



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 2 年度
活動報告

Vol. 13

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アプリケーションソフトウェア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」(以下、ポスト「京」重点課題⑧)の代表機関として、ポスト「京」(スーパーコンピュータ「富岳」)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、「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。

HPC に加えてデータ科学的手法の研究開発を実施するためにも不可欠な計算基盤として位置付けられ、Society5.0 の実現に大きく貢献することが期待されているスーパーコンピュータ「富岳」は、令和 3 年 3 月 9 日に共用が開始されました。「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・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 3 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 2 年度 活動報告

Vol. 13

目 次

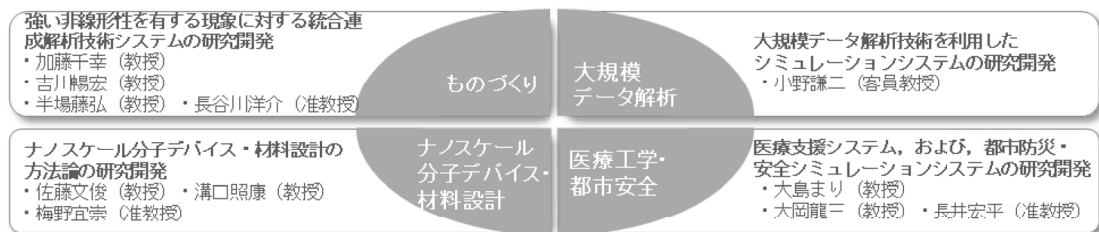
1. 革新的シミュレーション研究センターの概要	1
2. 構成メンバー	3
3. センターの活動実績	5
(1) 大型プロジェクトの推進	
1) 文部科学省「『富岳』成果創出加速プログラム」	
「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」	
(実施期間: 令和 2～令和 4 年度)	
2) 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構	
「超高压水素インフラ本格普及技術研究開発事業	
／水素ステーションのコスト低減等に関連する技術開発	
／複合圧力容器の評価手法確立・技術基準整備に関する技術開発」	
(実施期間: 平成 30～令和 4 年度)	
3) 国立研究開発法人新エネルギー・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 3 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・ワークショップ・セミナー等の開催・共催・後援	
2) 国内および海外への研究成果の展開	
3) ニュースレターの発行	
4) 新聞・マスコミ報道	
4. 各研究室内の活動実績	27

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)。CISS は、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、開発したシミュレーションソフトウェア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、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、スーパーコンピュータ「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行っています。具体的には、①量子化学計算や第 1 原理計算を用いた、タンパク質分子や材料界面の反応・機能解析技術によるナノスケール分子デバイス・材料設計の方法論の研究開発、②ものづくりイノベーション創出基盤となり得る、強い非線形性を有する現象に対する統合連成解析技術システムの研究開発、③生体内流動シミュレーションと可視化技術を融合した医療支援システム、および、都市防災・安全シミュレーションシステムの研究開発、④大規模データ解析技術を利用したシミュレーションシステムの研究開発、の四つの研究テーマを設定して研究開発を推進しています。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、我が国のフラッグシップシステムであるスーパーコンピュータ「富岳」用のアプリケーション開発プロジェクトとしては、文部科学省「ポスト『京』」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発重点課題⑧「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」(実施期間:平成 26～令和元年度)および文部科学省「『富岳』成果創出加速プログラム」「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」(実施期間:令和 2～令和 4 年度)を、代表機関として推進しました。



研究開発分野

2. 構成メンバー



加藤 千幸 センター長・教授

Chisachi KATO, Center Director, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 熱流体システム制御工学

Fluid Flow and Thermal Energy Systems Control



吉川 暢宏 教授

Nobuhiro YOSHIKAWA, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 マルチスケール固体力学

Multi-scale Solid Mechanics



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

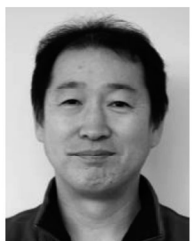
Ryozo OOKA, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 都市エネルギー工学

Urban Energy Engineering



小野 謙二 客員教授

Kenji ONO, Visiting Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 大規模計算機工学

Large-scale computer engineering



梅野 宜崇 准教授

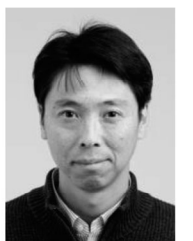
Yoshitaka UMENO, Associate Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 ナノ構造強度物性学

Nanostructured Materials Strength and Science



長谷川 洋介 准教授

Yosuke HASEGAWA, Associate Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 界面輸送工学

Interfacial Transport Engineering



長井 宏平 准教授

Kohei NAGAI, Associate Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 成熟社会インフラ工学

Infrastructure Management for Developed Society

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「『富岳』成果創出加速プログラム」

「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」

(実施期間: 令和2～令和4年度) 課題責任者: 加藤千幸(東京大学生産技術研究所)

[概 要]

「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」では、「富岳」の有する高い計算性能を十二分に引き出すことができるアプリケーション・ソフトウェア(以下、単にアプリケーション)を駆使することにより、壁面近傍の微細な乱流渦の直接数値計算(Wall-Resolved LES (Large-Eddy Simulation)), および、これらの乱流渦の効果を従来よりもはるかに高精度にモデル化する大規模な流体計算(Wall-Modeled LES)をエンジンルーム・タイヤハウス内の流れも含めた自動車まわりの流れの解析、および、軸封部や戻り流路などの細隙部内の流れも含めた流体機械の内部流れの解析に適用し、このような大規模数値計算による流れの予測技術は、自動車の風洞試験(空力性能・騒音)や流体機械の性能試験(一般性能・吸込み性能)を完全に代替し得る計算精度を有することを証明するための実証研究を実施している。また、この予測技術を用いて、自動車の空力・騒音開発で問題となる、走行・操縦安定性に対する空力現象の寄与や実走行状態における空力音の発生機構、遠心圧縮機の運転範囲を拡大する上で重要となるサージの発生機構など、製品開発上、重要な現象でありながら従来は経験的に扱われていた複雑な流体現象を解明するための実証研究を実施している。本プロジェクトは、東京大学生産技術研究所を代表機関として、神戸大学、九州大学、岩手大学、豊橋科学技術大学、山梨大学、および理化学研究所計算科学研究センターと密接に連携し、研究開発を推進している。そして、本プロジェクトはターボ機械、および自動車産業を主たる出口として、「富岳」を利用した大規模流体シミュレーションの産業上の効果を実証することを目的として実施するものであるため、一般社団法人ターボ機械協会、および、国立研究開発法人理化学研究所内に、「流体性能の高精度予測と革新的流体設計分科会」、および「HPCを活用した自動車次世代CAEコンソーシアム」をそれぞれ設置して実施している。

[詳 細]

エネルギー産業の心臓部となる「ターボ機械」、および、輸送産業の中核となる「自動車」を対象として、「富岳」あるいは「富岳」の時代におけるHPCを利用することにより、ものづくりの在り方を抜本的に変革できることを証明するために、5つの実証研究テーマを設定し、大学等の研究者と民間企業の技術者・研究者が強力に連携して、本課題を実施した。以下に、令和2年度に実施した事業内容について記す。

(i) 研究開発

(実証研究テーマ1) 数値曳航水槽の実現と省エネデバイスによる推進効率の向上

本実証研究テーマでは、「富岳」とポスト「京」重点課題⑧で研究開発したLES解析ソフトウェアであるFrontFlow/blue(FFB)を用いて、300億要素から最大1,200億要素のWall-Resolved LES計算により、船のまわりの乱流境界層を完全に解像する予測を実現し、曳航水槽試験を完全に数値シミュレーションに代替し得ることを実証するとともに、船の推進効率の向上のための省エネデバイスの動作メカニズ

ムを解明し、さらなる高効率な省エネデバイスの開発に貢献する。

令和 2 年度は、船を対象とした Wall-Modeled LES による数値シミュレーションのためのモデルの作成、利用するアプリケーションの「富岳」の本格利用に向けた調整、Wall-Modeled LES の精度や有効性の実証を実施した。数値曳航水槽の実現のテーマについては、いくつかの船型に対して最大 360 億計算格子を使用した LES 計算を実施し、その結果として、船型の肥大度を表す方形係数やレイノルズ数によって船体表面の境界層の遷移状態が大きく異なることが分かった。省エネデバイスによる推進効率の向上のテーマについては、LES 計算により、省エネデバイスとして、舵バルブを付けた場合、舵フィンが付けた場合、舵バルブと舵フィンを付けた場合の、自航要素に与える影響を調査し、自航要素にレイノルズ数依存性が大きく現れることが分かった。

（実証研究テーマ 2）細隙部を含めた多段遠心ポンプの内部流れの Wall-Resolved LES

本実証研究テーマでは、「富岳」を利用して、30～100 μm の最小渦スケールまで計算格子により直接解析する、Wall-Resolved LES を実施し、内部流れやその結果として決まる水力性能（全揚程・水力トルク・水力効率）の完全な予測を実現するとともに、細隙部内部流れの挙動やそれが性能や信頼性に与える影響を明らかにし、ポンプ設計の高度化に貢献する。さらに、上記の 1/100 程度の計算格子を用いた Wall-Modeled LES も実施し、Wall-Resolved LES の結果と計算精度、計算コストなどを比較することにより、Wall-Modeled LES の実用化を図る。

令和 2 年度は、ポンプを対象とした数値シミュレーションのためのモデルの作成、利用するアプリケーションの「富岳」の本格利用に向けた調整を実施し、その後、最大 14 億要素を用いた準備計算（テスト計算）を実施した。その結果、遠心ポンプの性能および流体力を定量的に予測できる見通しを得ることができた。特に、計算格子の解像度を向上させることにより、細隙部流れに起因する流体力の予測精度が大幅に向上することを明らかにした。

（実証研究テーマ 3）圧縮機サージの直接解析

本実証研究テーマでは、プラント、およびガスタービンなどの実機に用いられる遷音速圧縮機を対象として、圧縮機本体だけでなく、それが設置される配管系まで含めたシステム全体を計算領域とし、圧縮機羽根車の失速現象を再現できるほど短い時間刻みを設定するとともに、システム全体にわたる長周期の流体振動現象を捉え得るほど膨大な時間ステップ数にわたって DES (Detached Eddy Simulation) による非定常三次元流動解析を「富岳」上で実施することにより、圧縮機サージの初生（マイルドサージ）から、逆流を伴うディープサージに至る非定常流動メカニズムを解明し、圧縮機サージの予測技術を確立する。

令和 2 年度は、圧縮機サージの直接解析のためのモデルの作成、利用するアプリケーションの「富岳」の本格利用に向けた調整を実施した。モデル作成では、サージによる逆流を考慮して、圧縮機上流には配管に加えて半球状の開放領域を設定し、約 9 億の計算格子を作成した。現状のアプリケーションで圧縮機サージの計算に要する時間を試算したところ、10 倍以上のアプリケーションの高速化が必要であることが判明した。そこで、アプリケーションの高速化を実施し、ベンチマークモデルにおいて約 10 倍の高速化を達成した。

(実証研究テーマ 4) リアルワールド自動車空力性能の予測

本実証研究テーマでは、電気自動車や自動走行車等の、次世代自動車の設計・開発に貢献するための HPC シミュレーション技術の構築と実証を行うことを目的として、実走行状態の自動車の空力性能(空気抵抗, 操安性, 横風安全性等)の、車体形状再現性を数ミリまで高めた高解像度・長時間シミュレーションによる評価を実現する。

令和 2 年度は、リアルワールド自動車空力性能の予測のためのモデルの作成, 利用するアプリケーションの「富岳」の本格利用に向けた調整を実施した。具体的には、変動風下での空力性能や操縦安定性評価を行うために、実走行試験から得られた計測データをもとに、変動風の乱流強度や積分スケールを自由にコントロールできる変動風モジュールを作成した。また、車両運動と空力との連成解析を実現するために、多体運動解析が可能なオープンソースソフトウェア CHRONO を空力解析ソフトウェア CUBE に実装し、その動作検証を行った。さらに、風圧に伴う空力パーツの弾性変形を評価するための、流体と構造の統一解法の整備を行い、ベンチマークテストにより検証を行った。

(実証研究テーマ 5) リアルワールド自動車空力音予測

本実証研究テーマでは、電気自動車や自動走行車等の、次世代自動車の設計・開発に貢献するための HPC シミュレーション技術の構築と実証を行うことを目的として、ボンネット隙間やフロントグリルから発生する狭帯域音, ピラーやドアミラーから発生する広帯域音, 空力・構造振動・音響連成による車内騒音を対象に、実走行時の空力音予測を行う。

令和 2 年度は、リアルワールド自動車空力音予測のためのモデルの作成, 利用するアプリケーションの「富岳」の本格利用に向けた調整を実施した。具体的には、狭帯域音に対しては、ボンネットから発生するフィードバックノイズを予測するために、CUBE に実装されている圧縮性流体解析アルゴリズムの、「富岳」上での性能評価とチューニングを行った。単体性能でピーク性能に対して 7%弱程度であったものに対して、袖領域でのデータ通信のリオーダーリング等を実施して、対流項および拡散項に関して、2~3 割程度の性能向上の目処を得た。また、実車両を対象にしたフィードバックノイズ予測に対して、空間解像度を 250 億セル規模のシミュレーションを「富岳」で実施し、精度向上の目処を得た。広帯域音については、バサバサ音の評価を行うため、予備実験を行い、変動感の主要因子の抽出を行った。また、乱流変動風下での空力音予測のために、シミュレーションでの変動風作成装置について、実証研究テーマ 4 と連携して、変動風作成モジュールの作成を行った。車内騒音解析の音源となる外部音を予測するため、Acoustic perturbation equation による予備解析を行い、車外音場と流れ場の圧力変動を分離できることを確認した。

(ii) プロジェクトの総合的推進

プロジェクト全体の連携を密としつつ円滑に運営していくため、プロジェクトの推進や実証研究テーマ間の連携のための会議等を適宜開催し、参画の協力機関・連携機関との連携・調整にあたる。特に、プロジェクト全体の進捗状況を確認し、計画の合理化の検討等を行うなど、プロジェクトの効果的・効率的推進に資する取組みを実施する。また、プロジェクトで得られた成果については、可能な限り積極的に公開して今後の展開に資するとともに、ものづくり産業での早期戦力化を支援する。

令和 2 年度は、上記を順次実施しながら、本課題の有効な研究活動のための支援を実施し、研究開

発全体を円滑に実施するための調整を行った。

2) 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構「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 4 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), 高圧ガス保安協会(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2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)

タイプ3複合圧力容器の圧力サイクル寿命を予測するため、Al合金製疲労試験片を用いた疲労試験を実施し、最適疲労曲線を構築した。また、タイプ3蓄圧器のAl合金ライナーは、自緊処理による圧縮平均応力と充填の圧力変動による引張平均応力の両方があるため、平均応力が正負の場合に適用できる平均応力の補正方法を検討した。

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った。

(1) 樹脂単体軸荷重試験片を用いた試験

フィラメントワインディング樹脂及びプリプレグの樹脂単体試験片を用いて疲労試験を実施した。最大公称ひずみで整理すれば、樹脂の疲労強度はAl合金の疲労強度よりも十分長寿命側にあること

がわかった。

(2) CFRP 軸荷重試験片を用いた試験

荷重方向と炭素繊維配向方向のなす角度を 0° , 45° , 90° とした CFRP 試験片を用いて疲労試験を実施した。炭素繊維方向 0° の試験片に関しては最大公称ひずみで整理することで樹脂単体試験片の疲労試験結果から CFRP の疲労寿命を予測できることがわかった。

(3) ミクロスケール有限要素シミュレーション

炭素繊維と樹脂を明確に分離して解像するミクロスケールモデルに基づく CFRP 試験片の応力評価手法を確立した。均質化法により炭素繊維と樹脂からなるミクロ構造のマクロ材料定数を決定する。任意方向の荷重に対するマクロひずみを算出した後、そのマクロひずみを境界条件として設定してミクロスケール有限要素シミュレーションを実行する。この手法により、炭素繊維方向と荷重方向のなす角度が任意の場合であっても容易に炭素繊維間樹脂の応力状態が評価可能となった。

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

昨年度の圧力サイクル試験及びその後の調査結果を踏まえ、タイプ 2 技術文書案で規定する公式による設計(安全係数 3.5)、解析による設計(安全係数 2.4)に対応するよう厚肉化した金属層に、CFRP 層をフープ巻きした円筒試験体を 2 種類製作した。これらの円筒試験体に対し、 $S=3.5$ の試験体では 100 万回まで、 $S=2.4$ の試験体では 85 万回までの圧力サイクル試験を実施した。何れの試験体でも破裂及び漏水は認められず、公式による設計、解析による設計で安全性に問題無いことがわかった。

タイプ 3 複合圧力容器にフープ巻きされた CFRP 材料の疲労寿命予測手法確立のため、試験片を用いて行った CFRP 材料の $s-n$ 曲線がフープ巻きされた CFRP についても有効かを検証することとした。部分充填圧力サイクルを想定しフープ層の厚さと圧力サイクル条件を決定した。温度プロファイルを決定して試験体を試作した。

(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

フルラップ複合圧力容器対応円筒試験体のライナーおよび CFRP 層をタイプ 3 蓄圧器の応力状態に合致するよう設計した。部分充填圧力サイクルを想定し試験条件を設定して試験を実施した。

漏洩にまでは至らなかったため、ライナー内面の表面き裂を検出するため超音波探傷試験を実施することとした。

①-4 自緊効果を考慮した設計疲労曲線の作成(東京大学)

KHK 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

積層構成を忠実に反映した有限要素法によりタイプ 3 複合圧力容器の疲労評価を正確に行う手法の確立を目標とする。胴部残留応力値の解析的定式を導きシミュレーション結果の信頼性を確保した。さらに、実験的に測定した胴部残留応力値との差について、その違いがライナーと胴部間の隙間によるものであることを隙間モデルによる解析を通じて明らかにした。以上の成果を取り入れることで、圧力サイクル試験の破面観察により求めた測定結果とき裂進展解析により求めた解析結果が比較的初期のき裂に対しては良好に一致することを確認した。

(2) CFRP 材料の設計疲労曲線作成手法の開発

炭素繊維と樹脂を明確に分離して解像するミクロスケールモデルに基づき実施した有限要素シミュレーション結果より、CFRP 軸荷重試験片を用いた疲労試験結果を樹脂の疲労寿命と関連付けて統一的に整理する手法を検討した。その結果、繊維方向と荷重方向が一致する試験片については、最大の公称ひずみで整理することで樹脂の疲労寿命設計線図から CFRP 軸荷重試験片の疲労寿命予測を適切に行えることを明らかにした。また、繊維方向と荷重方向が 45° および 90° の角度をなす CFRP 軸荷重試験片については、炭素繊維を引き離す内力に相当する Interfacial Normal stress (INS) により整理することで樹脂の疲労寿命設計線図から CFRP 軸荷重試験片の疲労寿命予測を適切に行えることを明らかにした。

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)

疲労寿命設計線図を用いたタイプ 3 蓄圧器の設計手法の実現に資するデータ採取のため、タイプ 3 実容器を用いて、種々の漏洩に至る迄の圧力サイクル試験を実施した。また、蓄圧器の寿命延長によるコストダウンを図るため試験データを基にタイプ 3 蓄圧器への累積損傷則の適用について検討した。

圧力振幅範囲を種々の条件で行ったタイプ 3 実容器の漏洩に至る迄の圧力サイクル試験データから、累積損傷則に基づいた容器寿命延長式(累積損傷関係式)を構築した。横軸を圧力振幅比(無次元化)、縦軸をサイクル増加比(無次元化)とすることで、仕様の異なる容器を指数関数の形で相関良く整理することが可能となった。この累積損傷関係式を用いることにより従来 FCV10 万台に充填可能なタイプ 3 蓄圧器が FCV224 万台まで充填台数を伸ばせることを見出した。

今後の展開として、ISO TC197 WG15 で作成中の水素ステーション蓄圧器に関する技術基準に、累

積損傷則に基づいた容器寿命延長式(累積損傷関係式)の導入を目指す。また、横軸を応力振幅比に変換することで、フルラップ複合圧力容器の応力解析及び疲労解析に基づく設計手法の実現に資する実容器疲労試験データの蓄積とすることを目指す。

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)

タイプ 2 蓄圧器は炭素繊維層が金属層の周方向応力を分担している鋼製圧力容器であり、既存の鋼製圧力容器と同様に実容器試験を課さない設計が可能であるとの結論を得た。既存の鋼製圧力容器規格である超高压ガス設備に関する基準(KIIS 0220)の設計思想をベースに技術文書案を検討した。金属層材料の水素適合性評価、疲労解析方法等は、2020 年 9 月に発行された KHKS 0220(2020)の内容と整合を図った。今年度はタイプ 2 複合容器蓄圧器技術文書検討分科会およびタスクフォースを各 3 回実施し、タイプ 2 技術文書案が完成した。今後の展開として、成果の普及のために、KHKS 0220 の附属書化および ISO TC197 WG15 で作成中の水素ステーション蓄圧器に関する技術基準への展開を目指す。

(2) フルラップ複合圧力容器の技術基準の整備(JPEC)

タイプ 3 複合圧力容器に関する公式による設計方法を確立した。容器設計方法は、①公式による設計により、静的強度のみを考慮して初期の容器厚さを決定し、②解析による設計により、疲労強度を考慮して詳細設計する 手順とすることとした。

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 3 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で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2019年11月に開催されたGTR13 Phase 2 IWG会議に提案された水素適合性試験方法が、オーステナイト系ステンレス鋼以外の材料に適用された場合に生じる問題点について、水素脆化メカニズムおよび材質面の影響から検討した。さらに提案された水素適合性を評価するにあたって注意すべき点についてRationale案に記載すると共に、材料専門家会議において提案、議論した。

[詳 細]

昨年度に引き続いて HFCV 基準検討委員会, SAE 材料専門家会議, GTR Phase 2 IWG 会議等にて自動車搭載用高圧水素部品の水素適合性評価方法について議論し, オーステナイト系ステンレス鋼以外の全ての材料に適用する範囲を広げることを前提に, 試験法案の修正を進めた. 例えば析出硬化型マルテンサイト系ステンレス鋼(SUS630 等)のような, 高強度でかつ降伏比(YR)の大きい水素脆化感受性が高い材料への対応として, 材料基準に YR の上限値($YR < 0.936$)を規定する追加提案を行った. 併せて本水素適合性試験を各種金属材料に適用した場合の注意点を検討し, 一覧表として整理した.

また試験方法, 評価基準に関して重要な項目については Rationale 案に追加記載する提案を行った. 例えば SSRT 試験の判定基準が, 試験材料, 試験装置のばらつきも考慮して, 水素中降伏強度が大気中降伏強度の 0.8 倍以上となっているが, 比較する降伏強度の条件を明確にすべく, 模式図を Rationale に追記し, 降伏強度の判断には, Material B のように降伏後一定の伸びを有することが必要であり, Material A のように降伏点に達する前に破断した場合は, その破断した際の強度が大気中の降伏強度の 80%を超えていても不合格となることを明記した. 併せて伸びの例として, オーステナイト系ステンレス鋼における伸びの目安値($\geq 12\%$)を追記した.

さらに GTR13 に提案された水素適合性試験法が, オーステナイト系ステンレス鋼以外の材料に適用されるケースを想定し, 過去の NEDO 事業成果, および文献等に記載されている各種金属材料の試験データ類を収集・整理してデータベース化した. さらに水素脆化メカニズム面からも考察を加えて, 本試験が種々の材料に適用された場合の合格可能性と, その際に生じる問題点を整理した.

提案された 2 種類の試験方法である Option 1 と Option 2 において, 試験結果が異なる可能性が高いのは特に切欠きの影響が高く出る高強度材であるが, FCV 用高圧水素タンク材料に用いられる材料の基本特性の項目に, YR の上限値(< 0.936)を追加規定することにより, 試験方法による結果の差を少なくすることが可能である. それに加えて, 水素脆化感受性の高い SUS630 のような高強度材への規制強化が可能となった. また本試験法では, 現在使用が認められているオーステナイト系ステンレス鋼, Al 合金(6061-T6)等に加えて, Cu 合金, 低強度低合金鋼等も合格する可能性が高い. ただし Al 合金については, 6061-T6 合金以外の材料も水素適合性試験に合格する可能性が高く, 別途提案されている HG-SCC 試験とのセットで考えていく必要がある.

(2) 他研究機関との連携

国立研究開発法人理化学研究所および国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構

上記(1)に記載された文部科学省「『富岳』成果創出加速プログラム」「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」(以下, 「富岳」流体予測革新プロジェクト)において, 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), 流体・構造統一連成解析システム CUBE および格子ボルツマン法による直接計算プログラム FFX 等を用いた実証研究が推進されている. これらのアプリケーションは, 令和元年度まで実施された文部科学省のプロジェクト, 「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」(以下、ポスト「京」重点課題⑧プロジェクト)において研究開発され、「富岳」における実効性能は確認済みのものである。特に、FFB は、ポスト「京」重点課題⑧プロジェクトのターゲットアプリケーションに選定され、計算機システム(ハードウェア)とアプリケーションプログラムの協調した研究開発(コ・デザイン)によりさらなる最適化やアルゴリズムの改良を実施されたプログラムである。また、FFB の高速化の成果は、ポスト「京」重点課題⑧プロジェクト内へ展開され、CUBE や FFX の実効性能も大幅に向上させることができた。この研究開発は、「富岳」の開発主体であった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)やポスト「京」重点課題⑧プロジェクトの実施機関であった国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構等と強力に連携して推進されていたが、「富岳」流体予測革新プロジェクトにおいても、成果創出を加速させることを目的として、それらの機関との連携体制を継続して構築したうえで、さらに一般財団法人高度情報科学技術研究機構の協力を得て、この活動で得られた成果を共有しながら、アプリケーションの研究開発を推進してきた。以下に、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、「富岳」のメモリ性能(実効最大メモリスループット 820 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。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)の改良を進めた。これらにより、「京」に対して 70 倍以上高速な流体シミュレーションを実現し、従来、水槽実験、風洞実験により評価されてきた、船や自動車などの性能試験を完全にコンピュータによる数値シミュレーションで代替できる可能性が証明された。なお、この成果は、その年の、高性能並列計算を科学技術分野へ適用することに関してイノベーションの功績が最も顕著な研究に与えられるゴードン・ベル賞の最終候補に選出された。

(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でいる。

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 2 年度現在 12 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(居駒ら:「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」, 2016)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。今年度は、新型コロナウイルス感染拡大の防止のため、初のリモート講義となった。これに対応するために進め方や教材をアレンジした。詳細は、スーパーコンピューティングニュース最新号(高橋, 2021)を参照のこと。

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】

教科書・参考書

- ・ 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, 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.

スーパーコンピューティングニュース

- ・ 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, “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, 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.
- ・ 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.23, No.1, 2021 年 1 月.

学会発表・受賞等

- ・ 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.
- ・ 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「『富岳』成果創出加速プログラム」「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」第1回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウム

「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」プロジェクトでは、エネルギー産業の心臓部となる「ターボ機械」、および、輸送産業の中核となる「自動車」を対象として、「富岳」あるいは「富岳」の時代における HPC を利用することにより、ものづくりの在り方を抜本的に変革できるアプリケーションの実証研究を進めている。

今回のシンポジウムでは、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」プロジェクトの最終成果を、スーパーコンピュータ「富岳」で利用して得た最新の成果を報告し、それを踏まえて、「富岳」の時代のものづくりシミュレーションについて議論した。

開催日： 令和3年3月10日(水) 10:00-17:00

場 所： Web 会議 (Webex Events)

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： (一財)高度情報科学技術研究機構

(一社)HPCI コンソーシアム

(公財)計算科学振興財団

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

協 賛： (一社)可視化情報学会, (公社)自動車技術会, (一社)情報処理学会, (一社)ターボ機械協会, (一社)日本応用数理学会, (公社)日本ガスタービン学会, (一社)日本機械学会, (一社)日本計算工学会, (一社)日本航空宇宙学会, (一社)日本シミュレーション学会, (公社)日本船舶海洋工学会, (一社)日本流体力学会 (50 音順)

参加者数： 292 名

資料作成： 予稿集 112 頁

○プログラム

10:00-10:05 開会の挨拶

宅間 裕子 文部科学省研究振興局 計算科学技術推進室長

I. ターボ機械設計・評価システムの研究開発

10:05-10:30 ターボ機械設計・評価システムの研究開発の概要

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/課題責任者

10:30-11:10 (実証研究テーマ①)数値曳航水槽の実現と省エネデバイスによる推進効率の向上

西川 達雄 一般財団法人日本造船技術センター 課長

- 増田 聖始 ジャパンマリンユナイテッド株式会社技術研究所
流体研究グループ長
- 11:10-11:50 (実証研究テーマ②)細隙部を含めた多段遠心ポンプの内部流れの
Wall-Resolved LES
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
プリュニエール・ロマン
株式会社日立インダストリアルプロダクツ 技師
- 11:50-12:30 (実証研究テーマ③)圧縮機サージの直接解析
古川 雅人 九州大学大学院工学研究院 教授
佐藤 渉 株式会社 IHI 技術開発本部 主任研究員
- II. 自動車統合設計システムの研究開発
- 13:30-13:55 自動車統合設計システムの研究開発の概要
坪倉 誠 神戸大学大学院システム情報学研究科 教授
理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー
- 13:55-14:35 (実証研究テーマ④)リアルワールド自動車空力性能の予測
吉武 邦彦 株式会社本田技術研究所先進技術研究所
アシスタントチーフエンジニア
- 14:35-15:15 (実証研究テーマ⑤)リアルワールド自動車空力音予測
飯田 明由 豊橋技術科学大学大学院工学研究科 教授
安藤 裕啓 スズキ株式会社四輪車体実験・評価部 係長
宮澤 真史 株式会社本田技術研究所先進技術研究所
アシスタントチーフエンジニア
- III. パネルディスカッション
- 15:25-16:55 「『富岳』を利用したものづくりの変革への期待」
モデレータ
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
- パネリスト
坪倉 誠 神戸大学大学院システム情報学研究科 教授
理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー
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
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
本田 正徳 マツダ株式会社技術研究所 上席研究員
西川 達雄 一般財団法人日本造船技術センター 課長
佐藤 渉 株式会社 IHI 技術開発本部 主任研究員

岩瀬 拓 株式会社日立製作所研究開発グループ 主任研究員
金澤 宏幸 富士通株式会社プロセッサシステム事業本部
ソリューション開発統括部 アプリケーション技術部
シニアマネージャー

16:55-17:00 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/課題責任者

第 36 回生研 TSFD シンポジウム

「乱流シミュレーションと流れの設計 ―環境制御と CFD の新しい展開―」

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 36 回目となり、「環境制御と CFD の新しい展開」というテーマに関する 12 件の講演を行った。

開催日: 令和 3 年 3 月 9 日(火) 9:40-17:20

場 所: オンライン(Zoom)

主 催: 東京大学生産技術研究所 TSFD グループ

○プログラム

9:40-9:45 開会の挨拶 大岡 龍三(東京大学)

セッション 1 司会 大岡 龍三(東京大学)

<基調講演>

9:45-10:45 都市気象研究のための様々な数値モデルの開発とその応用

日下 博幸(筑波大学計算科学研究センター・教授)

<以降, 一般講演>

10:45-11:15 LES によるエクマン層の再現と汚染物質拡散

小野 浩己(電力中央研究所)

11:15-11:45 Comparison of steady and unsteady RANS simulation effects on dispersion fields around isolated building

Xinyi LI, Tsubasa OKAZE(東京工業大学)

セッション 2 司会 北澤 大輔(東京大学)

13:00-13:30 RANS simulation of pollutant dispersion in turbulent boundary layer using Eulerian dispersion model with a travel-time-based concentration diffusivity

Chao LIN, Ryoza OOKA, Hideki KIKUMOTO(東京大学)

13:30-14:00 エクマン境界層における乱流ヘリシティの予測

小山 省司(東京大学)

- 14:00-14:30 平面クエット流における乱流スポットの成長と非相似性の発生
福留 功二, 塚原 隆裕(東京理科大学), 守 裕也(電気通信大学), 山本 誠(東京理科大学)
- 14:30-15:00 SGS 応力輸送方程式による LES モデリングの提案
松山 新吾(宇宙航空研究開発機構)
- セッション 3 司会 大島 まり(東京大学)
- 15:15-15:45 風波気液二相流での液側乱流混合の制御に関する数値的検討
松田 景吾(海洋研究開発機構), 小森 悟(同志社大学), 高垣 直尚(兵庫県立大学), 大西 領(東京工業大学)
- 15:45-16:15 Topographic Rossby waves in the soap-film turbulent channel flow
Chien-Chia LIU(東京大学)
- 16:15-16:45 POD-LSE による市街地瞬時気流分布推定に関する研究:立方体建物群モデル内の乱流への適用
胡 超億, 菊本 英紀, 賈 鴻源(東京大学)
- 16:45-17:15 Statistical analysis of high-percentile wind speed at the pedestrian-level around a simplified building based on the Weibull distribution
Wei WANG, Tsubasa OKAZE(東京工業大学)
- 17:15-17:20 閉会の挨拶 菊本 英紀(東京大学)

b) ワークショップ

「富岳」成果報告創出加速プログラム 第 4 回 HPC ものづくり統合ワークショップ

将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、スーパーコンピュータ「富岳」といった最先端スパコンを駆使して、新しい知見を得ることが必須になっている。これを踏まえ、産業界がこれらのアプリケーションの性能・機能を見極め、設計・開発の現場で実用化をすることを促進するために、「HPC ものづくり統合ワークショップ」を開催した。

ポスト「京」重点課題プロジェクトから引き続いての開催となる第 4 回は「『富岳』利用の期待と展望」に焦点をあて議論した。

開催日: 令和 2 年 11 月 27 日(金) 10:00-17:00

場 所: Web 会議(Webex Events)

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 「富岳」成果創出加速プログラム「スーパーシミュレーションと AI を連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用」プロジェクト

東北大学大学院工学研究科 「富岳」成果創出加速プログラム「航空機フライト試験を代替する近未来型設計技術の先導的実証研究」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: 157 名

資料作成: 「富岳」利用の期待予稿集 71 頁,
「富岳」利用の展望予稿集 79 頁

○プログラム

●「富岳」利用の期待

(司会 河合 宗司 東北大学大学院工学系研究科 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
- 10:05-10:30 船舶分野における「富岳」利用の展望
西川 達雄 般財団法人日本造船技術センター 課長
ボックスファン設計最適化
岩瀬 拓 株式会社日立製作所研究開発グループ 主任研究員
- 10:30-10:55 自動車開発における HPC 活用事例と富岳への期待
平岡武宜, 小平剛央, 清水圭吾
マツダ株式会社技術研究所アシスタントマネージャー
- 10:55-11:20 CHEETAH の産業利用推進のための取り組み
藤川 泰彦 株式会社ヴァイナス 代表取締役社長
- 11:20-11:45 頻発する極端気象災害に対する都市・建築のレジリエンス強化の HPC
田村 哲郎 東京工業大学環境・社会理工学院 名誉教授
- 11:45-12:10 洋上風車後流の大規模乱流解析
飯田 明由 豊橋技術科学大学大学院工学研究科 教授
- 12:10-12:35 航空機フライト試験を代替する世界初の実飛行レイノルズ数・航空機全機 LES 解析
に向けて
河合 宗司 東北大学大学院工学系研究科 教授

●「富岳」利用の展望

(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)

- 13:45-14:20 「富岳」の時代の HPC の産業応用(期待と課題)
加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 センター長・教授
- 14:20-14:55 富岳を用いた新たな自動車 CAE の創出
坪倉 誠 理化学研究所計算科学研究センター/神戸大学大学院システム情報学研究科 チームリーダー/教授
(司会 坪倉 誠 神戸大学大学院システム情報学研究科 教授)
- 15:10-15:45 FFVHC-ACE の高速化に向けた取り組み
高木 亮治 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 准教授
- 15:45-16:20 富岳における ADVENTURE の性能最適化
河合 浩志 東洋大学総合情報学部 教授

16:20-16:55 最近のアーキテクチャにおける SpMV の性能について

奥田 洋司 東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授

16:55-17:00 閉会挨拶

河合 宗司 東北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 60 回 LES 研究会

開催日： 令和 2 年 7 月 10 日(金)14:00-15:30

場 所： Zoom によるオンライン会議

「物体非適合直交格子における壁面モデル LES の適用と保存則について」

玉置 義治 東北大学

第 61 回 LES 研究会

開催日： 令和 2 年 9 月 9 日(水)14:00-15:30

場 所： Zoom によるオンライン会議

「壁乱流中の中間サイズ気泡挙動と抵抗低減効果」

大島 伸行 北海道大学

第 62 回 LES 研究会

開催日： 令和 2 年 11 月 13 日(金)14:00-15:30

場 所： Zoom によるオンライン会議

「数値気象モデルを用いた風車配列境界層の LES」

中尾 圭佑 電力中央研究所

第 63 回 LES 研究会

開催日： 令和 3 年 1 月 12 日(火)15:30-17:00

場 所： Zoom によるオンライン会議

「2 流体モデルの連立数値計算を用いた量子乱流の研究」

湯井 悟志 慶應義塾大学

d) 共催・後援・その他

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「スーパーシミュレーションと AI を連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用」第 1 回シンポジウム

開催日： 令和 2 年 10 月 27 日(火)

場 所： オンライン開催

主 催： 東京大学大学院工学研究科「富岳」成果創出加速プログラム「スーパーシミュレーション
と AI を連携活用した実機クリーンエネルギーシステムのデジタルツインの構築と活用」

第 7 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 2 年 10 月 29 日(木)~30 日(金)
場 所： オンライン開催
主 催： 一般財団法人高度情報科学技術研究機構

第 4 回 CAE ワークショップ

開催日： 令和 3 年 3 月 12 日(金)
場 所： オンライン開催
主 催： 一般財団法人高度情報科学技術研究機構

The 3rd R-CCS International Symposium

開催日： 令和 3 年 2 月 15 日(月)~16 日(火)
場 所： オンライン開催
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

第 13 回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム

開催日： 令和 2 年 12 月 10 日(木) 13:00~17:30
場 所： オンライン開催
主 催： スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2020

開催日： 令和 3 年 2 月 18 日(木)
場 所： オンライン開催
主 催： 国立研究開発法人物質・材料研究機構

ABINIT-MP 講習会

開催日： 令和 3 年 1 月 21 日(木)
場 所： ウェブ講習会
主 催： 一般財団法人高度情報科学技術研究機構,名古屋大学情報基盤センター

ABINIT-MP 講習会

開催日： 令和 3 年 3 月 22 日(月)
場 所： ウェブ講習会
主 催： 一般財団法人高度情報科学技術研究機構,九州大学情報基盤研究開発センター

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 2020

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、「富岳」プロジェクトの概要や、ポスト「京」重点課題⑧の概要および成果等の展示紹介を行った。

開催日： 令和2年9月3日(木)～4日(金)

場 所： 神戸国際展示場 2 号館

SC20

研究開発したソフトウェアの紹介を行うため、オンラインによるブースの展示を行い、ポスターで研究成果の展示を行った。

開催日： 令和2年11月17日(火)～19日(木)

場 所： ヴァーチャル開催

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。

令和2年度は Vol. 31, Vol. 32 を発行した。

(1) Vol. 31

発 行 日： 令和2年6月

発行部数： 800 部

内容： 1 面 巻頭言「スパコン「富岳」用アプリケーション開発プロジェクト完遂「富岳」を用いた成果創出のためのプロジェクトを開始」
2-3 面 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」プロジェクトの成果の紹介
4-5 面 センター所属メンバー研究紹介
6 面 新プロジェクト「『富岳』成果創出加速プログラム「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」紹介、活動報告

(2) Vol. 32

発 行 日： 令和3年1月

発行部数： 500 部

内容： 1 面 巻頭言「ウィズコロナ下でもプロジェクトによる研究開発を着実に推進」
2 面 NEDO プロジェクト「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」の成果の紹介
3 面 国際会議 SC20 出展報告
4-5 面 センター所属メンバー研究紹介
6 面 活動報告およびイベント案内

4) 新聞・マスコミ報道

新聞・WEB 新聞

- (1) 「国際展開研究助成 2 年目へ」、令和 2 年 12 月 1 日(火)、橋梁新聞, 4 面 5 面
- (2) 「橋梁の維持管理について」、令和 2 年 12 月 2 日(水)、ニュースウォッチ 9, NHK

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)を開発している。FFB 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、本年 3 月から共用を開始したスーパーコンピュータ「富岳」において、179 GFLOPS という「京」の 35 倍のノード性能を達成した。また、「富岳」のほぼ全系を使用したベンチマーク計算 (330 万コアを使用) を実施し、「京」と比較して 70 倍以上の高速な計算が可能であることを実証した。これらの成果により、FFB は SC20 のゴードンベル賞のファイナリストに選考された。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の解析や流れから発生する音の直接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が可能な、Lattice Boltzmann 法 (LBM) と Building Cube Method (BCM) を基礎とした新たな流体音響解析プログラム FFX を開発している。令和元年度は特に FFX の高速化と機能強化を実施した。前者に関してはそれ以前のプログラムと比較して 3 倍から 5 倍程度の高速計算を実現した。また、後者に関しては、マルチレベルのキューブの配置を可能にし、また、物体表面の処理方法を完全に並列に実施できるようにし、プログラムの使い勝手を大幅に向上させることができた。現在は平板乱流境界層や翼まわりの流れなどの基礎的な流れ場を対象として精度検証を実施するとともに、民間企業との共同研究によって、実車の空力音響解析のテスト計算を実施している。実車の計算には最終的には 10 兆点程度の計算格子を使用する予定であるが、このような超大規模並列性能に対しても、高い並列化効率を維持できることをベンチマーク計算によって実証した。

(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

大規模な数値解析や風洞実験を駆使することにより、これまでに、翼に流入する流れに変動がある場合に発生する音が大幅に増大したり、ポンプ吸い込み水槽において水中渦や空気吸い込み渦が発生したりする原理的なメカニズムを解明してきた。これらの研究成果に関してはすでに論文に掲載されている。現在は自動車の A ピラーまわりの流れから発生する音の発生メカニズムの解明や翼端渦に起因して発生する音の予測やメカニズムの解明を目指して研究している。

(3) 自動車・船舶・ターボ機械などに関する応用研究

【船舶】

大型模型を用いた曳航水槽試験と同等の精度と信頼性を有する数値シミュレーションを実施し、曳航水槽試験に取って代わり得る数値曳航水槽の実現を目指して研究開発を行っている。これまでに、船体まわりの乱流境界層中の主要な渦を全て直接計算することにより、水槽試験と同程度の誤差である1%以内の誤差により推進抵抗の予測が可能であることが明らかとなっていた。民間企業等との連携協力のもと、色々な船型に対して、上記のようなシミュレーションの予測精度の検証を実施し、全ての船型に対して推進抵抗(摩擦抵抗, 形状抵抗, 造波抵抗)と自航要素とよばれる、船体とプロペラとの干渉効果が定量的に予測可能であることを示した。令和2年度からは国内の有力造船メーカーの協力を得て、オールジャパン体制によって、上記のような数値計算の本格的な実用化を目指した調査研究を実施している。

【ターボ機械】

ボックスファンやプロペラファンのように比較的低圧のファンの製品開発においては空力性能を向上させることとともに、空力騒音の低減が重要な技術課題となっているが、空力騒音の定量的な予測は実現されていない。そこで、ボックスファン、プロペラファンおよび多翼ファンを対象として、性能と騒音予測ベンチマーク計算を産学官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。令和2年度は上記で明らかとなった課題に関してさらに詳細な調査を実施するとともに、その解決をはかるための調査研究を実施している。

(1) 研究成果一覧

和文論文

- 1) 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 p. 19-00455, DOI: <https://doi.org/10.1299/transjsme.19-00455>.

国際会議予稿集

- 1) Chisachi Kato, Yoshinobu Yamade, Katsuhiro Nagano, Kiyoshi Kumahata, Kazuo Minami, Tatsuo Nishikawa: Toward Realization of Numerical Towing-Tank Tests by Wall-Resolved Large Eddy Simulation based on 32 Billion Grid Finite-Element Computation, SC20, November 9-19, 2020, Online Conference.

国際会議アブストラクト

- 1) Chisachi Kato: Toward realization of numerical towing-tank tests by wall resolved large EDDY simulation based on 32 billion grid finite-element computation, The Fourth Chinese International Turbomachinery Conference (CITC), 2020.4.10-13, online (China).

- 2) Chisachi Kato: Toward realization of numerical towing- tank tests by wall- resolved large EDDY simulation based on 32 billion grid finite-element computation, The Fourth Chinese International Turbomachinery Conference & Exhibition, 2020.11.1, Online Conference.
- 3) Chisachi Kato: High Performance Computing and Its Industrial Applications in Fugaku Era, 18th International Symposium on Transport Phenomena and Dynamics of Rotating Machinery, November23-26, 2020, Online Conference.
- 4) Chisachi Kato: High Performance Computing and Its Industrial Applications in Fugaku Era, Multi-scale, Multi-physics and Coupled Problems on highly parallel systems (MMCP), 2021.1. 20-22, Online (Jeju/South Korea).
- 5) Chisachi Kato: Toward Realization of Numerical Towing-Tank Tests by Wall-Resolved Large Eddy Simulation based on 32 billion grid Finite-Element Computation, The 3rd R-CCS International Symposium, 2021.2.15-16. Online (R-CCS/Kobe).

(2)研究プロジェクト

民間等との共同研究等

- 1) 「CFD による船舶性能推定精度向上に関する研究」
- 2) 「大規模圧縮性流体解析ソルバの高精度化」
- 3) 「一般社団法人ターボ機械協会 流体性能の高精度予測と革新的流体設計分科会」

受託研究

① 公的資金

- 1) 文部科学省「『富岳』成果創出加速プログラム」 「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」

吉川暢宏研究室 マルチスケール固体力学

炭素繊維強化プラスチック(Carbon Fiber Reinforced Plastic, CFRP)に代表される複合材料は破壊力学の適用を拒んできた。非均質性による応力場の局所的不連続性とその主因である。CFRP 製品開発の歴史は破壊力学の適用範囲拡大の歴史と重なるが、その試みはことごとく不発に終わり、試作と破壊試験を繰り返す試行錯誤設計に終始しているのが現状である。その状況を打開するためには方法論から根本的に構築し直す必要があり、そのための有力なツールが「富岳」に代表される大規模並列計算機である。すなわち、計算機能力向上により現実的となった炭素繊維/樹脂レベルでのミクロスケールシミュレーションにより局所的応力場を正確に評価することで、CFRP の時間強度まで含めた信頼性評価を高精度で実行可能であると思われる。その新たな方法論により CFRP 部材の設計を合理化することを目標に、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法の開発

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、試作と破壊試験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。また炭素繊維が空間的不確定配置となる短繊維複合材の確率強度モデルの開発も行っている。

(2) 超高压水素容器の開発

燃料電池自動車普及の隘路となっている炭素繊維強化プラスチック製超高压水素燃料タンクの低価格化のため、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プロセス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機械学習を活用した最適解探索手法を開発した。

(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。炭素繊維配置の自由度を格段に向上させ、設計の自由度を

飛躍的に向上させる Automated Tape Laying などのファイバステアリング成形方法の実用性を向上させるため、連続加熱熱可塑性成形のシミュレーション手法を開発した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Yoshihiko Hangai, Keita Takahashi, Ryohei Nagahiro, Kenji Amagai, Takao Utsunomiya, Nobuhiro Yoshikawa: Fabrication of aluminum foam with complex shapes using pin screen mold and effect of arrangement of pins on its surface morphology, April 2020, Journal of Porous Materials, 27, pp.347–353. <https://doi.org/10.1007/s10934-019-00810-1>.
- 2) Qi Wu, Nobuhiro Yoshikawa, Hongzhou Zhai: Composite forming simulation of a three-dimensional representative model with random fiber distribution, April 2020, Computational Materials Science, Volume 182, 109780. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109780>.
- 3) Changhao Chen, Qi Wu, Ke Xiong, Hongzhou Zhai, Nobuhiro Yoshikawa and Rong Wang: Hybrid Temperature and Stress Monitoring of Woven Fabric Thermoplastic Composite Using Fiber Bragg Grating Based Sensing Technique, May 2020, Sensors, Vol.20, 3081. doi: 10.3390/s20113081.
- 4) Yoshihiko Hangai, Mizuki Ando, Masataka Ohashi, Kenji Amagai, Ryosuke Suzuki, Masaaki Matsubara, Nobuhiro Yoshikawa: Compressive properties of two-layered aluminum foams with closed-cell and open-cell structures, May 2020, Materials Today Communications, 24,101249. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101249>.
- 5) Yoshihiko Hangai, Masataka Ohashi, Ryohei Nagahiro, Kenji Amagai, Takao Utsunomiya and Nobuhiro Yoshikawa: Continuous Foaming of Multiple Aluminum Foam Precursors by Combining Conveyor and Optical Heating, July 2020, Materials Transactions, Vol.61, No.8, pp. 1703-1706. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-M2020137>.
- 6) Yoshihiko Hangai, Daisuke Kawato, Mizuki Ando, Masataka Ohashi, Yoshiaki Morisada, Takuya Ogura, Hidetoshi Fujii, Ryohei Nagahiro, Kenji Amagai, Takao Utsunomiya, Nobuhiro Yoshikawa: Nondestructive observation of pores during press forming of aluminum foam by X-ray radiography, December 2020, Materials Characterization, Vol.170, 110631. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2020.110631>
- 7) Qi Wu, Hongzhou Zhai, Nobuhiro Yoshikawa, Tomotaka Ogasawara and Naoki Morita: Localization simulation of forming-induced residual stresses of composite using prescribed boundary, March 2021, Journal of Reinforced Plastics and Composites. <https://doi.org/10.1177/0731684420941181>.

和文論文

- 1) 半谷禎彦, 都丸拓海, 大橋政孝, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 点群金型による発泡中のポーラスアルミニウムのプレス加工, 2020年5月, 軽金属, 第70巻, 第5号, pp.194-196. <https://doi.org/10.2464/jilm.70.194>.
- 2) 永井孝直, 半谷禎彦, 大橋政孝, 宇都宮登雄, 吉川暢宏: 光加熱を用いた異種合金からなるポー

ラスアルミニウムの発泡挙動, 2020年11月, 日本金属学会誌, 第84巻, 第11号, pp.360-363.
<https://doi.org/10.2320/jinstmet.J2020025>.

- 3) 大橋政孝, 半谷禎彦, 天谷賢児, 松原雅昭, 鈴木良祐, 宇都宮登雄, 吉川暢宏:複数ブリカーサ発泡過程のプレス加工によるポーラスアルミニウムの接合, 2020年11月, 軽金属, 70巻, 第11号, pp.517-522. <https://doi.org/10.2464/jilm.70.517>.
- 4) 安藤瑞季, 半谷禎彦, 松原雅昭, 鈴木良祐, 吉川暢宏, 吉川直人:焼結スペーサー法によるポーラスアルミニウム作製における顆粒状NaClを用いた除塩過程の短縮化, 2021年1月, 軽金属, 71巻, 第1号, pp. 68-70. <https://doi.org/10.2464/jilm.71.68>.
- 5) 諸橋寛海, 半谷禎彦, 青木祥宏, 藤井英俊, 吉川暢宏:摩擦攪拌接合を利用したブリカーサ作製とその発泡の連続プロセスの開発, 2021年2月, 軽金属, 71巻, 2号, pp.121-126. <https://doi.org/10.2464/jilm.71.121>.
- 6) 半谷禎彦, 安藤瑞季, 鈴木良祐, 松原雅昭, 宇都宮登雄, 吉川暢宏:異種合金粉末を原料としたスペーサー法により作製された3層構造ポーラスアルミニウムの圧縮特性, 2021年3月, 日本金属学会誌, 第85巻, 第2号, pp. 84-87. <https://doi.org/10.2320/jinstmet.J2020044>.
- 7) 美濃耀介, 森田直樹, 吉川暢宏, 北條正弘:樹脂部マイクロ応力評価に基づく一方向強化CFRP材料の統一的疲労寿命予測法, 2021年3月, 日本複合材料学会誌, 第47巻, 第2号, pp.73-79.

国際会議アブストラクト

- 1) Shinya Sato, Hiroshi Kobayashi, Hajime Fukumoto, Shigeru Maeda, Nobuhiro Yoshikawa and Hironobu Arashima: INTRODUCTION OF THE TECHNICAL DOCUMENT IN JAPAN FOR SAFETY USE OF TYPE2 PRESSURE VESSELS IN HYDROGEN REFUELING STATIONS, July 2020, Proceedings of the ASME 2020, Pressure Vessels & Piping Conference, PVP2020.
- 2) Nobuhiro Yoshikawa: Meso-scale Fracture Modeling of Carbon Fiber Reinforced Plastic, November 2020, APCFS2020, Asian-Pacific Conference on Fracture and Strength 2020, Abstract Book, p.3.

学会講演論文

- 1) 山本貴也, 半谷禎彦, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏:シンタクチックフォームで作製したポーラスAlへの点群型による形状付与, 2020年5月, 軽金属学会第138回春期大会講演概要, pp.7-8.
- 2) 大橋政孝, 半谷禎彦, 天谷賢児, 永廣伶平, 宇都宮登雄, 吉川暢宏:コンベヤー式光加熱装置を用いたブリカーサ法によるポーラスアルミニウムの連続作製, 2020年5月, 軽金属学会第138回春期大会講演概要, pp.13-14.
- 3) 諸橋寛海, 半谷禎彦, 藤井英俊, 青木祥宏, 吉川暢宏:摩擦攪拌接合を利用したADC12ブリカーサ作製と発泡の同時プロセスの開発, 2020年5月, 軽金属学会第138回春期大会講演概要, pp.15-16.
- 4) 安藤瑞季, 半谷禎彦, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏:摩擦圧接を用いたポーラスアルミニウムと樹脂の接合, 2020年5月, 軽金属学会第138回春期大会講演概要, pp.359-360.
- 5) 大塚駿, 半谷禎彦, 永廣伶平, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏:発泡直後のポーラスアルミニ

ウムと金属板の塑性流動を利用した接合, 2020年5月, 軽金属学会第138回春期大会講演概要, pp.429-430.

- 6) 永井孝直, 半谷禎彦, 大橋政孝, 永廣伶平, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏:異種合金からなる傾斜機能ポーラス金属の作製, 2020年5月, 軽金属学会第138回春期大会講演概要, pp.471-472.
- 7) 安藤瑞季, 半谷禎彦, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏, 吉川直人:塩化ナトリウムをスパーサーとして作製したポーラスアルミニウム-樹脂の接合, 2020年6月, 日本海水学会第71年会, 日本海水学会誌, 第74巻, 第3号, p.165.
- 8) 安藤瑞季, 半谷禎彦, 鈴木良祐, 松原雅昭, 吉川暢宏, 吉川直人:スパーサー法によるポーラスアルミニウムの作製〜顆粒NaClスパーサーを用いた除塩過程の高速化〜, 2020年8月, 軽金属学会関東支部若手研究者ポスター発表会, (No.21).
- 9) 大橋政孝, 半谷禎彦, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏:コンベヤー式光加熱装置を用いたADC12ポーラスアルミニウムの連続作製, 2020年8月, 軽金属学会関東支部若手研究者ポスター発表会, (No.22).
- 10) 永井孝直, 半谷禎彦, 山本貴也, 大塚駿, 吉川暢宏:発泡直後のプレス加工による異種合金ポーラスアルミニウムの接合, 2020年8月, 軽金属学会関東支部若手研究者ポスター発表会, (No.24).
- 11) 木村達郎, 横山卓矢, 竹本真一郎, 吉川暢宏:機械学習を用いた熱可塑および熱硬化樹脂の動的強度予測, 2020年9月, 第45回複合材料シンポジウム予稿集, B208.
- 12) 木村達郎, 横山卓矢, 吉川暢宏:機械学習を用いた熱可塑性樹脂の動的強度予測, 2020年10月, 第13回材料の衝撃問題シンポジウム予稿集, 14.
- 13) 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ブリカーサ作製とその発泡の連続工程の開発, 2020年10月, 日本鋳造工学会第176回全国講演大会, 誌上講演大会, 講演番号No.85, 概要集pp.183-185.
- 14) 諸橋寛海, 半谷禎彦, 藤井英俊, 青木祥宏, 吉川暢宏:摩擦攪拌接合のみで作製するポーラスAlの攪拌条件の検討, 2020年10月, 日本鋳造工学会第176回全国講演大会, オンライン講演大会, 講演番号No.86, 概要集p.186.
- 15) 木村光男, 吉川暢宏:水素利用機器への溶接継手適用可能性(高圧水素技術研究専門委員会), 2020年11月, 日本高圧力技術協会, 令和2年度秋季講演会概要集, pp.76-84.
- 16) 半谷禎彦, 鈴木滉大, 大橋政孝, 天谷賢児, 宇都宮登雄, 吉川暢宏:ローラーを用いた発泡中のポーラスアルミニウムへの形状付与の検討, 2020年11月, 第71回塑性加工連合講演会講演論文集, pp.241-242.
- 17) 永井孝直, 半谷禎彦, 吉川暢宏:異種合金ポーラスアルミニウムのプレス接合直後の横方向振動量が及ぼす接合への影響, 2020年11月, 日本機械学会・第28回機械材料・材料加工技術講演会(M&P2020), (No. 161).
- 18) 横山卓矢, 吉川暢宏:機械学習法に基づくCFRP製圧力容器の最適設計技術の開発, 第12回日本複合材料会議 JCCM-12講演論文集, 1C-06.

- 19) 李然, 吉川暢宏, 鄧飛: TypeIV 高圧水素容器のメゾスケール解析, 第12回日本複合材料会議 JCCM-12 講演論文集, 2C-15.

(2) 研究プロジェクト

民間等との共同研究

- 1) CFRP ファンブレード構造の疲労解析技術に関する研究(その3)
- 2) 織物 CFRP 材料の成形特性評価
- 3) 有限要素法によるフレキシブルホースの強度評価に関する研究
- 4) 鋼製ワイヤー平織りジャケットの最適設計
- 5) 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」

半場藤弘研究室 流体物理学

半場藤弘研究室では、乱流シミュレーション技術の開発のため、ラージ・エディ・シミュレーション (LES) モデルとレイノルズ平均 (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。特にフィルター平均速度を用いて、より正確な乱流エネルギー密度の定式化に取り組んでいる。

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。安定化混合 SGS モデルに着目し、非等方項の役割を考察し物理機構を解明するとともにモデルの改良を試みた。また乱流ヘリシティの RANS モデルの改良のため、回転チャンネル乱流の計算を行いヘリシティの生成と輸送機構を考察した。

(2) 電磁流体乱流の物理とモデリング

非圧縮性流体の乱流モデルは長年にわたって開発が進められてきたが、燃焼、高速流、電磁流体、混相流など複雑な物理現象が加わった場合には必ずしも正確な乱流モデルが開発されていない。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。さらに圧縮性電磁流体乱流における傾磁場効果について理論的に考察し、超新星爆発における輸送現象の解明と予測に取り組んだ。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) K. Inagaki, H. Kobayashi: Role of various scale-similarity models in stabilized mixed subgrid-scale model, July 2020, Physics of Fluids, Vol.32, pp.075108 1-18.

国際会議予稿集

- 1) N. Yokoi: Magnetoclinicity: Density variance effects in large-scale instability in magnetohydrodynamic turbulence, May 2020, Proceedings of European Geosciences Union General Assembly, EGU2020-11522.
- 2) N. Yokoi: Modeling plume and shock in convective turbulence: Non-equilibrium and supersonic effects, December 2020, Proceedings of American Geophysical Society Fall Meeting 2020, NG008-0009 (716471).
- 3) N. Yokoi, S. M. Tobias: Magnetoclinicity instability, March 2021, Progress in Turbulence IX, Springer Proceedings in Physics, 33-1-6.

学会講演論文

- 1) 稲垣和寛:一様乱流におけるヘリシティが相似則に及ぼす効果について, 2020 年 9 月, 日本物理学会 2020 年秋季大会概要集, 8aL3-8.
- 2) 半場藤弘:フィルター平均速度相関を用いた非一様乱流の定式化の試み, 2020 年 12 月, 第 34 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, A03-4.
- 3) 堀江真惟人, 半場藤弘:壁垂直軸周りの回転を与えたチャネル乱流における乱流ヘリシティの生成と輸送, 2020 年 12 月, 第 34 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, A10-5.
- 4) 稲垣和寛, 小林宏充:安定化混合モデルにおける SGS 乱流エネルギーの代数表現の試行, 2020 年 12 月, 第 34 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, A03-2.
- 5) 滝脇知也, 横井喜充, 政田洋平:超新星爆発における輸送現象, 2020 年 12 月, 第 37 回プラズマ核融合学会年会, 02Aa-03.
- 6) 政田洋平, 横井喜充, 滝脇知也:太陽熱対流の非局所性とその輸送ダイナミクスへの影響:理論モデルの検討, 2020 年 12 月, 第 37 回プラズマ核融合学会年会, 2P-03.

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(B)「乱流超新星:自己無撞着な乱流モデルで解き明かす星の終末」
- 2) 基盤研究(C)「乱流の渦拡散近似の空間的・時間的非局所性の解明とモデリング」

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 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。

(2) 機械学習を取り入れた代理モデルによるシミュレーションの不確かさ解析と高速化

血流シミュレーションの臨床応用に向けた大きな課題として、医用画像や医用計測データが持つ不確かさの反映と、シミュレーションに要する時間の長さがある。そこで、医用データに基づいたモデルパラメータの不確かさを考慮し、予測結果のばらつきを確率分布として評価するための手法を構築している。特に、従来のシミュレーションに代わって高速に血行動態を予測する深層学習モデルの作成に取り組み、膨大なケーススタディを通した不確かさ評価を一般的な PC でも即時に行えるような、実用性に富む手法開発を目指している。

具体的には、1D-0D シミュレーションにより入力(条件)と出力(結果)のデータセットを作成し、それを用いて機械学習を行うことにより、任意の解析条件に対して血流循環を迅速に予測する「代理モデル」を構築した。これにより、手術に必要な血行動態の情報を確率分布として提示でき、より安全で安心な

手術計画が可能となるだけでなく、血流シミュレーションの不確かさ解析をデスクトップ PC でも短時間で実施可能としている。

(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) Kobayashi, M., Hoshina, K., Nemoto, Y., Takagi, S., Shojima, M., Hayakawa, M., Yamada, S., Oshima, M.: A penalized spline fitting method to optimize geometric parameters of arterial centerlines extracted from medical images, 2020, Computerized Medical Imaging and Graphics, Vol. 84, pp.101746, doi: 10.1016/j.compmedimag.2020.101746.
- 2) Yamada S., Ishikawa M., Ito H., Yamamoto K., Yamaguchi M., Oshima M., Nozaki K.: Cerebrospinal fluid dynamics in idiopathic normal pressure hydrocephalus on four-dimensional flow imaging, 2020, European Radiology, Vol. 30(8), pp. 4454-4465.
- 3) Natsume, T., Oishi, M., Oshima, N., Mukai, N.: Droplet Formulation Method for Viscous Fluid Injection Considering the Effect of Liquid-Liquid Two-Phase Flow, 2021, ITE Transactions on Media Technology and Applications, Vol. 9(1), pp.33-41.
- 4) Yamada S., Ito H., Ishikawa M., Yamamoto K., Yamaguchi M., Oshima M., Nozaki K.: Quantification of oscillatory shear stress from reciprocating CSF motion on 4D flow imaging, 2021, American Journal of Neuroradiology, Vol. 42(3), pp.479-486.
- 5) Matsuura, S., Takayama, T., Yuhn, C., Oshima, M., Shirasu, T., Akai, T., Isaji, T., Hoshina, K.: Carotid Stump Pressure and Contralateral Internal Carotid Stenosis Ratio During Carotid Endarterectomies: 1D-0D Hemodynamic Simulation of Cerebral Perfusion, 2021, Annals of Vascular

Diseases, Vol. 14(1), pp.1-7.

和文論文

- 1) 大島まり, 山田茂樹:脳神経外科と数理学(8)脳血管疾患における血流の数値流体力学, 2020, 脳神経外科, Vol.48(8), pp.750-757.
- 2) 大島まり:血流シミュレーションによる内頸動脈狭窄症の脳循環に与える影響の検証, 2021, 化学工学, Vol. 85(2), pp.84-86.

(2)研究プロジェクト

民間等との共同研究

- 1) 「3D 構造ステントにおける流体解析」

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、リファクタリングを行ったうえ、コレスキーベクトルの mmap 化などを行った。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、1 次元的ではなく活性中心から拡張する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。本年度は引き続き、モチーフを持つタンパク質で相互作用計算と評価を行った。

(5) 光活動性黄色タンパク質の電子状態研究

光活動性黄色タンパク質(PYP)は光受容タンパク質で、活性中心である p-クマル酸(pCA)が光励起によって高速に構造変化を引き起こし、PYP は光センサーとしての役割を果たす。この光異性化反応に

ついてほとんどの計算化学は発色団近傍のみを量子化学的に取り扱っており、周辺タンパク質との相互作用は対象とされていなかった。本研究では、PYP 全体の電子構造解明を目指し、pCA と周辺アミノ酸残基の軌道間相互作用を明らかにした。

(6) SARS-CoV2 タンパク質の電子状態解析

SARS-CoV2 の複数のタンパク質の全電子計算を実行中である。本研究は来年度も引き続き行う。

(7) RNA ポリメラーゼの電子状態解析

RNA ポリメラーゼの効率を上げるためのミューテーション実験の解析のために、RNAP/DNA/mRNA 複合体の電子構造計算を実施した。本研究は岡山大学の田村教授との共同研究である。

(8) 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、東京都市大学三宅准教授、九州工業大学小迫准教授、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) Saori Ogawa, Hitomi Shimidzu, Koji Fukuda, Naoki Tsunekawa, Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato, Kei Yura, Tomohisa Hasunuma, Kozo Ochi, Michio Yamamoto, Wataru Sakamoto, Kentaro Hashimoto, Hiroyuki Ogata, Tadayoshi Kanao, Michiko Nemoto, Kenji Inagaki, Takashi Tamura: “Multiple mutations in RNA polymerase β -subunit gene (rpoB) in *Streptomyces incarnatus* NRRL8089 enhance production of antiviral antibiotic sinefungin: modeling rif cluster region by density functional theory”, Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, 2021 in press.
- 2) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: “Interaction Energy Analysis Based on Canonical Kohn-Sham Molecular Orbitals Calculation of Protein”, AIP Conference Proceedings, 2343, 020007, 2021.

国際会議アブストラクト

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: “Interaction Energy Analysis Based on Canonical Kohn-Sham Molecular Orbitals Calculation of Protein (invited)”, 15th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE2020), Heraklion, Greece, April 29- May 3, 2020.

学会講演論文

- 1) 平野敏行, 佐藤文俊: “大規模系量子化学計算への挑戦“, 令和 3 年電気学会全国大会シンポジウム, 3 月 21 日, 2021.
- 2) 前田大陸, 平野敏行, 佐藤文俊: “正準分子軌道計算による光活動性黄色タンパク質の電子構造解析“, 分子科学オンライン討論会, 9 月 14-17 日, 2020.

総説・解説・紀要

- 1) 佐々木光, 平野敏行, 佐藤文俊: “インスリン様成長因子 1 とインスリンの電子構造の比較”, 生産研究, 72, 239, 2020.
- 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」”, 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.23, No.1, 2021.

(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) 「量子コンピューティング向けアルゴリズムの開発」
- 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) ガラスを構成する元素の配位数分布解析と分相組織形成過程の高温その場観察

ガラスは我々の生活には欠かせない材料である。一方でその原子構造は「アモルファス」であり、原子が長距離周期性を持たない複雑な構造を有している。ガラス材料を構成する元素の局所環境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。

走査透過型電子顕微鏡とEELS計測を行った。得られたEELSスペクトルのAlからシグナル(Al-L_{2,3}端)において、特徴的な変化が見られ、同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で解析し、ガラス中のAlの配位環境をナノメートルレベルの局所環境を明らかにすることに成功した。

さらに、ガラスの分相組織形成の高温その場観察を行った。ガラスの分相組織が高温下で成長していく過程を追跡し、スピノーダル分解中期過程における組成分布をしらべた。その結果、中期過程に形成された小型の分相組織はランダムなブラウン運動をしているのではなく、分相形成初期過程に形成されたパスを経由して運動することを明らかにした。

高い空間分解能により物質の高温挙動や配位状態を解析できる本手法は、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。

実験で得られるELNES/XANESから情報を抽出するために理論計算が用いられてきた。理論計算の発展により今では原子配置と元素の情報のみからELNES/XANESを再現することが可能である。しかし、ELNES/XANESの理論計算は膨大な計算量と専門的な知識を必要とする。基底状態の計算結果からELNES/XANESスペクトルを正確に予測できれば、従来の計算が高速になるだけでなく、これま

で解析することができなかった複雑な系の解析が可能になると期待される。そこで、ニューラルネットワークを利用して、基底状態の部分状態密度から ELNES/XANES スペクトルを予測するための手法を開発した。さらに同手法を利用することで励起状態に関する基礎的な知見を得ることができた。

さらに、XAS/EELS スペクトルから動径分布関数を取得するためには、吸収端から数十 eV から数千 eV の領域 (EXAFS/EXELFS) を取得し、得られたスペクトルから振動を抽出して、フーリエ変換する必要がある。一方で、吸収端近傍の ELNES/XANES 領域においても結合距離や配位数などの情報が含まれている可能性がある。今年、機械学習のニューラルネットワークを用い、吸収端近傍微細構造からの動径分布関数取得を行った。

以上の研究から、スペクトルインフォマティクスの分野を開拓することが出来た。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) T. Mizoguchi and S. Kiyohara: Machine learning approaches for ELNES/XANES, *Microscopy*, 69 (2020) 92-109. doi.org/10.1093/jmicro/dfz109. [Open Access](#).
- 2) R. Otani, S. Kiyohara, K. Shibata and T. Mizoguchi: Prediction of interface and vacancy segregation energies at silver interfaces without determining interface structures" *Applied Physics Express*, 13 (2020) 065504-1-6. [Open Access](#).
- 3) K. Liao, M. Haruta, A. Masuno, H. Inoue, H. Kurata, and T. Mizoguchi: Real-Space Mapping of Oxygen Coordination in Phase-Separated Aluminosilicate Glass: Implication for Glass Stability, *ACS Applied Nano Materials*, 3 (2020) 5053-5060 DOI:10.1021/acsanm.0c00196.
- 4) S. Kiyohara, M. Tsubaki, and T. Mizoguchi: Learning excited states from ground states by using an artificial neural network, *npj Comp. Mater.*, 6 (2020) 68-1-6 DOI:10.1038/s41524-020-0336-3 [Open Access](#).
- 5) S. Yamagata, I. Takahara, M. Wang, T. Mizoguchi, and S. Yagi: EQCM Analysis of Intercalation Species into Graphite Positive Electrodes for Al Batteries, *J. Alloy and Comp.*, 846 (2020) 156469-1-7.
- 6) K. Nakazawa, K. Mitsuishi, K. Shibata, S. Amma, and T. Mizoguchi: Local thickness and composition measurements from scanning convergent-beam electron diffraction of a binary non-crystalline material obtained by a pixelated detector, *Ultramicroscopy*, 217 (2020) 113077-1-8 [Open Access](#).
- 7) S. Kiyohara and T. Mizoguchi: Radial distribution function from X-ray absorption near edge structure with an artificial neural network, *J. Phys. Soc. Jpn (Letter)*, 89 (2020) 103001-1-4. [Open Access](#).
- 8) K. Nakazawa, S. Amma, and T. Mizoguchi: In situ observation of the dynamics in the middle stage of spinodal decomposition of a silicate glass via scanning transmission electron microscopy, *Acta Mater.* 200 (2020) 720-726. [Open Access](#).
- 9) M. Tsubaki and T. Mizoguchi: Quantum Deep Field: Data-Driven Wave Function, Electron Density Generation, and Atomization Energy Prediction and Extrapolation with Machine Learning, *Phys. Rev. Lett.*, 125 (2020) 206401-1-6. [Open Access](#).

- 10) K. Liao, A. Masuno, A. Taguchi, H. Moriwake, H. Inoue, and T. Mizoguchi: Revealing Spatial Distribution of Al-Coordinated Species in a Phase-Separated Aluminosilicate Glass by STEM-EELS, *J. Phys. Chem. Lett.*, 11 (2020) 9637–9642. [Open Access](#).

和文論文

- 1) 溝口照康, 清原慎: データ駆動型内殻電子励起分光スペクトル (ELNES/XANES) 解析, *日本化学会情報化学部会誌*, 38 (2020) 16-19.
- 2) 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 (2020) 134-138.
- 3) 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 (2020) 35-41.

国際会議アブストラクト

- 1) K. Nakazawa, K. Mitsuishi, S. Amma, K. Shibata and T. Mizoguchi: Non-spectroscopic method for simultaneous determinations of thickness and composition of amorphous materials via 4D-STEM, *Microscopy & Microanalysis 2020 Meeting*, online, Aug. 2, 2020.
- 2) K. Kikumasa, S. Kiyohara, K. Shibata and T. Mizoguchi: Quantitative prediction of organic molecular properties from ELNES via artificial neural network, *Microscopy & Microanalysis 2020 Meeting*, online, Aug. 5th, 2020.
- 3) K. Liao, A. Masuno, H. Inoue, T. Mizoguchi: Nano-meter Scale Observation of Local Network Structure in Aluminosilicate Glass via Vibrational EELS, *Microscopy and Microanalysis 2020 Meeting (M&M2020)*, online, Aug. 2020.
- 4) K. Liao, K. Shibata, T. Mizoguchi: Probing Thermal Expansion Coefficient of SrTiO₃ Grain Boundaries by In-Situ STEM-EELS, *2020 Materials Research Society Fall Meeting (MRS Fall)*, online, Nov. 2020.
- 5) E. Suzuki, K. Shibata and T. Mizoguchi: Prediction of Change of DOS Associated with Bond Formation Using Machine Learning, *2020 MRS Fall Meeting & Exhibit*, Nov.27, 2020.
- 6) K. Kikumasa, S. Kiyohara, K. Shibata and T. Mizoguchi: Neural Network Approach for Predicting Organic Molecular Properties from core-loss spectroscopy, *2020 MRS Fall Meeting & Exhibit*, Nov., 2020.

著書

- 1) T. Mizoguchi: *Machine Learning in Chemistry: The Impact of Artificial Intelligence*, Royal Society of Chemistry publication (2020), Prof. Hugh M Cartwright (Oxford Univ.) edited Chapter 17, "Machine Learning for Core-loss Spectrum" ISBN 978-1-78801-789-3, DOI: 10.1039/9781839160233.
- 2) 溝口照康: 東京大学工学教程 基礎系化学 分析化学 II 分光分析, 丸善出版 (2020) 第 9 章 「X 線分光法」執筆担当, ISBN 978-4-621-30499-0.

学会講演論文

- 1) 中澤克昭, 安間伸一, 溝口照康:4D-STEM を用いた非晶質の組成・試料厚同時マッピング, 公益社団法人日本顕微鏡学会第 76 回学術講演会, 5/24, 2020 (口頭発表, 掲載のみ).
- 2) 中澤克昭, 三石和貴, 安間伸一, 安間伸一, 溝口照康:4D-STEM による非晶質材料の組成・試料厚計測, 公益社団法人日本セラミックス協会, 第 33 回秋季シンポジウム, オンライン, 9/3, 2020 (口頭発表).
- 3) 菊政翔, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康:有機分子におけるスペクトル-物性相関, 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会, オンライン, 9/9, 2020.
- 4) 鈴木叡輝, 柴田基洋, 溝口照康:機械学習を用いた結合形成に伴う状態密度変化の予測, 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会, オンライン, 9/9, 2020.
- 5) 謝耀枢, 溝口照康, 柴田基洋:ダイヤモンド型構造における安定・準安定粒界相の探索”(Determination of Stable and Meta-stable Grain Boundary Phases in Diamond-structured Materials), 日本金属学会 2020 年秋期講演大会 Online, 9/18, 2020.
- 6) K. Liao, A. Masuno, H. Inoue, T. Mizoguchi: Real-space analysis of Al and O distribution in Aluminosilicate Glass, Fall Meeting of The Ceramic Society of Japan, online, Sept. 2020.
- 7) 廖クン硯, 柴田基洋, 溝口照康:電子エネルギー損失分光法によるセラミック中熱膨張率の局所解析, 日本セラミックス協会 2021 年年会, 3/25, 2021.
- 8) 謝耀枢, 柴田基洋, 溝口照康:ダイヤモンド構造材料の対称傾角粒界における準安定構造の相転移, 日本セラミックス協会 2021 年年会, 3/25, 2021.
- 9) 菊政翔, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康:炭素 K 端 ELNES/XANES を記述子とした分子物性予測, 日本セラミックス協会 2021 年年会, 3/25, 2021.
- 10) 鈴木叡輝, 柴田基洋, 溝口照康:結合前の電子状態から結合物性を予測する機械学習モデルの開発”, 日本セラミックス協会 2021 年年会, 3/25, 2021.

(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) 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」
- 2) 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」
- 3) CREST 主たる共同研究者 「原子分解能観察によるソフト/ハード界面の接着・破壊機構の解明」

大岡龍三研究室 都市エネルギー工学

大岡研究室では、建築・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ウイルス飛散とその制御に関する研究

2019 年末に始まったコロナ禍は、2021 年4月まで世界で 1 億 4000 万人以上の感染と 300 万人の死亡をもたらし、深刻かつ世界的な公衆衛生災害となっている。新型コロナウイルスの媒介として、会話・咳・くしゃみを介した感染者から噴出された気流と飛沫・飛沫核は、ウイルス感染において重要な経路であると考えらる。本研究室では、会話・咳・くしゃみ・の気流と飛沫・飛沫核の特徴及び分布の解を実験と数値解析で説明するとともに、換気や空気清浄機、マスクによる環境制御効果について検討を行っている。

(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) Chao Lin, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Taiki Sato, Maiko Arai: Wind tunnel experiment on high-buoyancy gas dispersion around isolated cubic building, July 2020, Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics.
- 2) Wonseok Oh, Ryoza Ooka, Junta Nakano, Hideki Kikumoto, Osamu Ogawa, Wonjun Choi: Development of physiological human model considering mist wettedness for mist-spraying environments, August 2020, Building and Environment.
- 3) Mengtao Han, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto: Validation of lattice Boltzmann method-based large-eddy simulation applied to wind flow around single 1:1:2 building model, September 2020, Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics.
- 4) Qi Zhou, Ryoza Ooka: Influence of data preprocessing on neural network performance for non-isothermal indoor airflow prediction, September 2020, Energy and Buildings.
- 5) Doyun Lee, Ryoza Ooka, Shintaro Ikeda, Wonjun Choi, Younghoon Kwak: Model predictive control of building energy systems including thermal energy storage in response to occupancy variations and time-variant electricity prices, September 2020, Energy and Buildings.
- 6) Wonjun Choi, Ryoza Ooka, Masanori Shukuya: Unsteady-state exergetic performance comparison of externally and internally insulated building envelopes, September 2020, International Journal of Heat and Mass Transfer.
- 7) Bingchao Zhang, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto: Analysis of turbulent structures around a rectangular prism building model using spectral proper orthogonal decomposition, November 2020, Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics.

和文論文

- 1) 呉元錫，大岡龍三，中野淳太，菊本英紀，小川修，崔元準：屋外およびミスト噴霧環境での環境指標の開発（その6）生理反応予測モデルの開発と環境指標への適用，2020.09，空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集．
- 2) 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4報）異なる前処理手法が予測精度に及ぼす影響，2020.09，空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集．

- 3) 胡紅, 菊本英紀, 大岡龍三:住宅実験棟を用いた自然換気量評価手法に関する比較研究(第1報) トレーサーガス濃度法を模擬した風洞実験とCFD解析, 2020.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 4) 李度胤, 大岡龍三, 松田侑樹, 池田伸太郎, 崔元準:空調熱源システムにおける人工知能を用いたモデル予測制御に関する研究(その3)モデル予測制御の実システムへの適用に関する先行実験, 2020.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 5) 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 着衣熱伝達率の差異が温熱快適性に及ぼす影響, 2020.09, 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, 崔元準:ニューラルネットワークによる熱容量が異なる建物の自然室温の予測 学習曲線による ANN と LSTM に必要な学習データ量の推定, 2020.09, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 7) 韓夢濤, 大岡龍三, 菊本英紀:格子ボルツマン法を用いた建築周辺気流のLES(その3)壁関数境界条件の検証, 2020.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 8) 呉元錫, 崔元準, 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5)ミスト濡れ率の計測方法の開発, 2020.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 9) 林超, 大岡龍三, 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5)LESを用いた予測の精度検証, 2020.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 10) 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3)二次元非等温流れ予測の実現, 2020.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 11) 胡紅, 菊本英紀, 大岡龍三:自然換気量予測の不確かさ評価に関する研究(その1)住宅実験棟を対象とした風洞実験, 2020.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 12) 松田侑樹, 大岡龍三, 李度胤, 池田伸太郎, 崔元準:空調熱源システムにおける人工知能を用いたモデル予測制御に関する研究(その1)実験装置の概要および事前調節, 2020.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 13) 李度胤, 大岡龍三, 松田侑樹, 池田伸太郎, 崔元準:空調熱源システムにおける人工知能を用いたモデル予測制御に関する研究(その2)実運転データを用いたANN予測モデルの構築, 2020.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 14) 崔元準, 大岡龍三:地中熱応答予測モデルのグローバル感度解析 パラメータ不確かさがボアホール熱抵抗の推定精度に及ぼす影響, 2020.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 15) 文可, 大岡龍三, 崔元準:ニューラルネットワークによる熱容量が異なる建物の自然室温の予測データ量とデータノイズによる ANN と RNN の予測性能の比較, 2020.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 16) 中井麻友香, 樋山恭助, 沢潟裕一, 大浦豊, 朝岡幸康:ダイナミックインシュレーションを用いた住宅向け窓システムの開発(その24)日射遮蔽物の設置による結露リスクの検討, 2020.09, 日本建築学会大会学術講演梗概集.

- 17) 韓夢濤, 大岡龍三, 菊本英紀:三次元キャビティ混合対流を対象とした格子ボルツマン法 (LBM) の検証, 2020.09, 日本流体力学会年会予稿集.
- 18) 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5)ニューラルネットワークにおける重みの初期化による影響の検討, 2020.09, 日本流体力学会年会予稿集.
- 19) 張秉超, 大岡龍三, 菊本英紀:POD モードに基づいた角柱建物モデルの背後における渦放出の動的システム同定, 2020.09, 日本流体力学会年会予稿集.

国際会議予稿集

- 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, April 2020, WINDSOR 2020.
- 2) Qi Zhou, Ryoza Ooka: Comparison of different deep neural network architectures for isothermal indoor airflow prediction, May 2020, Building Simulation.
- 3) Wonseok Oh, Ryoza Ooka, Sihwan Lee: Numerical investigation of droplets and droplet nuclei dispersion by the indoor ventilation, November 2020, Indoor Air 2020.

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(A)「建築エネルギーシステムを最適化する AI と物理モデルを融合したデジタルツインの構築」

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) 高温排気ガスの大気拡散に関する実測および対策技術検討
- 3) 大規模展示場における空調制御・最適化システムの開発
- 4) 熱源の運用最適化手法に関する研究

受託研究

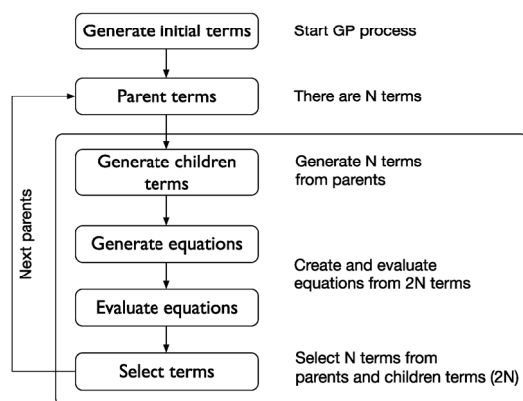
①公的資金

- 1) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構「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」

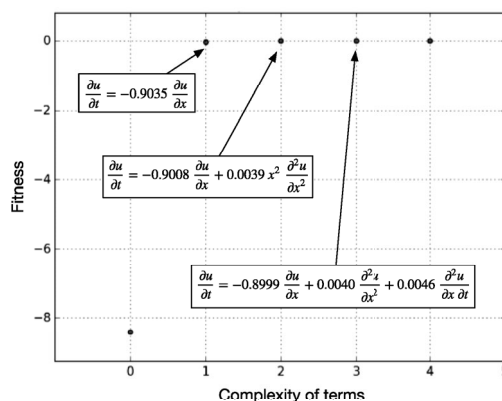
自然科学の研究分野では、現象を表す支配方程式は数理的な解釈と合わせて偏微分方程式の形で記述されることが多い。しかしながら、支配方程式の形式は多くの実験や観測データと理論的な考察により構築されてきたものであり、その式の形を得るために長い年月を必要とした。現代の高性能なセンサーと測定技術により得られた質の高いデータを基にして方程式の形が得られるならば、現象モデリングに役立つことは自明である。多種多様なデータから意味のある知識を抽出する方法論の研究は「知識発見」として、数理的な方法論やプログラムの開発が行われてきた。特に、データから方程式を見いだす研究領域は **Equation Discovery** として知られている。これまでも様々な手法が提案されてきたが、我々は発見的な手法である遺伝的プログラミングを用いて、記号回帰問題として定式化するアプローチを採用している。生物の進化論的なメカニズムを援用した遺伝的アルゴリズムと記号回帰に適した遺伝的プログラミングにおいて、項の生成過程で偏微分項を自動的に生成する機構を提案し、生成された方程式をデータと比較・評価することにより方程式を推定する。

検証方法として、シミュレーションで作成したデータに対して遺伝的プログラミングを実施し、元の方程式を推定できるかを調べた。多数の試行を行い、その中で最も評価値の高いものを選択していく。その結果をパレート解として表し、結果を吟味する。対象とする方程式として、線形移流方程式、拡散方程式、非線形 Burger's 方程式を対象とした。図には、線形移流方程式で初期条件としてサイン波を与えた場合のデータから推定した結果を示す。線形移流方程式の形は $\frac{\partial u}{\partial t} = c \frac{\partial u}{\partial x}$ ($c=0.9$) であり、工数 1 のときに正しい微分項の形式とほぼ正しい係数(誤差 0.3%)の解が得られている。推定する項の数が増えていくと元のデータをよく表現する形式が得られるが、余分な項として現れる。この場合、適合度が高く、最も項数の少ないものが最適な推定解となる。ここでは、線形移流方程式の例を示しているが、他の方程式についても正しい推定ができています。

以上のように、データからそのデータをよく表現する微分方程式を再現する方法を開発した。この技術は、新しい現象モデリングやサロゲートモデルの構築に役立てることができ、様々な応用が期待できる。



遺伝的プログラミングの手続き



パレート解

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Tomohiro Kawanabe, Kazuma Hatta, and Kenji Ono: ChOWDER: A New Approach for Viewing 3D Web GIS on Ultra-High-Resolution Scalable Display, 2020 IEEE International Conference on Cluster Computing, CLUSTER 2020, 412-413, doi:10.1109/CLUSTER49012.2020.00055, 2020.
- 2) Xin Liang, Hanqi Guo, Sheng Di, Franck Cappello, Mukund Raj, Chunhui Liu, Kenji Ono, Zizhong Chen, Tom Peterka: Toward Feature-Preserving 2D and 3D Vector Field Compression, 2020 IEEE Pacific Visualization Symposium, PacificVis 2020, doi:10.1109/PacificVis48177.2020.6431, 81-90, 2020.
- 3) Kenji Ono, Jorji Nonaka, Tomohiro Kawanabe, Masahiro Fujita, Kentaro Oku, and Kazuma Hatta: HIVE: A cross-platform, modular visualization framework for large-scale data sets, Future Generation Computer Systems, Vol. 112, 875-883, <https://doi.org/10.1016/j.future.2020.06.056>, 2020.
- 4) Shinya Kimura, Shuta Miura, Toshihiro Sera, Hideo Yokota, Kenji Ono, Denis J. Doorly, Robert C. Schroter, and Gaku Tanaka: Voxel-based simulation of flow and temperature in the human nasal cavity, Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, pp. 1-8, doi:10.1080/10255842.2020.1836166, 2020.

学会講演論文

- 1) 小野謙二, 古賀壱成: 遺伝的プログラミングによる支配方程式の推定, Transactions of JSCES, <https://doi.org/10.11421/jscs.2020.20201004>, 2020.
- 2) Mitsuhiro Miyagi, Hajime Yamamoto, Toshiya Takami, Mikio Iizuka, Kenji Ono, Kengo 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.

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マルチスケールシミュレーション技術を駆使し、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) SiC に対するニューラルネットワーク型原子間ポテンシャル構築とクリープ特性解析

半導体・磁気デバイスや構造材料など、様々な材料の高性能化に寄与するための原子モデルシミュレーションを可能にする高精度原子間ポテンシャルの構築を行っている。本年度は、パワーデバイスやセラミック複合材として広い応用範囲を持つ SiC を対象に、多元系への拡張性など高い汎用性を有する人工ニューラルネットワークモデルに基づいた新しい原子間ポテンシャルを構築することに成功した。さらに、これを用いた分子動力学計算により主にクリープ変形挙動の解析を行い、クリープ特性としてよく知られる応力とひずみ速度のべき乗関係が分子動力学計算により再現できることを示した。

(2) ポリマー変形・破壊挙動に及ぼす絡み合い効果の粗視化分子動力学解析

構造材料としても広い応用先を持つポリマー材料の機械的特性発現メカニズムを明らかにすることを目的とした、粗視化分子動力学解析を行っている。本年度は、ポリカーボネートの引張り変形・破壊の粗視化分子動力学解析により、分子鎖長(分子量)が応力-ひずみ関係に及ぼす影響を調べることで、絡み合い効果が強度特性に及ぼす影響を検討した。分子量は降伏応力には大きな影響を及ぼさないのに対して、降伏後の応力変化には顕著な影響が現れる。すなわち、分子量が大きい場合には絡み合い効果によってボイドの生成が抑制され、降伏応力に比べて極めて大きな局所応力を受け持つことができる。これがポリカーボネートの高い破壊靱性の大きな要因となっており、絡み合い効果がポリマーにおける脆性-延性遷移の主因の一つであることが示された。

(3) 耐環境セラミックスコーティング材の均質化モデルの提案と機械的信頼性評価

次世代航空機エンジンのタービンブレード材としてセラミック基複合材料(CMC)が注目されているが、CMC では高温水蒸気環境での減肉を防ぐための耐環境コーティング(EBC)が必須となる。EBC は異種材料の多層積層構造を有するため、熱応力による複雑な力学状態を高精度かつ効率的に解析することが機械的信頼性を確保するために重要である。我々は熱衝撃緩和のための Yb シリケートコラム層を有する EBC 構造を対象に均質化モデルを提案することで、有限要素法解析によって界面き裂のエネルギー解放率を効率よく計算できる枠組みを提示するとともに、本モデルによってエネルギー解放率が安全側で評価できることを実証した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) K. Tonotsuka, Y. Todaka, N. Adachi, M. Horii, K. Toda, M. Mitsuhashi, M. Iwasaki, Y. Shiihara, Y. Umeno, M. Nishida and H. Nakashima: Effect of lattice defects on tribological behavior for high friction coefficient under TCP added PAO lubrication in nanostructured steels, 2020, ISIJ International, Vol. 60, No. 6, pp. 1358-1365.
- 2) Y. Umeno, A. Kubo and J.-M. Albina: Coarse-grained molecular dynamics simulation of deformation and fracture in polycarbonate: effect of molar mass and entanglement, 2020, Theoretical and Applied Fracture Mechanics, Vol. 109, 102699.
- 3) M. Sato, K. Ishigami, H. Kato, Y. Umeno and H. Shima: Scaling law for the onset of the surface wrinkling of multilayer tubes, 2020, Extreme Mechanics Letters, Vol. 40, 100970.
- 4) N. Adachi, Y. Matsuo, Y. Todaka, M. Fujimoto, M. Hino, M. Mitsuhashi, Y. Oba, Y. Shiihara, Y. Umeno, M. Nishida: Effect of grain boundary on the friction coefficient of pure Fe under the oil lubrication, 2021, Tribology International, Vol. 155, 106781.
- 5) I. Lobzenko, Y. Shiihara, Y. Umeno and Y. Todaka: Adsorption enhancement of a fatty acid on iron surface with $\Sigma 3$ (111) grain boundary, 2021, Applied Surface Science, Vol. 543, 148604.
- 6) E. Kawai, A. Kubo and Y. Umeno: Homogenized model of environmental barrier coatings for evaluation of energy release rate, 2021, International Journal of Applied Ceramic Technology, to be published.
- 7) A. Kubo and Y. Umeno: Machine-Learning-Based Atomistic Model Analysis on High-Temperature Compressive Creep Properties of Amorphous Silicon Carbide, 2021, Materials, Vol. 14, 1597.

国際会議アブストラクト

- 1) Y. Umeno: Multiscale modeling and simulation of fracture in polymers, Kick-off Symposium of Japan Consortium for Theoretical and Applied Mechanics, 2020.9.1-3, Tokyo, Japan.

学会講演論文

- 1) 梅野宜崇, 河合江美, 久保淳, 垣澤英樹, 北岡論: 有限要素法解析による熱応力を受けるEBCの界面き裂発生条件評価, 日本機械学会2020年度年次大会, 2020年9月13日～16日, 名古屋大学(オンライン), 講演論文集USB.
- 2) 久保淳, LEELAPRACHAKUL Tatchaphon, 梅野宜崇: 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: 分子量および絡み合い効果の検討, 日本機械学会2020年度年次大会, 2020年9月13日～16日, 名古屋大学(オンライン), 講演論文集USB.
- 3) 梅野宜崇, 久保淳: ポリマーの変形と破壊のマルチスケールモデリング, 日本金属学会2020年秋期講演大会, 2020年9月15日～18日, 富山大学(オンライン), 講演論文集USB.

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(B)「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」

民間等との共同研究

- 1) 「複合材料の熱伝導特性シミュレーション」

受託研究

①公的資金

- 1) JST CREST, 研究領域「革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明」, 研究課題「ナノ・マイクロ疲労学理の開拓と超高疲労強度金属の実現」, 研究題目「統合マルチスケール解析システム構築と疲労解析」

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。

2020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り壁近傍の微細構造を制御するメカニズムの解明を行った。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、層流域と乱流域を含む幅広いレイノルズ数域における進行波の大域的最適モードを明らかにした。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、改良した。

(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。

2020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。物理法則を考慮した深層学習を用いて、能動的学習によりセンサを自動的に最適化するアルゴリズムを開発し、その有効性を確認した。さらに、推定の不確かさを考慮したセンサ配置アルゴリズムを開発した。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確認し、そのメカニズムの解明を行った。

(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。

2020 年度は、塗布装置としてインクジェット・プリンティングの装置を開発し、ピエゾ素子に与える電圧波形を最適化することにより、目的の液滴を塗布できるシステムの開発を行った。これを模擬した数値シミュレーションにより、上記の最適化手法の有効性を確認した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Ansel Blumens, Minglang, Yin, Hiroyuki Nakajima, Yosuke Hasegawa, Zhen Li, Gero E. Karniadakis: Multiscale parareal algorithm for long-time mesoscopic simulations of microvascular blood flow in Zebrafish, arXiv:2101.08414 (2021).
- 2) Arjun J. Kaithakkal, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Dissimilar heat transfer enhancement in a fully developed laminar channel flow subjected to a traveling wave-like wall blowing and suction, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.164, 120485 (2021).
- 3) Fatemeh Mirzapour-shafiyi, Yukinori Kametani, Takao Hikita, Yosuke Hasegawa, Msanori Nakayama: Numerical evaluation reveals the effect of branching morphology on vessel transport properties during angiogenesis, bioRxiv, Oct 13 (2020).
- 4) Jiaming Gong, Junya Onishi, An He, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa, Naoki Shikazono: Heat transfer enhancement and pressure loss in a plate-fin heat exchanger with V-shaped oblique wavy surface, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.161, 120263 (2020).
- 5) Yukinori Kametani, Yutaka Fukuda, Takayuki Osawa, Yosuke Hasegawa: A new framework for design and validation of complex heat transfer surfaces based on adjoint optimization and rapid prototyping technologies, Journal of Thermal Science and Technology, Vol. 15, No. 2, JTST0016 1-15 (2020).

和文論文

- 1) 細矢太一, 亀谷幸憲, 大澤崇行, 塚原隆裕, 長谷川洋介: 4次元変分法を用いた面計測データに基づくダクト内円柱周りの流れ場推定, 生産研究, Vol. 73, Vol.1, pp. 77-81 (2021).

国際会議予稿集

- 1) Arjun J. Kithakkal, Yukinori Kametani, Yosuke Hasegawa: Mechanism of dissimilar heat transfer enhancement in a laminar channel flow subjected to wall blowing and suction induced by traveling wave-like wall blowing suction, 8th International and 47th National Conference on Fluid Mechanics and Fluid Power (FMFP), IIT Guwahati, India, December 9-11 (2020).
- 2) Yosuke Hasegawa: Optimal control of wall turbulence for dissimilar heat and momentum transport, 8th International and 47th National Conference on Fluid Mechanics and Fluid Power (FMFP), IIT Guwahati, India, December 9-11 (2020). (Invited Lecture).

学会講演論文

- 1) Liu, Z., 鈴木崇夫, 長谷川洋介: 複数の面計測情報を用いたチャネル乱流場の状態推定, 日本

流体力学会年会2020, 宇部, 2020年9月18-20日.

- 2) Kaithakkal, A., 亀谷幸憲, 長谷川洋介: チャンネル乱流における非相似伝熱促進のための壁吹き出し・吸い込みの最適進行波モード, 日本流体力学会年会2020, 宇部, 2020年9月18-20日.
- 3) 伊藤宗嵩, 長谷川洋介: 大きな空間スケールを有する壁面吹き出し・吸い込みによる壁乱流の最適制御, 日本流体力学会年会2020, 宇部, 2020年9月18-20日.
- 4) 中倉満帆, Yin, M., 中嶋洋行, Karniadakis, G., 長谷川洋介: ゼブラフィッシュ脳内血管網における生体ライブイメージングを用いた1次元血流モデルの検証, 日本流体力学会年会2020, 宇部, 2020年9月18-20日.
- 5) Henzel, D., Liu, Z., Karniadakis, G., 長谷川洋介: 物理法則を考慮した深層学習を用いた限られた計測情報に基づくスカラー源および濃度分布の推定, 日本流体力学会年会2020, 宇部, 2020年9月18-20日.
- 6) 宇治孝節, 伊藤宗嵩, 長谷川洋介: 壁乱流フィードバック制御則のための最適制御入力 of 学習, 日本流体力学会年会2020, 宇部, 2020年9月18-20日.
- 7) 亀谷幸憲, 松本圭, 莊田隆博, 石居真, 長谷川洋介: 相変化蓄熱系における非定常共役熱伝達の直接数値シミュレーション, 日本流体力学会年会2020, 宇部, 2020年9月18-20日.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究 B 「移動センサ群を用いた乱流環境におけるスカラー源探査に関する研究」(代表)
- 2) 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)
- 3) 挑戦的研究(開拓)「ガン治療を目的としたゼブラフィッシュ内ナノメディシンの数理モデルの構築とその検証」(代表)
- 4) 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)
- 5) 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) 「車載用送風機の最適設計のための解析技術開発」
- 3) 「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」
- 4) 「随伴解析による金属 3DP を活用した熱交換器への応用」
- 5) 「流動・伝熱一体 (CHT) 解析と随伴解析 (Adjoint 法) に基づく形状最適化コードの開発」
- 6) 「金属 AM 技術の適用を想定した流動・伝熱部品の Generative Design プロセスの研究」
- 7) 「トポロジー最適化を活用したファン及びインペラ最適設計技術の開発」

受託研究

①公的資金

- 1) NEDO クリーンエネルギー分野における革新的技術の国際共同研究開発事業／未利用熱等活用に資する革新的機器・デバイス開発／炭酸ガス分解用ソーラー集熱反応器の国際共同研究開発(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: Shear Strength Estimation of RC Beam-Column Sub-Assemblages Using Multiple Soft Computing Techniques, Structural Design of Tall and Special Buildings, May, 2020. <https://doi.org/10.1002/tal.1730>
- 2) Ahmed Okeil, Koji Matsumoto, Kohei Nagai: Investigation on Local Bond Behavior in Concrete and Cement Paste around a Deformed Bar by Using DIC Technique, Cement and Concrete Composites, Vol. 109, 103540, May, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2020.103540>

- 3) Liyanto Eddy, Punyawut Jiradilok, Koji Matsumoto, Kohei Nagai: Analytical investigation of the role of reinforcement in perpendicular beams of beam-column knee joints by 3D meso-scale model, *Engineering Structures*, Vol. 210, 110347, May, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2020.110347>
- 4) Seyed Yaser Mousavi Siamakani, Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai, Raktipong Sahamitmongko: Discrete Mesoscale Analysis of Adhesive Anchors Under Tensile Load Taking into Account Post-installed Reinforcement, *Construction and Building Materials*, Vol. 262, 20778, November, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.120778>
- 5) Ahmad Aki Muhaimin, Mohamed Adel, Kohei Nagai: Investigating the Effect of Repeated High Water Pressure on the Compressive and Bond Strength of Concrete with/without Steel Bar, *Materials*, 14, 527, January, 2021. <https://doi.org/10.3390/ma14030527>
- 6) Vikas Singh Kuntal, Punyawut Jiradilok, John E Bolander, Kohei Nagai: Estimation of internal corrosion degree from observed surface cracking of concrete using mesoscale simulation with Model Predictive Control, *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, September, 2020. <https://doi.org/10.1111/mice.12620>
- 7) Yi Wang, Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai, Shingo Asamoto: A mesoscale discrete model for mechanical performance of concrete damaged by coupled ASR and DEF, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 232, 107055, June, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.107055>
- 8) Kumar Avadh, Punyawut Jiradilok, John E Bolander, Kohei Nagai: Mesoscale simulation of pull-out performance for corroded reinforcement with stirrup confinement in concrete by 3D RBSM, *Cement and Concrete Composites*, Vol. 116, 103895, February, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2020.103895>
- 9) Yi Wang, Zong Woo Geem, Kohei Nagai: Bond Strength Assessment of Concrete-Corroded Rebar Interface Using Artificial Neural Network, *Applied Sciences*, 10(14), 4724, July, 2020. <https://doi.org/10.3390/app10144724>
- 10) Mohamed Adel, Punyawut Jiradilok, Koji Matsumoto, Kohei Nagai: Evaluation of crack-bridging strength degradation in SFRC structural beams under flexural fatigue, *Composite Structures*, Vol. 244, 112267, July, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.112267>

和文論文

- 1) 横山広, 龍田斉, 野村貴律, 中村拓郎, 榎谷浩, 長井宏平: AI 画像分析による反応性骨材使用 RC 床版の疲労劣化検知に関する研究, *構造工学論文集*, 67A, pp. 628-635, 2021, <https://doi.org/10.11532/structcivil.67A.628>.

国際会議予稿集

- 1) Ahmed Okeil, Koji Matsumoto, Kohei Nagai: Direct observation of bond failure of fatigue pullout test with liquid water by using DIC, *Proceedings of the International Conference on Structural Dynamic (EURODYN)*, Vol. 2, pp.3343-3354, November, 2020.

- 2) Hafiza Fatima Zahid, Vikas Singh Kuntal, Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai: Effect of multi-directional reinforcement on corrosion induced cracking pattern, Conference Proceeding of the Sixth International Conference on Construction Materials: Performance, Innovations, and Structural Implications (ConMat'20), pp. 1052-1063, August, 2020.
- 3) Liyanto Eddy, Kohei Nagai, Punyawut Jiradilok: Analytical Investigation of Failure Behavior of Beam-Column Knee Joint with External Steel Plates Anchorage Using 3D RBSM, Lecture Notes in Civil Engineering, Vol. 132, 2021.

学会講演論文

- 1) 宮田秀太, 徳橋亮治, 龍田斉, 田崎賢治, 秋山道彦, 宗光広展, 関川浩平, 林育寿, 長井宏平: 防災・減災の観点を考慮した道路整備の優先度評価の試み(その1), 土木学会全国大会第75回年次学術講演会, vol. 75, IV-177, 2020.
- 2) 徳橋亮治, 宮田秀太, 龍田斉, 田崎賢治, 秋山道彦, 宗光広展, 関川浩平, 林育寿, 長井宏平: 防災・減災の観点を考慮した道路整備の優先度評価の試み(その2), 土木学会全国大会第75回年次学術講演会, vol. 75, IV-178, 2020.

総説・解説

- 1) 人の幸せにつながる, 社会基盤技術のあり方, SCOPE NET, Vol. 83, p. 20-22, 2020.
- 2) 長井宏平: ミャンマーの損傷吊橋の構造性能評価と維持管理プロジェクト, 橋梁と基礎, 2020年10月号, pp. 58-59.
- 3) 長井宏平: SIP インフラから土木学会へ-これまでの活動と学に期待される今後の展開, 土木学会誌, Vol. 105, No. 6, pp. 12-15, 2020.
- 4) 長井宏平: 米国滞在で感じるコロナ時代の時間効率化と技術革新の価値, 高速道路と自動車, Vol. 63, No. 12, pp. 11, 2020.
- 5) 長井宏平: AI 入門講座 (1) -AI に必要となる学習データを集めよう-, 土木学会誌, Vol. 106, No. 1, pp. 22-23, 2021.

(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) 挑戦的研究(萌芽)【代表】人工衛星LandsatデータとAI分析による橋梁建設年推定システムの構築
- 4) 特別研究員奨励費(外国人特別研究員)【代表】化学的分析に基づいたコンクリート構造物の補修材付着性状のモデル化と構造性能評価

民間等との共同研究

- 1) 離散解析手法によるコンクリート内部の腐食性状の逆推定(清水建設)
- 2) 社会基盤インフラデータ分析とマネジメントサイクルへの実装の研究(株式会社ベイスンコンサルティング)

革新的シミュレーション研究センター 令和2年度 活動報告 Vol. 13

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

