Symposium on Experimental Computational Aerothermodynamics of Internal Flows, Gdansk, Poland, 2019.
- 3) M. Iizuka and K. Ono: Investigation of effective methods to improve the convergence of parareal time integration for advection equation, 8th Workshop on Parallel-in-Time Integration, Bielefeld, Germany, 2019.
- 4) R. Furukawa, A. Tsurumaru, K. Terada, M. Munekata, H. Yoshikawa, T. Watanabe and K. Ono: Numerical Study of Air Flow Characteristics in a Compact Cyclone Separator for Fuel Cell Vehicles, International Symposium on Novel and Sustainable Technology, Tainan, Taiwan, 2019.
- 5) K. Ono, T. Kato, S. Ohshima and T. Nanri: Scalable Direct-Iterative Hybrid Solver for Sparse Matrices on Multi-Core and Vector Architectures, International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, Fukuoka, Japan, <https://dl.acm.org/doi/abs/10.1145/3368474.3368484>, 2020.

国際会議アブストラクト

- 1) K. Ono and I. Koga: Effective approach for identifying governing equations from data, The 7th Asia-Pacific Congress on Computational Mechanics, Taipei, Taiwan, 2019.
- 2) M. Iizuka and K. Ono: Effective Methods for Improving the Convergence of Parareal Method for the 1D Advection Equation, The 7th Asia-Pacific Congress on Computational Mechanics, Taipei, Taiwan, 2019.

- 3) A. Tsurumaru, K. Terada, R. Furukawa, M. Munekata, H. Yoshikawa and K. Ono: Numerical Study on Multiphase Flow in a Cyclone Separator for Fuel Cell Vehicles, 7th Asia-Pacific Congress on Computational Mechanics, Taipei, Taiwan, 2019.

著書・訳書

- 1) 小野謙二: データサイエンス時代の科学技術 データをどのように可視化するか? 23 の先端事例がつなぐ計算科学のフロンティア: 計算で物事を理科する予測する. 理化学研究所中村特別研究室 (ed.), 近代科学社, p. 175-186, 2020.

学会講演論文

- 1) 清水崇文, 平井康幸, 木村真也, 世良俊博, 横田秀夫, 小野謙二, 田中学: 嗅動作時における鼻腔内流れのボクセルシミュレーション, バイオエンジニアリング講演会講演論文集, doi: 10.1299/jsmebio.2019.31.1G22, 2019.
- 2) M. Iizuka, K. Ono: 移流問題に対する Parareal 法による時間並列計算の収束性向上手法の評価, 第 24 回計算工学講演会, Saitama, Japan, 2019.
- 3) K. Ono, I. Koga: シミュレーションデータを用いた基礎方程式の推定, 日本応用数理学会 2019 年度年会, Tokyo, Japan, 2019.
- 4) K. Ono, M. Munekata, T. Watanabe: サイクロンセパレータ内における 100 億規模の並列粒子追跡, 日本機械学会 第 32 回計算力学講演会 (CMD2019), Kawagoe, Japan, 2019.
- 5) M. Miyagi, H. Yamamoto, T. Takami, M. Iizuka, K. Ono, K. Nakajima: 地下水流動シミュレーションへの時間並列計算手法の適用, 第 47 回岩盤力学に関するシンポジウム, 2020.

総説・解説

- 1) 小野謙二: モデリングに役立つ数式発見, 計算工学, Vol. 24, No. 4, pp. 3988-3991, 2019.

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、データサイエンスを援用した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) 原子レベルマルチフィジックス解析手法の開発

半導体デバイス、エネルギーデバイス、磁気デバイスなど、様々なデバイス材料の高性能化・構造緻密化が求められる中で、原子レベルのマルチフィジックス現象(原子配置の変化に伴う電子状態変化)を効率よく解析できる手法の開発を行っている。本年度は、化学反応の記述が可能な反応力場開発ツールの整備を進め、固体酸化物形燃料電池電極材料の三相界面における発電反応の原子レベルメカニズムの解明を行った。さらに、ニューラルネットワークモデルを用いた原子構造-電子状態密度マッピングの手法を開発し、ナノレベルのマルチフィジックス現象を古典分子動力学法と同等の計算コストで解析するための枠組みを示した。

(2) ナノチューブの座屈が誘起する物性応答の解析

ナノチューブの座屈変形を利用することにより、小さいひずみ幅で急激な物性変化を起こす新しいナノデバイスの創製が期待できる。本年度は、軸方向圧縮を受けて座屈するカーボンナノチューブのバンドギャップ変化の挙動を分子動力学法および強結合近似法に基づくバンド計算によって求めた。ナノチューブのアスペクト比に従って座屈変形の形状が 3 つに分類され、アスペクト比が小さい場合に現れる座屈モードの際には座屈によるバンドギャップ変化の大きさと座屈後の軸方向応力に良好な相関がみられ、応力によってバンドギャップを制御する新たなナノデバイス創製の可能性が示された。

(3) ヘテロナノ構造を有する金属表面の境界潤滑挙動の解析

鉄鋼表面を微細加工することで摩耗・摩擦特性が改善することが実験で示されているが、その理由は明らかになっておらず、境界潤滑の分子レベルメカニズムの解明が求められている。表面に露出した粒界に潤滑油分子が吸着することでポリマーブラシ構造が形成された結果として低 μ 化が起こるという仮説を検証するため、粗視化分子動力学モデルを用いた潤滑シミュレーションを実施した。シミュレーションにより、表面近傍でのポリマーブラシ構造の形成や境界潤滑状態での油膜のスティック・スリップ挙動など、実験観測による仮説を裏付ける結果が得られた。さらに、粒界への潤滑油分子の吸着力の増大は流体潤滑状態の摩擦係数にはそれほど影響を及ぼさないのに対し、境界潤滑状態で生じると考えられる油膜剥離による固体接触を低減させる効果があることが示された。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) S.-S. Liu, L. C. Saha, A. Iskandarov, T. Ishimoto, T. Yamamoto, Y. Umeno, S. Matsumura and M. Koyama: Atomic structure observations and reaction dynamics simulations on triple phase boundaries in solid-oxide fuel cells, 2019, Communications Chemistry, Vol. 2, 48.
- 2) A. Kubo, J.-M. Albina and Y. Umeno: Construction of master yield stress curves for polycarbonate: a coarse-grained molecular dynamics study, 2019, Polymer, Vol. 177, 84-90.
- 3) Y. Umeno and A. Kubo: Prediction of electronic structure in atomistic model using artificial neural network, 2019, Computational Materials Science, Vol. 168, 164-171.
- 4) I. Lobzenko, Y. Shihara, A. Sakakibara, Y. Uchiyama, Y. Umeno and Y. Todaka: Chemisorption enhancement of single carbon and oxygen atoms near the grain boundary on Fe surface: ab initio study, 2019, Applied Surface Science, Vol. 493, 1042-1047.
- 5) Y. Umeno, M. Sato, M. Sato and H. Shima: Buckling-induced band-gap modulation in zigzag carbon nanotubes, 2019, Physical Review B, Vol. 100, 155116.
- 6) E. Kawai, H. Kakisawa, A. Kubo, N. Yamaguchi, T. Yokoi, T. Akatsu, S. Kitaoka and Y. Umeno: Crack initiation criteria in EBC under thermal stress, 2019, Coatings, Vol. 9, 697.
- 7) J.-M. Albina, A. Kubo, Y. Shihara and Y. Umeno: Coarse-grained molecular dynamics simulations of boundary lubrication on nanostructured metal surfaces, 2020, Tribology Letters, Vol. 68, 49.

和文論文

- 1) 椎原良典, 梅野宜崇, 足立望, 戸高義一: 表層ナノ組織化鋼材における転動疲労試験を模擬した有限要素解析(内部せん断平均応力に及ぼす摩擦係数の影響), 2020, 日本機械学会論文集 Vol. 86, No. 882, p. 19-00270.

国際会議アブストラクト

- 1) Y. Umeno, Ma. Sato, Mo. Sato and H. Shima: Atomistic model simulation of buckling behavior and band gap energy in compressed carbon nanotubes, EMN meeting on carbon nanostructures 2019, 2019.05.13-17, Cardinal Hotel St. Peter Rome, Italy.
- 2) A. Kubo and Y. Umeno: First-principles analysis of deformation and fracture properties of semiconductors, MSMF9: 9th International Conference on Materials Structure & Micromechanics of Fracture, 2019.6.26-28, Brno, Czech Republic.
- 3) Y. Umeno, A. Kubo and J.-M. Albina: Coarse-grained molecular dynamics simulation of deformation and fracture in polycarbonate: Effect of loading mode, strain rate, temperature and molar mass, MSMF9: 9th International Conference on Materials Structure & Micromechanics of Fracture, 2019.6.26-28, Brno, Czech Republic.
- 4) A. Kubo and Y. Umeno: Prediction of electronic density of states in atomistic structure using artificial neural network model, ISAM4-2019: The fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale

Modeling of Mechanics and Multiphysics, 2019.8.5-8, Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Germany.

- 5) Y. Umeno, A. Kubo and J.-M. Albina: Effect of nanostructure in metal surfaces on boundary lubrication: A coarse-grained molecular dynamics study, ISAM4-2019: The fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics, 2019.8.5-8, Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg, Germany.
- 6) E. Kawai, H. Kakisawa, N. Yamaguchi, T. Yokoi, A. Kubo, S. Kitaoka and Y. Umeno: Criteria of interface crack initiation and propagation in environmental barrier coating with columnar layer under thermal stress, Materials Research Meeting 2019, 2019.12.10-14, Yokohama, Japan.

学会講演論文

- 1) 久保淳, 須藤佑太, 梅野宜崇: 摺動する金属表面上の潤滑油膜の粗視化分子動力学解析, 第4回マルチスケール材料力学シンポジウム, 2019年5月24日, 室蘭工業大学, 講演論文集USB.
- 2) 梅野宜崇, 久保淳: 粘弾性体におけるき裂進展速度ジャンプ現象の解明, 第4回マルチスケール材料力学シンポジウム, 2019年5月24日, 室蘭工業大学, 講演論文集USB.
- 3) 久保淳, 梅野宜崇: 電子状態密度評価のためのニューラルネットワークモデルの構築, 第24回計算工学講演会, 2019年5月29日～31日, ソニックシティ(大宮), 講演論文集web.
- 4) 梅野宜崇, 久保淳: ポリカーボネートの変形および破壊の粗視化分子動力学解析: 荷重モード・ひずみ速度・温度・分子量の影響, 第24回計算工学講演会, 2019年5月29日～31日, ソニックシティ(大宮), 講演論文集web.
- 5) 久保淳, 梅野宜崇: ナノ構造化金属表面における境界潤滑の粗視化分子動力学解析, 第23回計算力学講演会, 2019年9月16日～18日, 東洋大学川越キャンパス.
- 6) 浅利孟弘, 上野尊史, 久保淳, 梅野宜崇: Ni-O-H系の反応力場構築とNiO還元反応の分子動力学解析, 第23回計算力学講演会, 2019年9月16日～18日, 東洋大学川越キャンパス.
- 7) 久保淳, 梅野宜崇: ゴムのき裂進展速度ジャンプ機構の検討: 有限要素法および数値モデル解析, M&M2019材料力学カンファレンス, 2019年11月2日～4日, 九州大学伊都キャンパス.
- 8) 鎌田弥成, 小澤健吾, 梅野宜崇, 島弘幸, 佐藤太裕: 構造欠陥がカーボンナノチューブの断面変形性に与える影響, M&M2019材料力学カンファレンス, 2019年11月2日～4日, 九州大学伊都キャンパス.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(B)「座屈が誘起するナノ構造体の巨大物性応答の解明と新奇デバイスの力学設計」
- 2) 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) 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。

2019年度は、最適制御入力に空間的なフィルターを施すことによって、大きな空間スケールを有する制御入力によって壁近傍の微細構造を制御する方法論を構築した。また、伝熱と摩擦の同時制御においては、主流方向の進行波状の吹き出し／吸い込みを与えることによって、非相似伝熱促進が実現できることを示すと共に、最適な進行波の位相速度と波長を明らかにした。また、伝熱面の形状／トポロジー最適化手法を確立し、3D プリンタによる試作を組み合わせることによって、最適化から実証までを飛躍的に加速するフレームワークを構築した。

(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。

2019年度は、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。また、速度場の推定では、壁面情報に基づくチャネル乱流場の推定に取り組み、壁面の時系列データを利用することによって大きなスケールの流体運動の予測が飛躍的に向上することを示した。

(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。

2019 年度は、微小な粒子が分散した溶媒を基板上に塗布した際に、重力方向が逆方向となる逆設置をする際に、粒子が3相界面に集積するコーヒーリング効果が著しく低減することを実験的に示し、そのメカニズムを明らかにした。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Qi Wang, Yosuke Hasegawa and Tamer A. Zaki: Spatial reconstruction of steady scalar sources from remote measurements in turbulent flow, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 870, pp. 316-352 (2019)
Doi: 10.1017/jfm.2019.241.
- 2) Arjun J. Kaithakkal, Yukinori Kametani and Yosuke Hsegawa: Dissimilarity between turbulent heat and momentum transfer induced by a streamwise travelling wave of wall blowing and suction, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 886, A29 (2020), Doi: 10.1017/jfm.2019.1045.
- 3) Junya Onishi, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa and Naoki Shikazono: Topology optimization of electrolyte-electrode interfaces of solid oxide fuel cells based on the adjoint method, *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 166, No. 13, F876-F888 (2019), Doi: 10.1149/2.0031913jes.

和文論文

- 1) 亀谷幸憲, MIRZAPOURSHAFIYI Fatemeh, 中山雅敬, 長谷川洋介: 毛細血管網の分岐形態が微小循環の輸送特性に与える影響, *日本流体力学会誌「ながれ」*, 38巻6号, 411-414 (2019).
- 2) 伊藤宗嵩, 長谷川洋介: 大スケール最適制御入力によるチャネル乱流の抵抗低減, *生産研究* Vol. 72, No.1, pp. 9-13 (2020), Doi: 10.11188/seisankenkyu.72.9.
- 3) 劉竺辰, 長谷川洋介: 時系列壁面計測情報に基づくチャネル乱流場の状態推定, *生産研究*, Vol. 72, No.1, pp. 5-8 (2020), Doi: 10.11188/seisankenkyu.72.5.
- 4) カイタツカラ・アルジュン・ジョン・亀谷幸憲・長谷川洋介: 壁乱流における乱流熱・運動量輸送の非相似性に関する収支解析, *生産研究*, Vol. 72, No.1, pp.15-18 (2020), Doi: 10.11188/seisankenkyu.72.15.

国際会議予稿集

- 1) Yosuke Hasegawa: Adjoint-based olfactory search algorithm in turbulent environments, *International Workshop on Data-driven Modeling and Optimization in Fluid Mechanics*, Karlsruhe Institute of Technology, Sept 16 (2019) (Invited Lecture).
- 2) Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Adjoint-based shape optimization of heat transfer surfaces in turbulent flows with DNS-RANS hybrid approach, *The 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow 2019 (ASCHT2019)*, Tokyo, Sept. 3-7 (2019).
- 3) Yukinori Kametani, Takumi Yuasa, Kei Matsumoto, Takahiro Shoda, Makoto Ishii, Yosuke Hasegawa: Adjoint-based optimization of heat transfer surface in latent heat thermal storage system,

The 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC2019), Maui Island, Dec 13-17 (2019).

- 4) Shun Tamura, Hanzhi Wang, Takahiro Tsukahara, Takayuki Osawa, Yosuke Hasegawa: Experimental study on evaporation process and particle sedimentation in pendant droplets, The 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC2019), Maui Island, Dec 13-17 (2019).
- 5) Toshitaka Itoh, Yosuke Hasegawa: Optimal large-scale control input for drag reduction in turbulent channel flow, The 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC2019), Maui Island, Dec 13-17 (2019).
- 6) Zhuchen Liu, Yosuke Hasegawa: Turbulent flow estimation based on wall measurements by using machine learning techniques, The 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC2019), Maui Island, Dec 13-17 (2019).

国際会議アブストラクト

- 1) Mingland Yin, Xioning Zheng, Ansel Blumers, Mitsuho Nakakura, Hiroyuki Nakajima, Yosuke Hasegawa, George Karniadakis: Comparison of Multi-scale Models for Blood Flow in Zebrafish Brain, 72nd Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics, Seattle, Nov 23-26 (2019).
- 2) Mingland Yin, Xioning Zheng, Ansel Blumers, Mitsuho Nakakura, Hiroyuki Nakajima, Yosuke Hasegawa, George Karniadakis: Numerical study on Hemodynamics of brain vasculature in early zebrafish life, Biomedical Engineering Society 2019 (BMES2019), Philadelphia, Oct 16-19 (2019).

学会講演論文

- 1) 亀谷幸憲, Mirzapourshafiyi Fatemeh, 中山雅敬, 長谷川洋介: 毛細血管網の分岐形態が微小循環の輸送特性に与える影響, 日本流体力学会年会2019, 東京, 2019年9月13-15日.

(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」(代表)
- 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」(代表)
- 3) 基盤研究 A 「機械学習による乱流ビッグデータの特徴量抽出手法の構築」(分担)
- 4) 基盤研究 B 「組織幹細胞維持機構解明のための微小血管システムの構築」(分担)

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) 「車載用送風機の高効率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」
- 4) 「熱流体関連機器を対象としたトポロジー最適化技術の研究」

受託研究

①公的資金

- 1) NEDO 先導研究プログラム／エネルギー・環境新技術先導研究プログラム／エクセルギー損失削減のための熱交換・熱制御技術」(分担)
- 2) 環境省 CO₂ 排出削減対策強化誘導型技術開発・実証事業「カーエアコンの省エネ促進によるCO₂削減実証事業」(分担)

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) Hosein Naderpour, Kohei Nagai, P.Fakhariana, M.Haji: Innovative Models for Prediction of Compressive Strength of FRP-Confined Circular Reinforced Concrete Columns Using Soft Computing Methods, May 2019, Composite Structures, Vol. 215, pp. 69-84.
- 2) Hosein Naderpour, Kohei Nagai, Mohammad Haji, Masoomah Mirrashid: Adaptive Neuro-Fuzzy Inference Modelling and Sensitivity Analysis for Capacity Estimation of Fiber Reinforced Polymer-Strengthened Circular Reinforced Concrete Columns, August 2019, Expert Systems, Vol.36, Issue 4.

- 3) Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai, Koji Matsumoto: Meso-scale Modeling of Non-uniformly Corroded Reinforced Concrete Using 3D Discrete Analysis, Engineering Structures, October 2019, Vol.197, Article109378.
- 4) Yi Wang, Yushi Meng, Punyawut Jiradilok, Koji Matsumoto, Kohei Nagai, Shingo Asamoto: Expansive Cracking and Compressive Failure Simulations of ASR and DEF Damaged Concrete Using a Mesoscale Discrete Model, November 2019, Cement and Concrete Composites, Vol.104, Article103404.
- 5) Juan Jose Rubio, Takahiro Kashiwa, Teera Laiteerapong, Wenlong Deng, Kohei Nagai, Sergio Escalera, Kotaro Nakayama, Yutaka Matsuo, Helmut Prendinger: Multi-class Structural Damage Segmentation Using Fully Convolutional Networks, November 2019, Computers in Industry, Vol.112, Article103121.
- 6) Hosein Naderpour, Masoomah Mirrashid, Kohei Nagai: An Innovative Approach for Bond Strength Modeling in FRP Strip-to-Concrete Joints Using Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System, 2019, Engineering with Computers, DOI <https://doi.org/10.1007/s00366-019-00751-y>.
- 7) Wenlong Deng, Yongli Mou, Takahiro Kashiwa, Sergio Escalera, Kohei Nagai, Kotaro Nakayama, Yutaka Matsuo, Helmut Prendinger: Vision Based Pixel-level bridge Structural Damage Detection Using a Link ASPP Network, February 2020, Automation in Construction, Vol.110, Article102973.
- 8) Punyawut Jiradilok, Yi Wang, Kohei Nagai, Koji Matsumoto: Development of discrete meso-scale bond model for corrosion damage at steel-concrete interface based on tests with/without concrete damage, March 2020, Construction and Building Materials, Vol. 236, Article number 117615.
- 9) Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai, Koji Matsumoto, Takeshi Yoshida, Tetsuro Goda, Eiji Iwasaki: Analysis of Seismic Performance of Suspension Bridge in Myanmar, March 2020, Journal of Disaster Research, Vol.15, No.3, pp.360-367.
- 10) Michael Henry, Kohei Nagai, Koji Matsumoto, Hiroshi Yokota: Evaluating Expectations for Training Transfer: Exploratory Study on a Capacity Development Project for Road and Bridge Technology in Myanmar, March 2020, Journal of Disaster Research, Vol.15, No.3, pp.368-376.

国際会議予稿集

- 1) Mohamed Adel, Kohei Nagai, Koji Matsumoto: Simplified Design Approach of Steel Fiber Reinforced Concrete under Flexural Fatigue Load, 2019, Proceedings of the 10th International Conference on Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures (FraMCoS-X). (in Conference USB)
- 2) Yushi Meng, Punyawut Jiradilok, Koji Matsumoto, Kohei Nagai, Shingo Asamoto: Fracture Simulation of Concrete with ASR and DFE Expansions by RBSM, 2019, Proceedings of the 10th International Conference on Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures (FraMCoS-X). (in Conference USB)
- 3) Punyawut Jiradilok, Vikas Singh Kuntal, Kohei Nagai, Koji Matsumoto: Analytical Investigation of the Influence of Rebar Arrangement on Corrosion Crack Pattern By RBSM, 2019, Proceedings of the 10th International Conference on Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures (FraMCoS-

- X). (in Conference USB)
- 4) Ahmed Okeil Mohamed Atia, Rhea Upadhyay, Koji Matsumoto, Kohei Nagai: Investigation of Local Opening-sliding Relationship in the Vicinity of Deformed Bar in Concrete by Using DIC Technique, 2019, Proceedings of the 10th International Conference on Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures (FraMCoS-X). (in Conference USB)
 - 5) Daisuke Asahina, Mikio Takeda, Kohei Nagai: Simulating Hydraulic Fracturing Processes in Cement Composites Using Tough-RBSM, 2019, Proceedings of the 10th International Conference on Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures (FraMCoS-X). (in Conference USB)
 - 6) Vikas Singh Kuntal, Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai: Discrete Analysis System for Estimation of Corrosion Level in Concrete from Surface Crack Using Model Predictive Control, 2019, Proceedings of the 3rd ACF Symposium, S4-1-7. (in Symposium USB)
 - 7) Kota Horiguchi, Liyanto Eddy, Koji Matsumoto, Michael Henry, Kohei Nagai: The Effect of Cover Depth and Water-cement Ratio on the Porosity and Relative Quality Evaluation of Concrete under Water Supply, 2019, Proceedings of the 3rd ACF Symposium, S5-3-5. (in Symposium USB)
 - 8) Bhargavi Thakur, Kohei Nagai, Yudai Honma: Prioritization of Bridges Considering Multiple Risks for Efficient Recovery from Disaster, 2019, Proceedings of the 3rd ACF Symposium, S6-3-1. (in Symposium USB)
 - 9) Kumar Avadh, Ahmed Okeil Mohamed Atia, Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai: Visualization of Local Bond Behavior of Corroded Reinforced Concrete by Using DIC Technique, 2019, Proceedings of the 3rd ACF Symposium, S3-3-1. (in Symposium USB)
 - 10) Eam Sovisoht, Bhargavi Thakur, Kohei Nagai, Prakhar Misra, Wataru Takeuchi: Estimation of the Bridge Construction Year in Cambodia by Analysis of LANDSAT Satellite Data, 2019, Proceedings of the 3rd ACF Symposium, S3-1-4. (in Symposium USB)
 - 11) Khin Maung Zaw, Win Bo, Amy Aung, Koji Matsumoto, Kohei Nagai: Monitoring Results of Patheingyi Bridge Towers and Bearings, 2019, Proceeding of 18th International Symposium on New Technologies for Urban Safety of Mega Cities in Asia (USMCA), Paper No.26. (in Conference USB)
 - 12) Punyawut Jiradilok, Kumar Avadh, Kohei Nagai: Effect of Stirrup Confinement on Residual Bond Performance of Corroded RC by 3D RBSM, 2019, Proceeding of 18th International Symposium on New Technologies for Urban Safety of Mega Cities in Asia (USMCA), Paper No.41. (in Conference USB)
 - 13) Koji Matsumoto, Yushi Meng, Kohei Nagai: Meso-scale Discrete Analysis of Concrete Damaged by Delayed Ettringite Formation, 2019, Proceeding of 18th International Symposium on New Technologies for Urban Safety of Mega Cities in Asia (USMCA), Paper No.92. (in Conference USB)
 - 14) Yi Wang, Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai: Investigation of Combined ASR and DEF Induced Damage on Concrete by Using RBSM Simulation, 2019, Proceedings of the 16th East Asia-Pacific Conference on Structural Engineering & Construction (EASEC16), P148, pp.1-9.

- 15) Yi Wang, Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai: Parametrical Analysis of Stress and Crack Development in Concrete due to ASR and DEF based on a Discrete Model, 2019, Proceedings of the 9th East Asia-Pacific Young Researchers and Graduates Symposium (YRGS 2019), pp.64-66.

学会講演論文

- 1) 吉田剛, 合田哲朗, 長井宏平, 松本浩嗣, 岩崎英治: ミャンマー国吊橋の耐震性能照査に係わる報告 1〜Twantay 橋解析概要と結果〜, 2019, 土木学会全国大会第 74 回年次学術講演会, CS12-59.
- 2) 合田哲朗, 野末康博, 長井宏平, 松本浩嗣, 岩崎英治: ミャンマー国吊橋の耐震性能照査に係わる報告 2〜設計図面モデルと現況再現モデルによる解析結果の違い〜, 2019, 土木学会全国大会第 74 回年次学術講演会, CS12-60.
- 3) 野末康博, 合田哲朗, 長井宏平, 松本浩嗣, 岩崎英治: ミャンマー国吊橋の耐震性能照査に係わる報告 3〜Pathein 橋解析と考察〜, 2019, 土木学会全国大会第 74 回年次学術講演会, CS12-61.

総説・解説

- 1) 長井宏平: 道路アセットマネジメントに関する SIP インフラ・土木学会・JICA 技術セミナーの開催, 2019 年 5 月, 舗装, vol. 54, No. 5, 5 月号, p. 35.
- 2) 長井宏平: 地方公共団体の橋梁維持管理への ICT 活用の可能性, 2019 年 11 月, プレストレストコンクリート, Vol.61, No.6, Nov, pp. 10-15.
- 3) SIP インフラを引継ぐ国際展開で研究助成, 橋梁新聞, 2019 年 12 月 1 日 2-3 面.
- 4) コンクリート研究で日本と世界をつなぐ架け橋に, さきがける科学人, 2020, JST News, 2 月号, p. 9.

(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】微細構造解析とAI画像分析を用いたRC内部の鉄筋腐食分布の推定とリスク評価
- 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(株式会社ベイスコンサルティング)

受託研究

① 公的資金

- 1) 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

② 公的資金以外

- 1) NEXCO 東日本技術研究助成 三次元微細構造離散解析による RC 内部鉄筋腐食分布の逆推定

革新的シミュレーション研究センター 令和元年度 活動報告 Vol. 12

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

