



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 3 年度
活動報告

Vol. 14

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、シミュレーションソフトウェアの研究開発とその成果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も推進しています。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。

スーパーコンピュータ「富岳」は、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ます。「富岳」をはじめとする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 4 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3年度 活動報告

Vol. 14

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)	
4) 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構	
「燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型 産学官連携研究開発事業／水素利用等高度化先端技術開発／機械学習を用いた高压水素複合容器の最適設計技術に関する理論検討及び実証」	
(実施期間: 令和3～令和6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. 各研究室の活動実績	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、および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、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」プロジェクトを実施してきました。さらに、平成 22 年から平成 27 年 3 月に掛けて、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を実施してきました。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、我が国の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。具体的には下図に示すように、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・機能解析による、ナノスケール分子デバイス・材料設計の研究開発、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。将来に向けたこれらの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 副センター長・教授

Nobuhiro YOSHIKAWA, Center Vice 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 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



梅野 宜崇 教授

Yoshitaka UMENO, 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・マイクロ機械物理学

Nano-Micro Mechanophysics



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, 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

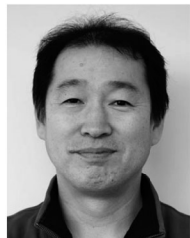
Ryoza OOKA, Professor

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

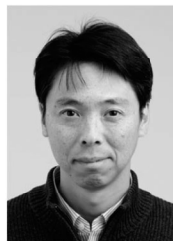
Kenji ONO, Visiting Professor

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



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

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

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 3 年度は、「富岳」において、船を対象とした Wall-Modeled LES による予測精度が高いことを確認するとともに、数値曳航試験のための予備計算を実施し、今後の課題を明確にした。また、省エネデバイスのメカニズム解明のための重要な知見を得た。その結果、プロペラ後方のデバイスの影響でプロペラ後方の流場のみならず、プロペラ上方から前方の流場にまで影響を及ぼしていることが分かり、今後の分析方針を明確にすることが出来た。

(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 3 年度は、「富岳」において、細隙部を含めた多段遠心ポンプの内部流れの Wall-resolved LES を実施し、解析格子の改善により、幅 0.17 mm 程度の細隙部近傍で発生する流れの不安定性を解消し、最大 400 億格子規模の Wall-resolved LES の準備が完了した。約 6 億要素の 1 回リファインの計算を行い、試験結果と比較し予測精度を検証した。その結果、LES は締切流量近くの右上がり揚程特性を予測できることを確認した。設計流量から大流量側ではリファインにより実験結果との差が拡大しているが、これは、オーバーセットインターフェースでの圧力誤差が発生することが原因であることを確認し、オーバーセットインターフェースでの速度、圧力の補間方法をチューニングすることで抑制されることがわかった。

(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 3 年度は、「富岳」において、前年度に引き続き、ターボ機械用 DES 解析ソフトのチューニングを実施し、最終的に約 90 倍の高速化を実現した。本アプリケーションを遷音速遠心圧縮機サージの直接解析に適用した結果、逆流を伴わずに流量および圧力が長周期に変動する現象が観測され、シミュレーションによってマイルドサージ現象を再現することに世界で初めて成功した。これにより、本シミュレーション技術によってマイルドサージの発生を予測できることを実証した。さらに、解析結果からマイルドサージ発生時の圧縮機内部の詳細な非定常流動現象を明らかにした。

(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 3 年度は、「富岳」において、リアルワールド自動車空力性能予測のための解析を実施し、自動車マルチボディダイナミクスと車両空力の双方向連成解析システム及び大気変動風発生モジュールを開発し、実走行時の燃費及び操安性評価の為にテスト計算を実施し、定性的な妥当性を確認した。その結果、一様流中における車体固定状態とドライバー操舵あり、さらには変動風中での車体固定ケースとドライバー操舵ありの 4 ケースで、空気抵抗(燃費)に対して数%の変化が生じることがわかった。さらに、レーンチェンジ時における変動風がドライバー操舵に与える影響が明らかになった。

(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 3 年度は、「富岳」において、リアルワールド自動車空力音予測のための解析を実施し、フロントグリルから発生するフィードバック音の直接解析を実施し、音源構造に関する新たな知見を得た。また、FFX(LBM 法)を用いて車体周りの空力音響計算を実施し、FFB+FFB-ACOUSTICS による結果と比較し、妥当性を検証した。その結果、空気抵抗係数のレイノルズ数依存性を従来の Navier-Stokes 方程式を用いた解析と同程度の精度で得られること、フロントグリル、ドアミラー、ホイールハウスに強い音源があることがわかった。

(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 3 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) 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3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。タイプ3蓄圧器のAl合金ライナーは, 自緊処理による強い圧縮残留応力下で疲労破壊が進行する。圧縮側でのみ応力変動する疲労試験にて蓄圧器のAl合金ライナーの状況を再現することを行い, き裂発生寿命に関するデータを蓄積した。

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, 以下の試験を行った。

(1) 樹脂単体軸荷重試験片を用いた試験

タイプ3蓄圧器のCFRP層では引張の残留応力が発生している。その疲労寿命を予測するため, 引張平均応力下での疲労試験を行い, 平均応力の影響を加えた等価応力振幅算出法を開発した。

(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が0°のCFRP試験片を用いて, 平均応力を引張側とし

た疲労試験を実施した。平均応力が引張側であっても、等価応力振幅を適切に求めれば、樹脂単体の疲労試験結果から CFRP 試験片の疲労寿命が予測可能であることを確認した。

①-3 円筒試験体評価法の検討(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である。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、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。

(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

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作製した。

(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。漏洩箇所の破面観察から、有限要素解析によるき裂進展解析の有効性を確認した。

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。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。き裂進展寿命について、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一致しないき裂貫通直前の状況に対して、弾塑性変形の影響を考慮した J 積分による評価で結果が改善されることを示した。き裂発生寿命と平均応力および応力振幅の関係を求めるため機械学習による予測試み、70L サブスケール容器については良好な結果を得た。

(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ているが、平均応力の影響をひずみの形で考慮した等価ひずみ振幅算出方法により、平均応力が引張側であっても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取得のため、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、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反映させた。

②複合圧力容器の技術基準の整備に向けた技術開発

(1) フルラップ複合圧力容器の技術基準の整備 (JPEC)

開発したタイプ 3 複合圧力容器に関する公式による設計方法を技術基準に反映させた。

- 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。

GTR13に提案する水素適合性試験方法については、SAE (Society of Automotive Engineers) Fuel Cell Safety Task Forceの中に設けられた材料専門家会議に各国が意見を持ち寄って議論する形で進められた。材料専門家会議では高压水素にさらされる材料の評価方法を定めたSAE J2579 B3をベースにその内容を改定する形で試験条件、判定基準等について議論し、そこで合意された案をGTR13 ファイズ2に提案することとした。日本から試験法(案)をSAE材料専門家会議で提案した。その後の審議を経てGTR13 Informal documentとして完成させ、GRSPへ提出しWP29で最終承認を得る見込みである。

[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.

GTR13 に提案する水素適合性試験法案を SAE 材料専門家会議において合意した日本およびアメリカを中心とした海外の主張を合体させた形でまとめた. 試験方法は海外提案である切欠き疲労試験 (Option 1) と日本が主張する平滑疲労試験 (Option 2) を並列させた形になっており, かつ SSRT 試験は平滑疲労試験のみに適用することとした. リスト材に入っていない新規材料は, Option 1 もしくは Option 2 のどちらかの試験で合格すれば使用可能となる. 使用可能な材料リストに対する要望も強く, SAE 材料専門家会議の中で, 公表された水素適合性試験結果をまとめることについて議論した.

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.

4) 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構「燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型 産学官連携研究開発事業／水素利用等高度化先端技術開発／機械学習を用いた高圧水素複合容器の最適設計技術に関する理論検討及び実証」

(実施期間: 令和 3～令和 6 年度) 吉川暢宏(東京大学生産技術研究所)

[概 要]

「2050 年ゼロエミッションを実現するための牽引役として高圧水素燃料電池自動車が位置付けられており, その普及拡大のためには最も高価な主要機器である高圧水素容器の低価格化が必須である. 高圧水素容器の安全性を確保しつつ, 飛躍的コストダウンを実現するためには, 高度な設計手法が必要である. そこで, これまで個々の企業に蓄積されたノウハウに基づく設計の問題点を抜本的に解決し, 今後世界規模で加速するであろう高圧水素容器の開発競争に日本独自の手法により楔を打ち込むため, 本研究開発を実施する. その成果により高圧水素容器の低価格化を実現し, 日本製燃料電池自動車の普及拡大を通じて日本経済へ大きく貢献する.

CFRP の強度をフルに活用し使用量を低減し, ひいては低コスト化につながり得るタイプ 4 容器は, 高密度ポリエチレン製ライナーの全面に炭素繊維強化プラスチック (Carbon Fiber Reinforced Plastic, CFRP) を巻き付けて成形した容器であるため, 口金近傍の構造は他の種類と比較すると各段に複雑であり, また CFRP 層の材料特性は繊維の巻き方向や厚みの影響を受けるため, 材料特性のモデリングや従来の破壊力学的手法に基づく解析が非常に困難である. 一方, ここ数年におけるディープラーニングなどの機械学習技術の飛躍的発展に伴い, 形状やフィンディングパターンだけではなく, 樹脂・炭素繊維の材料特性を含めたより広範かつ大規模なパラメータに対し, 限定的ではあるが設計最適化に

適応できる解が導出可能となっている。本研究開発では、既の実績のあるタイプ 4 容器に関する有限要素解析技術のさらなる高度化を推進しつつ、多数の最適解候補の系統的創出と破裂シミュレーション結果を入力データとし、機械学習を用いた革新的なタイプ 4 容器の最適設計技術を確立する。また機械学習に用いたデータを蓄積し大規模データベース化することにより、データの相互利用により開発スピードを促進するシステムの開発を行う。本研究開発では最適設計の実現可能性検証まで含めて SUPWAT および東京大学の 2 者により以下の研究開発を実施する。

①「有限要素解析による学習データの蓄積ならびに最適設計機械学習モデルの構築」(東京大学, SUPWAT)

実用化されている容器の設計を参考にして、タイプ 4 容器の最適設計候補を多数準備し、東京大学開発の FrontCOMP を用いたメゾスケール有限要素解析により破裂圧力を予測することで、機械学習に供する大量の学習データを蓄積する。メゾスケール有限要素解析では材料強度のばらつきや製造誤差の影響も考慮する。並行して大量の設計変数ならびに有限要素解析のデータをクレンジングして最適設計においてコアとなる機械学習モデルを構築する。

②「タイプ 4 容器に関する最適設計探索システムの構築」(東京大学, SUPWAT)

破裂圧力ならびに拘束条件から目的とする設計変数を導出可能とする設計最適化 AI を構築する。

③「最適設計システムの実証実験」(東京大学, SUPWAT)

CFRP の積層構成を設計変数とし、開発した最適設計探索システムより軽量最適設計を導く。

[詳 細]

①「有限要素解析による学習データの蓄積ならびに最適設計機械学習モデルの構築」

①-1 既存のタイプ 4 容器の設計情報および試験データの収集(東京大学, SUPWAT)

すでに実用化されている燃料電池自動車用タイプ 4 高圧水素容器に関して、ライナーや口金等の情報を収集した。

①-2 メゾスケール有限要素解析による学習データの蓄積(東京大学)

タグチメソッドや実験計画法等の離散最適化手法を応用して、既存のタイプ 4 容器の情報をもとに、最適設計候補を多数準備し、製造誤差や材料強度におけるばらつきを含めて、東京大学開発の FrontCOMP を用いたメゾスケール有限要素解析により破裂圧力を予測することで、機械学習に供する大量の学習データを蓄積した。

①-3 機械学習モデルの構築(SUPWAT)

大量に蓄積したデータやメゾスケール有限要素解析の出力を機械学習モデルに取り込む手法を検討し、機械学習データ入力のパラットフォームを作成した。

②「タイプ 4 容器に関する最適設計探索システムの構築」

②-1 設計最適化 AI の構築(東京大学, SUPWAT)

高圧水素容器における機械学習を利用した最適設計問題の基本設定を決定した。

③「最適設計システムの実証実験」

③-1「設計最適化 AI」の有効性の検証(東京大学, SUPWAT)

大規模メソスケールシミュレーションを想定して解析システムおよびソフトウェアの整備を行った。

③-2 タイプ4 容器の試作および破裂試験による実証実験の実施(東京大学, SUPWAT)

試作と破裂試験を想定してフィラメントワインディング機器の整備を行った。

(2) 他研究機関との連携

国立研究開発法人理化学研究所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、演算回数に対するメモリアクセス回数の比(Bytes per Flop, BF比)最小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BF比の最小化)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。

(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基盤の一つである。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 3 年度現在 13 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 名を超える受講生を輩出した。

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、令和2年度に続き2度目のリモート講義となった。令和2年度の経験の下、よりリモートに適した講義の進め方、環境構築や新教材の提供の仕方などをブラッシュアップした。詳細は、スーパーコンピューティングニュース最新号(居駒, 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.
- ・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.23, No.5, 2021 年 9 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 2 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, 本プロジェクトで開発されるアプリケーションを実用性の高いものにすることを狙いとして, これまでに得られた成果を報告し, それを踏まえて, 「富岳」の時代における HPC を活用した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 4 年 3 月 9 日 (水) 10:00-17:00

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) および 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: 304 名 (オンサイト参加 10 名)

資料作成: 予稿集 148 頁

○プログラム

10:00-10:15 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

岡部 徹 東京大学生産技術研究所 所長

I. 自動車統合設計システムの研究開発

10:15-11:05 (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

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 技術参与

11:05-11:55 (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

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

II. 招待講演

13:00-13:35 安定・高忠実な圧縮性流体ソルバーと航空機全機 LES 解析

河合 宗司 東北大学大学院工学研究科 教授

13:35-14:10 カーボンニュートラル社会の実現に向けた燃焼数値シミュレーションの役割

黒瀬 良一 京都大学大学院工学研究科 教授

III. ターボ機械設計・評価システムの研究開発

14:10-14:35 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

14:35-15:15 (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

木村 校優 株式会社三井造船昭島研究所技術統括部 部長

15:30-16:10 (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

16:10-16:50 (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

16:50-17:00 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 37 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 – 乱流研究の新展開 –」

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 37 回目となり、「乱流研究の新展開」というテーマに関する 9 件の講演を行った。

開催日: 令和 4 年 3 月 4 日(金) 9:40-17:20
場 所: オンライン開催 (Zoom)
主 催: 東京大学生産技術研究所 TSFD グループ

○プログラム

9:45-9:50 開会の挨拶 半場 藤弘(東京大学)

セッション 1 司会 長谷川 洋介(東京大学)

9:50-10:30 陰的 LES と DNS の比較を通じた LES に関する一考察
松山 新吾(JAXA)

10:30-11:10 噴霧 LES に向けた準陰的な密度ベース解法の提案と検証
Younghwa CHO (Hokkaido University), Rahul BALE (R-CCS)
Makoto TSUBOKURA (R-CCS), Nobuyuki OSHIMA (Hokkaido University)

11:10-11:50 壁乱流中の秩序構造の階層による粒子の輸送
本告 遊太郎, 後藤 晋(大阪大学)

セッション 2 司会 北澤 大輔(東京大学)

13:10-13:50 温度成層平面ポアズイユ乱流の熱流動特性
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)

13:50-14:30 機械学習による LES 乱流モデリング
服部 裕司, 宮崎 聡, Aditya Sai PRANITH(東北大学)

14:30-15:10 リザーバーコンピューティングを用いた乱流の状態推定
犬伏 正信(東京理科大学, 大阪大学), 中谷 謙介, 後藤 晋(大阪大学)

セッション3 司会 菊本 英紀(東京大学)

15:30-16:10 3D-CNNを用いた建物周辺の風速・風圧分布予測

中村 良平(大成建設)

16:10-16:50 Snapshot PODを用いた乱流場の最適設計

中澤 嵩(大阪大学), 長谷川 洋介(東京大学)

16:50-17:30 確率的発生源同定における随伴濃度分布のエントロピーに基づくセンサー配置の最適化

賈 鴻源, 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5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。

第5回は、各課題の最新状況を報告するとともに、AIを活用したシミュレーションや市販アプリケーションの最新の状況などに関してもご報告していただくことによって、今後のものづくり分野におけるHPCの利活用の在り方を展望することを目的として開催した。

開催日: 令和3年10月22日(金) 10:00-17:00

場 所: オンライン開催(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

理化学研究所計算科学研究センター 「富岳」成果創出加速プログラム「『富岳』が拓く Society 5.0 時代のスマートデザイン」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: 192名

資料作成: 「富岳」成果創出加速プログラムの最新状況予稿集 65 頁,

「富岳」の時代の HPC の産業応用への期待予稿集 88 頁

○プログラム

●「富岳」成果創出加速プログラムの最新状況

(司会 津田 伸一 九州大学大学院工学研究院 准教授)

10:00-10:05 開会の挨拶

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 センター長・教授

吉村 忍 東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻 教授

10:05-10:25 「富岳」によるターボ機械流動解析の革新

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 センター長・教授

10:25-10:45 自動車を対象としたリアルワールドシミュレーションの最新成果と今後

坪倉 誠 神戸大学大学院システム情報学研究科 教授

10:45-11:05 超臨界 CO₂ タービン燃焼器内乱流燃焼場の LES -乱流燃焼モデルへの AI(機械学習)の適用-

黒瀬 良一 京都大学大学院工学研究科機械理工学専攻 教授

11:05-11:25 大型洋上風車のスーパーシミュレーション

吉村 忍 東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻 教授

11:25-11:50 「富岳」を用いた次世代の航空機全機 LES 解析

河合 宗司 東北大学大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻 教授

●「富岳」の時代の HPC の産業応用への期待

(司会 飯田 明由 豊橋技術科学大学大学院工学研究科 教授)

13:00-13:20 富岳が拓く Society 5.0 時代のスマートデザイン

坪倉 誠 理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー

13:20-13:50 固体酸化物形燃料電池の大規模数値解析

鹿園 直毅 東京大学生産技術研究所 教授

13:50-14:20 HPCI を活用した自動車先端シミュレーション技術検証

梅谷 浩之 一般社団法人日本自動車工業会総合政策委員会 ICT 部会
デジタルエンジニアリング分科会 CAE タスク 副リーダー

14:20-14:50 原子力発電所のフルスケール 3 次元 FEM モデルによる耐震評価

宮村 倫司 日本大学工学部情報工学科 准教授

(司会 高木 亮治 国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 准教授)

15:05-15:35 構造最適化手法を活用した鉄道車両の軽量化

高垣 昌和 公益財団法人鉄道総合技術研究所 鉄道力学研究部
研究室長

15:35-16:05 スーパーコンピュータ「富岳」を用いた高解像度津波浸水予測 AI の構築

大石 裕介 富士通株式会社 研究本部 人工知能研究所
社会モデル融合 AI プロジェクト 主席研究員

- 16:05-16:35 ものづくりに活かすデータ同化流体科学
大林 茂 東北大学流体科学研究所 教授
- 16:35-16:55 商用アプリケーションの移植と「富岳」での動作検証
藤崎 正英 富士通株式会社 インフラストラクチャー事業本部
ビジネス戦略統括部 エクゼディレクター
- 16:55-17:00 閉会挨拶
河合 宗司 東北大学大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻 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 64 回 LES 研究会

開催日： 令和 3 年 5 月 11 日(火)14:00-15:30

場 所： Zoom によるオンライン会議

「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の予測と発生メカニズムの解明」

小林 典彰 大阪大学

第 65 回 LES 研究会

開催日： 令和 3 年 7 月 9 日(金)14:00-15:30

場 所： Zoom によるオンライン会議

「壁乱流の最適制御における乱れ抑制機構と Reynolds 数効果」

伊藤 宗嵩 東京大学生産技術研究所

第 66 回 LES 研究会

開催日： 令和 3 年 9 月 14 日(火)14:00-15:30

場 所： Zoom によるオンライン会議

「遷音速ファン翼の境界層遷移の LES に向けて」

榎本 俊治 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所

第 67 回 LES 研究会

開催日： 令和 3 年 11 月 12 日(金)14:00-15:30

場 所： Zoom によるオンライン会議

「機械学習による風環境予測シミュレーションの高速化」

山口 純輝 鹿島建設

第 68 回 LES 研究会

開催日： 令和 4 年 1 月 11 日(火)14:00-15:30

場 所： Zoom によるオンライン会議

「汎用有限体積法コードによる大気境界層乱流の再現に関する取り組み」

小野 浩己 電力中央研究所

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 2 回シンポジウム

開催日: 令和 3 年 11 月 26 日(金)

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 5 回 CAE ワークショップ

開催日: 令和 4 年 3 月 4 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 4rd R-CCS International Symposium

開催日: 令和 4 年 2 月 7 日(月)～8 日(火)

場 所: オンライン・オンサイト(計算科学研究センター6 階 R-CCS 講堂)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 14 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 3 年 12 月 10 日(金) 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 2021

開催日: 令和 3 年 12 月 9 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 12 月 22 日(水)

場 所: ビデオ会議システム

主 催: 一般財団法人高度情報科学技術研究機構

スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー2021

開催日: 令和 4 年 2 月 18 日(金)

場 所: 神商ホール(神戸商工会議所)、他オンライン

主 催： 公益財団法人計算科学振興財団、神戸商工会議所

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 2021

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3年9月2日(木)～3日(金)

場 所： 神戸国際展示場2号館

第8回 HPCI システム利用研究課題 成果報告会

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3年10月29日(金)

場 所： オンライン開催

SC21

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3年11月15日(月)～18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3年度は Vol. 33, Vol. 34を発行した。

(1) Vol. 33

発 行 日： 令和3年6月

発行部数： 500部

内容： 1面 巻頭言「スーパーコンピュータ「富岳」を用いた本格的な実証研究を開始」
2-3面 第1回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウム報告
4-5面 センター所属メンバー研究紹介
6面 ソフトウェア紹介「大規模空力・音響直接解析プログラム FFX」

(2) Vol. 34

発 行 日： 令和4年1月

発行部数： 650部

内容： 1面 巻頭言「第3期革新的シミュレーション研究センターの活動も残すところ1年あまり 目標達成に向けて、研究開発および成果の普及活動を展開」
2面 プロジェクト紹介「国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO) 燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型 産学官連携研究開発事業／水素利用等高度化先端技術開発／機械学習を用いた高圧

	水素複合容器の最適設計技術に関する理論検討及び実証」の成果の紹介
3 面	センター所属メンバー研究紹介
4-5 面	活動報告
6 面	ソフトウェア紹介「タンパク質の正準分子軌道を計算するプログラム ProteinDF/QCLObot」

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、文部科学省のプロジェクト「富岳」成果創出加速プログラムにおいて、FrontFlow/blue(FFB)と FrontFlow/x(FFX)の2つの大規模 LES(Large Eddy Simulation)解析ソルバを研究開発している。

FFB は連続体流体の基礎方程式である、連続の式、ナビエ・ストークス方程式、および内部エネルギーの式を有限要素法によって離散化して解く。令和 2 年度にはスーパーコンピュータ「富岳」に向けた最適化を進められた結果、FFB は「富岳」のほぼ全系を用いて 22.6 PFLOPS という、アプリケーションソフトウェアとしては世界最速の計算速度を達成した。このことによって、最大 1,000 億要素規模の応用計算が可能となり、これまでにファン、ポンプ、船、自動車など多くの応用計算の実績を有している。その後、実際の応用計算では並列化効率が低下することが明らかとなったため、令和 3 年度は、並列化効率の向上に向けた調査研究を実施した。その結果、並列化効率が低下する抜本的な要因が解明できたため、令和 4 年度にはこれを解消するための新たな領域分割方法を実装する予定である。

FFX は Lattice Boltzmann 法(LBM)に基づく LES 解析ソルバであり、階層的な直交格子法(Building Cube Method, BCM)を用いることによって、自動車のエンジンルームやタイヤハウス内の流れなど、複雑形状まわりの流れを計算するための格子を完全に自動で生成できる。また、メモリー負荷も軽いいため、FFX を用いることによって、最大 2 兆格子規模の応用計算が可能となっている。令和 3 年度は「富岳」や NEC 社製スーパーコンピュータ Aurora TSUBASA に向けた最適化を実施し、同一の格子数(要素数)の問題において、FFB と比較して約 50 倍高速な計算を実現した。また、FFX の前処理である格子生成部分を完全に並列化し、かつ、格子生成アルゴリズムを改良することによって、従来よりも拡大に短い時間で計算格子が生成できるようになった。

(2) 船舶・自動車・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。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。特に、令和 3 年度は新たに 4 m の模型船を連携造船メー

カーに作成してもらい、曳航水槽試験を実施するとともに、110 億要素を用いた抵抗計算を実施した。その結果、乱流遷移の仕方が模型船と数値シミュレーションとは異なっていることが明らかとなり、来年度、この点を改良した曳航水槽試験を再度実施する計画になっている。さらに、推進効率を向上させるための省エネデバイスとして、舵にフィンおよびバルブを付加した場合の自航計算を実施し、省エネデバイスが効果を発現するメカニズムの解明にむけて、計算された流れ場を詳細に分析している。

【自動車】

角柱まわりの流れのような基礎的な流れ場を対象として FFX の計算精度を検証するとともに、1,700 億格子を用いた実車の LBM 計算を実施した。その結果、実験結果や FFB による計算結果と比較して両良好な結果が得られることを確認したが、壁面境界条件の設定方法やサイズが異なる格子同士の境界の扱いに問題があることが明らかとなり、その改良指針を明確にした。来年度はこれらの改良を実施した後、最終的なターゲットである、格子解像度 40 μm 、2 兆格子を用いた実車の LBM 計算を実施する予定である。

【ターボ機械】

FFB を利用して 200 $\square$ ボックスファンの性能・音響解析を実施した結果、動翼表面の層流境界層と乱流の生成スケールの渦が解像できる格子解像度を用いた DSM 計算によって、ファン性能は定量的に予測できることを確認した。また、音響計算(FFB-A)と組み合わせることによって、音源強度が比較的に強い場合は音圧レベルを定量的に予測できる。しかし、音源強度が弱い場合は音圧レベルを過大評価することが明らかとなった。格子解像度の向上、オーバーセット法の改良、および、SGS モデルの検討などが今後の課題である。

FFB の圧縮性流れ解析ソルバを利用して、実機プロアの解析を実施した。まず、圧縮性流れ解析において重要となる、散逸や断熱圧縮を表すエネルギー変換項の解析精度をノズル内流れや散逸を伴うチャネル乱流において検証し、解析精度に問題が無いことを確認した。さらに、実機小型プロアの解析をするにあたって、各種の数値計算パラメータが計算の安定性や計算精度に与える影響を調査し、適切な計算条件を明らかにした。現在、この条件を用いて実機プロアの計算を実施しているが、実験で計測されている旋回失速が定量的に再現できていることを確認している。

(3) 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

自動車の A ピラーまわりの流れを模擬した前方ステップに流入する乱流境界層を対象として、音の発生メカニズムを解明することを目的とした風洞実験と大規模な数値解析を実施している。風洞実験では、ステップの高さと流入する乱流境界層の厚みとの比を 3 とおりに変えて流れや音を計測した。特に、熱線流速計によって流速変動の相関を計測することにより、ステップ後方を流下する渦のスケールや流下する速度を明らかにした。この計測によって、ステップ上方のはく離点とはく離した流れの再付着点との間に、フィードバックループが形成されている可能性があることがわかり、さらに詳細な計測を実施している。数値計算では FFB を利用した、最大 10 億要素規模の計算によって、ステップに流入する境界層やステップ後流のはく離・再付着流れを定量的に予測することができた。現在、音が発生するメカニズムの解明のために、音響解析を実施している。

(1) 研究成果一覧

国際会議アブストラクト

- 1) Chisachi Kato: The role of a professional society of mechanical engineers after and/or with Covid-19 pandemic, 69th PSME National Conference, 2021.10.23, physical-virtual hybrid conference (Manila, Philippines).
- 2) Chisachi Kato: High-Performance Computing and Its Industrial Applications in Fugaku Era, IAHR-Asia 2021, 2021.11.22-23, physical-virtual hybrid conference (Kathmandu, Nepal).

(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) 「『富岳』を活用した超大規模解析技術及びデータ抽出手法の開発に関する研究」
- 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

固体力学の基礎は弾性学にあり、線形弾性体の境界値問題に対する近似解法としての有限要素法は、計算機能力の向上と相まって機械の設計問題に多大な貢献をしてきた。有限要素法は物理現象としての破壊の本質に迫れるものではないが、鋼に代表される金属材料に関しては、弾性問題の解として得られる力学場と破壊の機序および進展の相関が高く、力学場を制御した試験片を用いた破壊試験により、経験則を積み重ねることで破壊現象を予測可能にしてきた。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そのような既往のアプローチを拒んできた。非均質性による応力場の局所的不連続性がその主因であるが、「富岳」に代表される大規模並列計算機を活用して、局所的力学場を正確に評価できれば容易に活路を見出せる。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) 強度信頼性評価法の開発

炭素繊維と樹脂のレベルでモデル化を行うミクロスケールシミュレーション、あるいは炭素繊維を万本単位で束ねた繊維束をモデル化の単位とするメゾスケールシミュレーションにより、確度の高い強度信頼性評価を行うための方法論を開発している。その過程においては樹脂単体の非線形挙動および破壊則を正確に測定しシミュレーションに組み込むことが必須である。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 CFRP の疲労特性を支配するとの仮定の下、ミクロスケールシミュレーションにより樹脂の非線形応力場を正確に評価すれば、CFRP の疲労寿命を適切に予測できる。また炭素繊維が空間的に不確定配置となる短繊維複合材の確率強度モデルの構築においても同様の方法論が適用できる。

(2) 超高圧水素容器の開発

燃料電池自動車普及の隘路となっている CFRP 製高圧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。フィラメントワインディングプロセスにおいて生じる欠陥の影響まで考慮した最適設計方法を機械学習の枠組みで検討している。

(3) 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。フィラメントワインディングや、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を想定し、メゾモデルを基軸とした成形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) Hongzhou Zhai, Qi Wu, Nobuhiro Yoshikawa, Ke Xiong, Changhao Chen: Space-time asymptotic expansion method for transient thermal conduction in the periodic composite with temperature-dependent thermal properties, April 2021, Computational Materials Science, Vol. 194, 110470. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110470>.
- 2) Naoki Morita, Yousuke Mino, Nobuhiro Yoshikawa, Masahiro Hojo: Versatile fatigue strength evaluation of unidirectional CFRP specimen based on micro-stress analysis of resin, August 2021, Composite Structures, Vol. 276, 114539. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2021.114539>.
- 3) Changhao Chen, Qi Wu, Wuke Xu, Ke Xiong, Nobuhiro Yoshikawa: Microscopic stresses of discontinuous carbon fiber reinforced thermoplastics under thermal loading: two-fiber interactions, August 2021, Computational Materials Science, Vol. 199, 110805. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110805>.
- 4) Qi Wu, Changhao Chen, Nobuhiro Yoshikawa, Jianguo Liang, Naoki Morita: Microscopic stresses of discontinuous fiber reinforced composites under thermal and mechanical loadings – Finite element simulations and statistical analyses, August 2021, Computational Materials Science, Vol.200, 110777. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110777>.
- 5) Hongzhou Zhai, Tengfei Bai, Qi Wu, Nobuhiro Yoshikawa, Ke Xiong, Changhao Chen: Time-domain asymptotic homogenization for linear-viscoelastic composites: mathematical formulae and finite element implementation, March 2022, Composites Part C, Vol.8, 100248. <https://doi.org/10.1016/j.jcomc.2022.100248>.

学会講演論文

- 1) 吉川暢宏, 阿部雅史, 森田直樹, 北条正弘: 樹脂部マイクロ応力評価に基づくCFRP 試験片の疲労強度評価法に関する研究, 2021年9月, [No. 21-17] 日本機械学会M&M2021 材料力学カンファレンス講演論文集, OS0135.
- 2) 阿部雅史, 吉川暢宏, 森田直樹, 北条正弘: INS評価によるCFRP積層試験片の疲労寿命予測, 2021年11月, 日本材料学会, 第20回破壊力学シンポジウム講演論文集, pp. 143-148.
- 3) 吉川暢宏: HPISの役割ー大型液化水素貯槽の技術基準ー, 2021年11月, 一般社団法人日本高圧力技術協会, 令和3年度秋季講演会概要集, pp. 13-2.

総説・解説

- 1) 吉川暢宏: 特集: 構造解析技術の最新動向「構造解析シミュレーションは信用できるか?」, 2022年1月, 日本ガスタービン学会誌, Vol. 50, No. 1, p.1.
- 2) 木村光男, 川畑友弥, 吉川暢宏, 新井祐介, 黒田匠, 藤極之徳, 堀野聡: 「水素サプライチェーンを支える大型液化水素貯槽」, 2022年1月, 圧力技術, 第60巻, 第1号, pp. 24-30.
- 3) 吉川暢宏: 巻頭連載: CISS におけるシミュレーションソフトウェア開発と利用 (5) 「炭素繊維強化ブ

ラスチックの設計・製造シミュレーション」, 2022 年 2 月, 機械の研究, Vol. 74, No. 2, pp. 83-88.

(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 4)
- 2) 織物 CFRP 材料の成形シミュレーションの高度化
- 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) 炭素繊維強化熱可塑プラスチック製 LNG 配管の開発
- 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
- 6) ATL 成形による極低温対応配管製造のための炭素繊維強化液晶ポリマーの開発および金属製継手最適設計シミュレーション技術の開発
- 7) 燃料電池モビリティ用複合高圧水素容器の開発

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「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」
- 4) (一社)水素供給利用技術協会「水素ステーション用水素蓄圧器(WG15:ISO19884)に適用する水素適合性試験法の策定等に関する研究開発」
- 5) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構「燃料電池等利用の飛躍的拡大に向けた共通課題解決型産学官連携研究開発事業／水素利用等高度化先端技術開発／機械学習を用いた高圧水素複合容器の最適設計技術に関する理論検討及び実証研究」

半場藤弘研究室 流体物理学

半場藤弘研究室では、乱流シミュレーション技術の開発のため、ラージ・エディー・シミュレーション (LES) モデル、レイノルズ平均 (RANS) モデル、ハイブリッド乱流モデルの基礎研究と、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・RANS 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。LES と 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。本研究ではそれぞれのモデルの改良と、二つのモデルを統合した乱流モデルの開発を行っている。

LES と RANS の方程式を物理的な根拠に基づいて統合するため、壁面乱流の運動エネルギーの輸送を解析した。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、チャンネル乱流の直接数値計算のデータを用いて、RANS と LES に対応するスケールの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。さら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。

また乱流に対する回転効果、圧縮性効果の解明とモデル化を試みた。回転系乱流における乱流ヘリシティの 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。また、衝撃波と乱流の相互作用について直接数値計算データを用いて乱流エネルギーの増幅機構を考察し、それを適切に再現する RANS モデルの導出を行った。

(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

ティール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: Scale-similar structures of homogeneous isotropic non-mirror-symmetric turbulence based on the Lagrangian closure theory, September 2021, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 926, A14 1-41.
- 2) H. Miura, F. Hamba: Sub-grid-scale model for studying Hall effects on macroscopic aspects of magnetohydrodynamic turbulence, January 2022, Journal of Computational Physics, Vol. 448, 110692 1-22.
- 3) F. Hamba: Scale-space energy density for inhomogeneous turbulence based on filtered velocities, January 2022, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 931, A34 1-24.
- 4) A. Pouquet, N. Yokoi: Helical fluid and (Hall)-MHD turbulence: a brief review, March 2022, Philosophical Transactions of the Royal Society A, Vol. 380, 20210087, 1-18.

国際会議予稿集

- 1) N. Yokoi, A. Pouquet: Small-scale and large-scale helical structures in fluid and (Hall)-MHD turbulence, and their role on the dynamics of magnetized shear flows, September 2021, Proceedings of 5th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics.
- 2) N. Yokoi, S. M. Tobias: Magnetoclinicity Instability, October 2021, Progress in Turbulence IX, Springer Proceedings in Physics 267, pp.273-279.
- 3) N. Yokoi, Y. Masada, T. Takiwaki: Modeling convective turbulent transport with plumes using double-averaging formulation, December 2021, Proceedings of American Geophysical Union Fall Meeting 2021.

学会講演論文

- 1) 半場藤弘:フィルター平均速度を用いたスケール空間エネルギー密度, 2021年9月, 日本流体力学会年会 2021 講演論文集, 数値計算・乱流モデリング(1)-1.
- 2) 横井喜充, 政田洋平, 滝脇知也:非平衡効果によるプリュームを伴う恒星対流のモデリング, 2021年9月, 日本流体力学会年会 2021 講演論文集, 宇宙・惑星(2)-1.
- 3) 堀江真惟人, 半場藤弘:回転チャネル流における乱流ヘリシティの生成輸送と粘性散逸, 2021年12月, 第35回数値流体力学シンポジウム講演論文集, A11-2.
- 4) 堀江真惟人, 半場藤弘:回転チャネル流のLESによる乱流ヘリシティの解析, 2022年3月, 日本物理学会第77回年次大会概要集, 15pB12-1.
- 5) 中村元紀, 半場藤弘:圧縮性乱流モデルによる衝撃波/乱流相互作用の解析, 2022年3月, 日本物理学会第77回年次大会概要集, 15pB12-2.

総説・解説

- 1) 半場藤弘:乱流の運動エネルギーの輸送と渦構造, 2021 年 9 月, 機械の研究, Vol. 73, No. 11, pp. 829-833.

(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」

梅野宜崇研究室 ナノ・マイクロ機械物理学

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、フェーズフィールド法や有限要素法解析による転位挙動および亀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、樹脂・ファイバー系の伝熱特性の原子モデル解析、金属表面の潤滑油挙動解明のための粗視化粒子モデル解析、金属疲労挙動のマルチスケールシミュレーション、燃料電池電極材や構造用ポリマーの高性能化・長寿命化のためのモデリングとシミュレーションといった幅広い問題に取り組んでいる。

(1) 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。これまで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、ポリマー分子の絡み合い効果が強度特性に強く影響を及ぼすことを示してきた。本年度は、引張変形を受けるポリカーボネートの応力一ひずみ特性に及ぼす分子構造の影響を定量的に示すことを試みた。最大引張り応力($\sigma_{\max}$)が分子当たりの絡み合い点数(N_e)だけではなく、分子の旋回半径(R_g)にも依存することを見出すとともに、 $\sigma_{\max}$ を N_e と R_g の2変数関数で表記できることを示した。

(2) 分野横断的取り組みによるゴム亀裂進展モード転移現象の解明

亀裂を有するゴム材料に引張ひずみが負荷された場合の亀裂進展速度は、引張ひずみ増加に従って大きくなるが、あるひずみにおいて亀裂速度が不連続に2桁程度増大するモード転移現象(速度ジャンプとも呼ばれる)が知られている。本研究室ではFEM連続体モデルによる亀裂進展モード転移現象の再現に成功し、亀裂先端の応力の時間変化が単調増加にならないことが本現象の原因であることを突き止めていたが、他のグループが数理的モデルに基づいて提唱している亀裂先端のガラス転移機構との整合性が不明であり、メカニズムの完全解明を阻んでいた。そこで我々は、シンプルなバネ・ダッシュポットモデルによる検討を重ねることで、亀裂先端の応力変化が、材料の粘弾性特性に起因する振動と減衰によるものであることを突き止めた。さらに、ガラス転移機構を提唱する数理的モデルとの対応を取ることに成功し、応力の振動・減衰特性の変化が材料挙動のガラス化と本質的には同じものであることを実証した。これにより、ゴム亀裂進展モード転移現象の機序が完全に解明された。

(3) 機械学習を援用した統合マルチスケール法構築の試み

ナノ・マイクロ域における金属疲労メカニズムは未解明であり、特に繰返し荷重を受けることによる転位組織形成の機序を明らかにすることが求められている。この現象を真に理解するため、単転位の発生および運動(ナノスケール域)、転位同士の相互作用(サブミクロン域)、転位の集団挙動による転位組織形成(マイクロスケール域)をシームレスに繋ぐマルチスケール法の確立が急務である。我々は、各スケールにおける物理モデル(ナノスケール:原子モデル、サブミクロン:フェーズフィールドモデル、マイ

クロススケール:拡散反応モデル)において,構成式に含まれるパラメータ等を機械学習により調整することで,上位スケールのモデルと整合させることができるスキームの開発に着手している.本年度は転位組織の拡散反応モデルにおいて,入力(拡散係数などのパラメータ)と出力(転位構造)を人工ニューラルネットワークモデルによりマッピングする基本アルゴリズムを開発した.

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) A. Kubo, N. Sakumichi, Y. Morishita, K. Okumura, K. Tsunoda, K. Urayama, and Y. Umeno: Dynamic glass transition dramatically accelerates crack propagation in rubberlike solids, 2021, Phys. Rev. Materials Vol. 5, 073608.

和文論文

- 1) T. Leelaprachakul, 久保淳, 梅野宜崇: ポリカーボネート破壊の粗視化分子動力学解析:分子鎖の絡み合いと空間分布からの破断応力予測モデルの提案, 2022, 材料 Vol. 71, No. 2, pp.151-158.

国際会議アブストラクト

- 1) Y. Umeno, A. Kubo, J.-M. Albina and T. Leelaprachakul: Coarse-grained modeling of fracture in polycarbonate, THERMEC'2021 virtual conference, 2021.05.10-14, TU Graz, Austria.
- 2) Y. Umeno and A. Kubo: Atomistic and multiscale model simulations of dislocation behavior in nanoscale metal fatigue, MRM2021 Materials Research Meeting, 2021.12.13-17, Yokohama, Japan.

学会講演論文

- 1) 久保淳, 梅野宜崇: SiC系構造材料の微視的構造変化に関する分子動力学解析 機械学習型ポテンシャルモデルの構築とクリープ変形シミュレーション, 第6回マルチスケール材料力学シンポジウム, 2021年5月21日, オンライン, 講演論文集USB.
- 2) 梅野宜崇, T. Leelaprachakul, 久保淳: ポリカーボネート破壊における絡み合い効果に関する粗視化分子動力学解析, 第6回マルチスケール材料力学シンポジウム, 2021年5月21日, オンライン, 講演論文集USB.
- 3) 長原颯大, 作道直幸, 久保淳, 梅野宜崇, 酒井崇匡: 粗視化分子動力学法による水中 Poly(ethylene glycol) 一本鎖の弾性の解析, 第70回高分子学会年次大会, 2021年5月26日~28日, オンライン, 講演論文集USB.
- 4) 梅野宜崇, 久保淳: 第一原理計算による破壊靱性値評価は妥当か? 分子動力学解析による検証, 日本機械学会M&M2021材料力学カンファレンス, 2021年9月15日~16日, オンライン, 講演論文集USB.
- 5) 梅野宜崇, 久保淳, 王楚天: 座屈を利用したカーボンナノチューブの物性変化に関する原子モデル解析, 日本機械学会第34回計算力学講演会, 2021年9月21日~23日, オンライン, 講演論文集USB.

- 6) 久保淳, 梅野宜崇:アモルファス炭化珪素のクリープ変形に関する分子動力学解析:組成比の影響, 日本機械学会第34回計算力学講演会, 2021年9月21日～23日, 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」

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拍出し、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) 動脈瘤壁への薬剤内包ミセル輸送を再現するマルチスケール解析

腹部大動脈瘤に対する治療法として薬剤投与が有効であると考えられており、その臨床化に向けて薬剤ミセルの滞留メカニズムの解明を目指している。本研究では、まずミリスケールの内腔-血管壁連成モデルを構築し、内腔から血管壁中へと侵入する血流速度を把握する。次に血管壁内の詳細な構造に焦点を当てたメソスケール血管壁モデルを構築し、ミリスケールモデルの流体解析で得られた血流速度を境界条件として流体解析を行う。得られた流れ場をもとに、血管壁内に侵入したミセルの粒子追跡解析を行った結果、10~30 μm ほどの大きさの内部要素近傍で長時間滞留することが示された。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Yuan, C., Zhang, H., Li, X., Oishi, M., Oshima, M., Yao, Q., Li, F.: Numerical Investigation of T-Shaped Microfluidic Oscillator with Viscoelastic Fluid, 2021, Micromachines, Vol. 12(5), pp. 477, doi: <https://doi.org/10.3390/mi12050477>.
- 2) Guo, D. S., Li, X. B., Zhang, H. N., Li, F. C., Ming, P. J., Oishi, M., Oshima, M.: Experimental study on the characteristics of temperature dependent surface/interfacial properties of a non-ionic surfactant aqueous solution at quasi-thermal equilibrium condition, 2021, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 182, pp: 122003, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.122003>.

著書・訳書

- 1) 大島まり: 医用工学ハンドブック 第 2 編 医用工学の基礎知識・第 3 章 シミュレーション 1 全身循環のマルチスケール血流シミュレーション, 2022, エヌ・ティー・エス.

学会講演論文

- 1) 山田茂樹, 大島まり, 尹彰永, 伊藤広貴, 渡邊嘉之, 前田修作, 武石直樹, 大谷智仁, 和田成生, 野崎和彦: 脳循環と脳脊髄液の流れを統合した動態解析モデル, 2021, 生体医工学, (Proc), Vol. 59, pp. 764-766.

総説・解説

- 1) 大島まり:数値シミュレーションにおける不確かさの定量化の基本的な考え方, 2021, 医療機器学, Vol. 91(4), pp. 367-372.
- 2) 大島まり:CISS におけるシミュレーションソフトウェア開発と利用(6) 循環器系のマルチスケール血流シミュレーション, 2022, 機械の研究, Vol. 74(3), pp. 165-170.

(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標準の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長である。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の I/O の改善などを行った。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、Pipek-Mezey 法による局在化軌道の計算方法の改善を行った。来年度も引き続き実施する。

(3) ProteinDF/QCLO のオープンソース化

(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) SARS-CoV-2 タンパク質の電子状態解析

新型コロナウイルス(SARS-CoV-2)の2つのタンパク質の全電子計算を実行した。一つは、RNA が結合するヌクレオカプシドタンパク質の N 末端ドメインであり、RNA 結合まわりには Arg や酸性アミノ酸残基の Glu, 芳香環を持つ Tyr などが位置しており複雑な静電場を形成していることが明らかとなった。本研究は、UTokyoGSC プログラムの一環として実施した。もう一つは、ACE2 と結合するスパイクタンパク質の ACE2 結合ドメインであり、この計算結果を用いて ACE2 との間の相互作用を解析した。

(5) PETase 活性中心の電子状態研究

ポリエチレンテレフタレート(PET)を分解できる酵素の一つとして、PETase が知られている。PETase は他の PET を分解できる酵素より、低い温度で PET を分解する。PETase は Serine protease の 1 種であり活性中心は Ser-His-Asp である。これら3残基は水素結合が形成されるように空間的に配置されており、Ser 側鎖の γ 酸素が基質を求核攻撃するとみられる。本研究では、PETase の基質特異性と PET 分解反

応機構を解明するために、正準分子軌道計算による PETase の活性中心とその周辺タンパク質の電子状態を解析した。

(6) インターフェロン $\alpha 2$ の電子構造研究

インターフェロン (IFN) は、ウィルスなどの侵入に対して細胞が分泌するサイトカインである。IFN $\alpha 2$ は 165 残基からなる I 型インターフェロンで、ヒトで IFN $\alpha 2b$ 変異体が市販されており、天然と活性に有意な差がある。IFN $\alpha 2$ と IFN $\alpha 2b$ のアミノ酸配列の変異は 1 か所だけであり (Lys23Arg)、電荷に変化はなく、この 23 番目のアミノ酸残基は IFN 受容体の結合部位には存在しない。なぜ IFN $\alpha 2$ と IFN $\alpha 2b$ で活性が異なるのかを立体構造では説明ができない。本研究では、変異体による電子状態の変化が遠方にまで及び活性の違いを与えていると仮説を立て IFN $\alpha 2$ の作用機序を電子レベルで解析した。

(7) RNA ポリメラーゼの電子状態解析

昨年度に引き続き、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。

(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, Vol. 85, No. 5, pp.1275-1282, 2021. (ページ数確定につき再録)
- 2) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: “Theoretical Study of the Receptor-Binding Domain of Spike Protein of SARS-CoV-2 by Canonical Molecular Orbital Calculation”, AIP Conference Proceedings, 2021, in press.

国際会議アブストラクト

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: “Theoretical study of the receptor-binding domain of spike protein of SARS-CoV-2 by canonical molecular orbital calculation (invited)”, 16th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE2021), Crete, Greece, Sep. 1, 2021.
- 2) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: “Orchestration software for canonical Kohn-Sham molecular orbital calculation of proteins: QCLObot”, Pacificchem 2021, online, Dec. 16, 2021.

学会講演論文

- 1) 平野敏行, 坂口優羽, 佐藤文俊: “新型コロナウイルス RNA 結合ドメインの電子状態”, 第 15 回分

子科学討論会, 北海道(札幌), 9月19日, 2021.

- 2) 王天宇, 平野敏行, 佐藤文俊: “正準分子軌道法による PETase 活性中心の電子状態についての研究”, 第15回分子科学討論会, 北海道(札幌), 9月18日, 2021.
- 3) 中岡亮太, 平野敏行, 佐藤文俊: “正準分子軌道計算によるインターフェロン $\alpha 2$ の電子状態解析”, 第15回分子科学討論会, 北海道(札幌), 9月21日, 2021.

総説・解説・紀要

- 1) 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”, 生産研究, 73, 157, 2021.
- 2) 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.23, No.5, 2021.
- 3) 佐藤文俊: “分子軌道法によるタンパク質のシミュレーション”, 機械の研究, 2022, in press.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 佐藤文俊, 基盤研究(B)「正準分子軌道解析に基づくタンパク質性能改変の研究」

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) 「大規模量子化学計算に関する共同研究」

その他

- 1) 佐藤文俊, 工藤一秋, 展開研究

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、イオン液体、ソフトマテリアルなどの先進材料を研究対象としてきた。令和3年度においては以下の研究を行ってきた。

(1) 人工知能技術を利用した原子吸着特性の予測

原子が他の原子や分子、固体表面に近づくと、それぞれが持っている軌道が相互作用し、時としてお互いの電子を共有・移動し「化学結合」が形成される。お互いの原子の大きさや、共有・移動する電子の量によって化学結合の強度や距離が決まることが知られている。つまり、化学結合の形成は吸着や化学反応のきっかけとなるためその理解は物質開発において重要である。

一方で、化学結合の強度や距離などの結合物性は、結合をつくる原子—原子、原子—分子、原子—固体などの組み合わせによって異なる。結合物性を知るためには、結合のモデルを作成し、計算機を使って数分から数時間かけてシミュレーションする必要がある。さらに、さまざまな元素種の各種への吸着／結合物性を知るには、それらすべてに対して同様なシミュレーションを実施する必要がある。

そこで、そのようなシミュレーションを行わずに、結合する「前」から得られる情報だけで、結合物性を予測するための人工知能の構築を目指した。本研究では入力層と出力層が脳を模した多層のネットワークでつながれている「ニューラルネットワーク」を利用した。結合する「前」の情報だけで、化学結合を予測する人工知能を構築することを目指し、入力データに、結合する「前」、つまり原子や分子が孤立している状態の情報を、出力データに、結合した「後」の結合物性を利用してネットワークを築いた。

本研究では、結合する「前」の系における状態密度を入力データに用いることで、結合物性を高精度に予測できることを明らかにした。このことは、結合する「前」の状態密度が、結合物性を予測するための優れた記述子であることを示している。また、原子—原子に加えて、原子—分子、原子—固体の結合強度、結合距離、フェルミ準位、共有結合電荷を高精度に予測するモデルを構築することに成功した。

化学結合の形成は、吸着や化学反応などのきっかけとして重要である。そのような化学結合を高精度に予測できる記述子を発見した本研究により、物質開発が加速できると期待される。

(2) スペクトルを記述子として用いた物性予測

物質開発の現場では、分光実験によりスペクトルを測定して物質の結晶構造や電子状態が調べられている。分光実験に用いる装置や測定条件によって、得られたスペクトルから取得できる情報が異なる。たとえば、物質に電子線や X 線を照射する内殻電子励起分光法で得られるスペクトルは、物質の局所的な電子構造の情報を主に有していることが広く知られている。それぞれの分光実験により得られる物性情報は、数種類程度であった。そのため、別の情報が必要な場合は、別の装置や条件で実験し直す必要があった。

本研究グループは、このようなスペクトルの限界を打破すべく、人工知能で用いられる機械学習法の

一種であるニューラルネットワークを利用し、内殻電子励起スペクトルから得られる物性の情報を調べた。これまでのさまざまな分光実験の経験をもとに、容易に入手可能な3つの情報をニューラルネットワークの入力に追加した結果、1つの内殻電子励起スペクトルから、11種類の物性を高精度に抽出することに成功した。得られた物性の中には、これまで本スペクトルから取得できていることが知られていた電子状態に関する情報に加えて、本スペクトルとは無関係と考えられてきた光学特性、振動特性、さらに、分子量や、分子の安定性(内部エネルギー)に関する情報も含まれていた。

本研究により、人工知能技術に人間のノウハウを組み合わせることで、これまでの常識とは異なる多数の情報をスペクトルから抽出できることが分かった。一度の分光実験で多くの情報を得ることができれば、物質開発を効率的に行うことができると期待される。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) Kiyou Shibata, Eiki Suzuki, and Teruyasu Mizoguchi: Dataset on structure and physical properties of stable diatomic systems based on van der Waals density functional method, Data in Brief, 36 (2021) 106968. [Open Access]
- 2) Eiki Suzuki, Kiyou Shibata, and Teruyasu Mizoguchi: Accurate prediction of bonding properties by a machine learning-based model using isolated states before bonding, Appl. Phys. Exp. 14 (2021) 085503-1-6. doi: 10.35848/1882-0786/ac083b. [Open Access] [This paper was selected as "Spotlights 2021 in Applied Physics Express"]
- 3) Izumi Takahara and Teruyasu Mizoguchi: First principles study on formation and migration energies of sodium and lithium in graphite, Phys. Rev. Mater. 5 (2021) 085401-1-7, doi:10.1103/PhysRevMaterials.5.085401.
- 4) Hideyo Tsurusawa, Nobuto Nakanishi, Kayoko Kawano, Yiqiong Chen, Mikhail Dutka, Brandon Van Leer, Teruyasu Mizoguchi: Robotic fabrication of high-quality lamellae for aberration-corrected transmission electron microscopy, Scientific Reports, 11 (2021) 21599-1-12. [Open Access] (arxiv)
- 5) Masashi Tsubaki and Teruyasu Mizoguchi: Quantum Deep Descriptor: Physically Informed Transfer Learning from Small Molecules to Polymers, J. Chem. Theory Comput., 17 (2021) 7814-7821. [Open Access]
- 6) Kunyen Liao, Kiyou Shibata, and Teruyasu Mizoguchi: Nanoscale Investigation of Local Thermal Expansion at SrTiO₃ Grain Boundaries by Electron Energy Loss Spectroscopy, Nano Letters, 21 (2021) 10416-10422. [Open Access]
- 7) Kakeru Kikumasa, Shin Kiyohara, Kiyou Shibata, and Teruyasu Mizoguchi: Quantification of the Properties of Organic Molecules Using Core-Loss Spectra as Neural Network Descriptors, Advanced Intelligent Systems, 4 (2022) 2100103-1-10. doi:10.1002/aisy.202100103. [Open Access]
- 8) Yaoshu Xie, Kiyou Shibata, and Teruyasu Mizoguchi: A brute-force code searching for cell of non-

identical displacement for CSL grain boundaries and interfaces, *Comp. Phys. Comm.* 273 (2022) 108260-1-8.

- 9) Shin Kiyohara, Kakeru Kikumasa, Kiyoh Shibata, and Teruyasu Mizoguchi: Automatic determination of the spectrum–structure relationship by tree structure-based unsupervised and supervised learning, *Ultramicroscopy*, 233 (2022) 113438-1-8 [Open Access]
- 10) Y. Miyazaki, T. Yokouchi, K. Shibata, Y. Chen, H. Arisawa, T. Mizoguchi, E. Saitoh, and Y. Shiomi: Quantum Oscillations from Fermi arc Surface States in Cd₃As₂ Nanowires, *Phys. Rev. Res.* accepted.
- 11) K. Shibata, K. Kikumasa, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi: Simulated carbon K edge spectral database of organic molecules, *Scientific Data* in press.

和文論文

- 1) 三石和貴, 中澤克昭, 溝口照康, 佐川隆亮, 山崎裕一: ピクセル型 STEM 検出器によるタイコグラフィの初歩, *顕微鏡 Vol.56* (2021) 31-37.
- 2) 溝口照康, 柴田基洋: 人工知能を利用した界面物性および表面物性の予測, *セラミックデータブック 2021/2022, Vol.49*, p37-42.

国際会議アブストラクト

- 1) Kunyen Liao, Kiyoh Shibata, and Teruyasu Mizoguchi: International Conference on Ceramics (ICC), 2021, online, April 28th, 2021.
- 2) Katsuaki Nakazawa, Kiyoh Shibata, and Teruyasu Mizoguchi: International Conference on Ceramics (ICC), 2021, online, April 28th, 2021.
- 3) Teruyasu Mizoguchi, Kiyoh Shibata, Eiki Suzuki, and Kakeru Kikumasa: Data-driven Approaches for Materials Characterization: Core-loss Spectroscopy & Surface Adsorption, The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS9), 2021, online, April 28th, 2021.
- 4) Teruyasu Mizoguchi: In-situ STEM observation of heterogeneous structure in glass and ionic liquid, *PacificChem 2021*, online, Dec. 20, 2021.
- 5) Teruyasu Mizoguchi: Vibrational and coordinational structures in glass investigated by STEM-EELS Online Symposium of Glass Science and Technology, Zhejiang University, online, Jan. 14, 2022.
- 6) Teruyasu Mizoguchi: Vibrational and coordinational structures in glass investigated by STEM-EELS Online Symposium of Glass Science and Technology, Zhejiang University, online, Jan. 14, 2022.
- 7) Teruyasu Mizoguchi: Prediction of materials properties from core-loss spectrum using neural network, American Physical Society (APS) Spring Meeting 2022, 3/18, online.

学会講演論文

- 1) 溝口照康: データ駆動型 EELS スペクトル解析, 日本顕微鏡学会学術講演会, つくば国際会議場, つくば市, 5/15, 2021.
- 2) Kunyen Liao, 柴田基洋, 溝口照康: Measurement of Local Thermal Expansion in Ceramics with Valence EELS, 日本顕微鏡学会, つくば, 茨木, 6/15, 2021.

- 3) 清原慎, 菊政翔, 柴田基洋, 溝口照康:ニューラルネットワークの感度解析に基づいた ELNES/XANES 解釈法の開発, 日本顕微鏡学会, つくば, 茨木, 6/15, 2021.
- 4) 柴田基洋, 清原慎, 菊政翔, 溝口照康:ニューラルネットワークによる内殻励起スペクトルからの物性予測, 日本顕微鏡学会, つくば, 茨木, 6/15, 2021.
- 5) 溝口照康:機械学習を利用したスペクトル解析, 応用物理学会 光波センシング技術研究会, オンライン, 7/13, 2021.
- 6) 柴田基洋, 鈴木叡輝, 溝口照康:二原子分子についての結合状態データベースの作成と機械学習を用いた結合予測, 日本金属学会秋季大会, オンライン, 9/16, 2021.
- 7) Kunyen Liao, 柴田基洋, 溝口照康:電子エネルギー損失分光法による酸化物セラミック中熱膨張率の局所解析, 日本金属学会秋季大会, オンライン, 9/17, 2021.
- 8) 畑勇氣, Yaoshu Xie, 柴田基洋, 溝口照康:対称傾角粒界データベースの構築と情報科学手法による構造予測の検討, 電子材料研究討論会, オンライン, 11/5, 2021.
- 9) 溝口照康, 畑勇氣, 柴田基洋:機械学習, 第一原理計算および電子顕微鏡を活用した材料の構造・物性解析, 電子材料研究討論会, オンライン, 11/5, 2021.
- 10) 溝口照康:第一原理計算と電子顕微鏡, 情報科学を用いた物質研究, 東京理科大学特別講義, オンライン, Nov. 9, 2021.
- 11) 溝口照康:機械学習を活用した機能コア解析, 第 15 回物性科学領域横断研究会, オンライン, Nov. 26, 2021.
- 12) 溝口照康:EELS の基礎と解釈, 分析電子顕微鏡研究討論会, オンライン, Dec. 9, 2021.
- 13) 溝口照康:機械学習, 第一原理計算, ナノ計測を活用した物質の構造解析, ニューガラスフォーラム, オンライン, Dec. 21, 2021.
- 14) 溝口照康:スペクトルを記述子とした物性予測, JST 情報計測 講演会, オンライン, Dec. 25, 2021.
- 15) 溝口照康:機械学習を活用した構造機能相関およびスペクトル機能相関の解析, ダイナミックアライアンス合同分科会, オンライン, 2/2, 2022.
- 16) 溝口照康:放射光および TEM で測定される内殻電子励起スペクトルの情報科学解析, 日本学術振興会 R026 委員会第 8 回研究会, オンライン, 3/2, 2022.

(2)研究プロジェクト

民間等との共同研究

- 1) 「マテリアルズインフォマティクスに関する研究」 国内素材メーカー
- 2) 「エネルギー材料開発に関する研究」 国内素材メーカー
- 3) 「ソフトマテリアルの界面解析に関する研究」 国内化学メーカー

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) JST-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れる。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解明するとともに、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) Wonjun Choi, Ruchi Choudhary, Ryoza Ooka: Development of chiller-attached apparatus for accurate initial ground temperature measurement: Insights from global sensitivity analysis of thermal response tests, 2021.5, Energy and Buildings.
- 2) Shan Gao, Ryoza Ooka, Wonseok Oh: Experimental assessment of convective and radiative heat transfer coefficients for various clothing ensembles, 2021.5, International Journal of Biometeorology.
- 3) Mengtao Han, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto: Effects of wall function model in lattice Boltzmann method-based large-eddy simulation on built environment flows, 2021.5, Building and Environment.
- 4) Mengtao Han, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Wonseok Oh, Yuchen Bu, Shuyuan Hu: Measurements of exhaled airflow velocity through human coughs using particle image velocimetry, 2021.6, Building and Environment.
- 5) Yunchen Bu, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Wonseok Oh: Recent research on expiratory particles in respiratory viral infection and control strategies: A review, 2021.6, Sustainable Cities and Society.
- 6) Qi Zhou, Ryoza Ooka: Performance of neural network for indoor airflow prediction: Sensitivity towards weight initialization, 2021.9, Energy and Buildings.
- 7) Chao Lin, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Hongyuan Jia: Eulerian RANS simulations of near-field pollutant dispersion around buildings using concentration diffusivity limiter with travel time, 2021.9, Building and Environment.
- 8) Huai-Yu Zhong, Chao Lin, Yang Sun, Hideki Kikumoto, Ryoza Ooka, Hong-Liang Zhang, Hong Hu, Fu-Yun Zhao, Carlos Jimenez-Bescos: Boundary layer wind tunnel modeling experiments on pumping ventilation through a three-story reduce-scaled building with two openings, 2021.9, Building and Environment.
- 9) Mengtao Han, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Wonseok Oh, Yuchen Bu, Shuyuan Hu: Experimental measurements of airflow features and velocity distribution exhaled from sneeze and speech using particle image velocimetry, 2021.9, Building and Environment.
- 10) Chao Lin, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto: Reynolds-averaged Eulerian simulation of elevated source pollutant dispersion in turbulent boundary layer using concentration diffusivity limiter, 2022.1,

Building and Environment.

- 11) Doyun Lee, Ryoza Ooka, Yuki Mastuda, Shintaro Ikeda, Wonjun Choi: Experimental analysis of artificial intelligence-based model predictive control for thermal energy storage under different cooling load conditions, 2022.1, Sustainable Cities and Society.

和文論文

- 1) 大岡龍三, 周琦: 深層学習を用いた室内気流の高速かつ高精度な予測手法, 2021.9, 混相流.
- 2) 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, 2021.9, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 3) 文可, 大岡龍三, 崔元準, 塩谷正樹, 下泰蔵: 天空熱源ヒートポンプシステムのライフサイクルに亘るコスト低減と性能向上技術の開発, 2021.9, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 4) 魏誠浩, 大岡龍三, 周琦: 深層学習による室内気流分布・温度分布予測手法の開発, 2021.9, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 5) 尾崎空奈, 大岡龍三, 池田伸太郎, 倉富匡弘, 田中勝彦: オートチューニングを用いた機械学習による電力需要予測に関する研究, 2021.9, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 6) ト韻誼, 大岡龍三, 菊本英紀, 呉元錫: 室内環境における空気清浄機配置とマスクの有無が感染リスクに及ぼす影響の数値解析, 2021.9, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 7) 周琦, 大岡龍三: 深層学習とエネルギーシミュレーションツール連成解析手法の開発, 2021.9, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 8) 中井麻友香, 大岡龍三, 池田伸太郎, 倉富匡弘, 田中勝彦, 尾崎空奈, 高橋健: 機械学習による病院の電力需要予測特徴抽出による予測精度の向上について, 2021.9, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 9) 高橋健, 大岡龍三, 池田伸太郎: 異常値検知を用いたBEMSデータ前処理の自動化, 2021.9, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 10) 韓夢濤, 大岡龍三, 菊本英紀, 呉元錫, ト韻誼, 胡書媛: 人の咳により噴出する気流及び飛沫・飛沫核の運動特性の把握(その1) PIVを用いた咳気流の速度分布の測定, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 11) 呉元錫, 大岡龍三, 菊本英紀, 韓夢濤: 人の咳により噴出する気流及び飛沫・飛沫核の運動特性の把握(その2) 数値解析をもちいた咳による気流モデルの構築, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 12) 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4) 異なる負荷パターンによる検証実験, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 13) 林超, 大岡龍三, 菊本英紀: 乱流拡散リミッターを用いた都市キャニオンにおける汚染物質拡散のRANS シミュレーション, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 14) 文可, 大岡龍三, 塩谷正樹, 崔元準: 天空熱源ヒートポンプシステムのライフサイクルに亘るコスト低減と性能向上技術の開発(その5) Modelica による天空熱源ヒートポンプシステムのモデリング,

2021.9, 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: 幾何形状と熱物性の不確実性を考慮した地中熱交換器熱抵抗の確率的評価, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 16) 魏誠浩, 大岡龍三, 周琦: 深層学習による室内気流分布・温度分布予測手法の開発(その1) 三次元空間温度分布の再現に関する検討, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 17) 尾崎空奈, 大岡龍三, 池田伸太郎: オートチューニングを用いた機械学習による電力需要予測に関する研究, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 18) ト韻諶, 大岡龍三, 菊本英紀, 呉元錫: 空気清浄機の室内汚染質(ウイルス)除去性能と濃度分布の予測(その2) 感染者がいる寝室における空気清浄機の位置が感染リスク分布に及ぼす影響, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 19) 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6) エネルギーシミュレーションツールとの連成解析フレームワークの構築, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 20) 中井麻友香, 大岡龍三, 池田伸太郎, 尾崎空奈, 高橋健: アンサンブル機械学習による病院の電力需要予測の研究, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 21) 高橋健, 大岡龍三, 池田伸太郎: エネルギーデータ前処理の自動化における異常値検知と欠損データの代入, 2021.9, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 22) 周琦, 大岡龍三: 深層学習による室内気流予測手法の開発, 2021.9, 日本流体力学会年会.
- 23) 魏誠浩, 大岡龍三, 周琦: 深層学習による室内気流分布・温度分布予測手法の開発(その3) 訓練ケースの選択が非定常予測に与える影響, 2021.9, 日本流体力学会年会.

国際会議予稿集

- 1) Doyun Lee, Ryoza Ooka, Yuki Matsuda, Shintaro Ikeda, and Wonjun Choi: Experimental Investigation of Model Predictive Control for Thermal Energy Storage System Using Artificial Intelligence, 2021.6, Mediterranean Conference on Control and Automation (MED) 2021.
- 2) Yuki Matsuda, Ryoza Ooka, Shintaro Ikeda: The Development of Cloud-based Building Automation System and Creating Predictive Models of HVAC System with Machine Learning, 2021.6, Mediterranean Conference on Control and Automation (MED) 2021.
- 3) Doyun Lee, Ryoza Ooka, Yuki Matsuda, Shintaro Ikeda, and Wonjun Choi: Experimental study of AI-based model predictive control strategy for thermal energy storage system, 2021.6, EnerStock2021.
- 4) Yuki Matsuda, Ryoza Ooka, Doyun Lee: Building a predictive model for a heat source system with thermal energy storage using machine learning, 2021.6, EnerStock2021.
- 5) Qi Zhou, Ryoza Ooka: Neural network for indoor airflow prediction with CFD database, 2021.8, IBPC2021.
- 6) Mayuka Nakai, Ryoza Ooka, Shintaro Ikeda: Study of power demand forecasting of a hospital by ensemble machine learning, 2021.8, IBPC2021.
- 7) Ken Takahashi, Ryoza Ooka, Shintaro Ikeda: Anomaly detection and missing data imputation in building energy data for automated data pre-processing, 2021.8, IBPC2021.

(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」
- 2) 挑戦的研究萌芽「飛沫・飛沫核拡散の動的物理モデルの構築」

民間等との共同研究

- 1) AIを活用した熱源・空調制御システムの汎用化に関する研究
- 2) ミスト機器における屋内環境評価手法の研究
- 3) 多角的な再生可能エネルギー熱利用システムの最適運転制御手法の開発
- 4) 需要予測手法に関する研究
- 5) 人工知能を用いた室内環境の予測・制御に関する研究

高次元配列としてのテンソルデータの解析は物理数値解析や機械学習など様々な分野で必要性が高まっており、階数が高くデータ量が膨大になるテンソルデータを容易に扱うための分解手法としてテンソルトレイン分解が提案されている。これは空間量が $O(n^d)$ である階数 d 、次元数 n の高次元テンソルを、 d について線形な空間量 $O(dnr^2)$ の分解形に圧縮する手法であり近年注目されつつある。テンソルトレイン分解アルゴリズムの中で最も用いられている TT-SVD は、計算に多数の SVD を含み膨大な計算コストがかかることが懸念されている。このテンソルトレイン分解計算の高速化のための分散並列計算手法として Xiaokang らによって ADTT 法が提案された。ADTT 法は TT-SVD で逐次依存に実行される SVD を並列に実行できるようにした手法であり、分散並列に適したテンソルトレイン分解手法として高く評価されたが、実用性においていくつかの問題点があった。まず後処理の行列積計算が逐次・全ステップ依存でしか実行できない点、次に SVD 実行の誤差閾値が定められていない点、そして全ステップの SVD でテンソルの全要素を用いる点である。そこで本研究ではこれらの問題点を解決する手法として、既存の ADTT アルゴリズムに対する性能改善アルゴリズムと、領域分割を用いた分散並列アルゴリズムの 2 つの手法を提案した。ADTT 法が TT-SVD の拡張である点に着目した改善アルゴリズムによって、ADTT 法の逐次実行部を高速かつ並列に実行できるようになった。また一定の条件下において領域分割アルゴリズムを用いることにより、並列単位ごとの計算量を並列数に反比例するように割り当てられ、ADTT 法よりも高速かつ低コストでテンソルトレイン分解を並列に実行できるようになった。下図には ADTT 法と PTTD 法の高速化比を示す。 $d=8$, $n=5$, $N=250$ の random テンソルでそれぞれ ADTT 法と PTTD 法を並列数を変えて実行した場合の高速化比である。ADTT 法は $k=d/2$ 近くのステップの SVD コストが非常に重く、実行時間・高速化比どちらの観点においても PTTD 法の方が並列性能が高いことが確認できる。

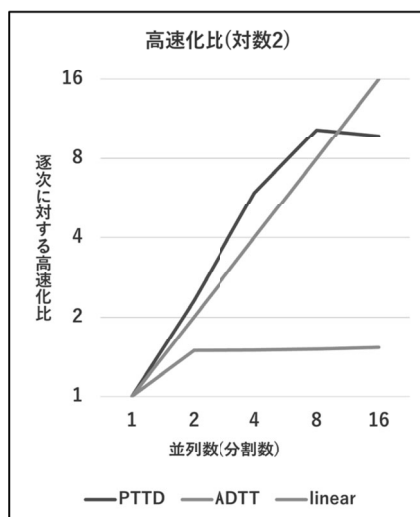


図 PTTD の ADTT に対する高速化比

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Tatsuya Mitsuda and Kenji Ono: A Scalable Parallel Partition Tridiagonal Solver for Many-Core and Low B/F Processors, the 23rd IEEE International Workshop on Parallel and Distributed Scientific and Engineering Computing (PDSEC 2022), accepted, 2022.
- 2) Katsumi Hagita, Takahiro Murashima, Masao Ogino, Manabu Omiya, Kenji Ono, Tetsuo Deguchi, Hiroshi Jinnai and Toshihiro Kawakatsu: Efficient compressed database of equilibrated configurations of ring-linear polymer blends for MD simulations, Scientific Data, Vol.9, 40, <https://doi.org/10.1038/s41597-022-01138-3>, 2022.

学会講演論文

- 1) 宮城 充宏, 山本 肇, 飯塚 幹夫, 小野 謙二: 時間並列計算手法 Parareal 法による地下水流動シミュレーションの高速化, Transactions of JSCES, <https://doi.org/10.11421/jscs.2021.20210013>, 2021.
- 2) 那須 厚介, 古川 竜次, 福里 翔丸, 宗像 瑞恵, 吉川 浩行, 小野 謙二: 入口管高さが異なるドーム型サイクロンセパレータの捕集性能の数値予測, 日本機械学会 九州支部 第 75 期総会 講演会, 2022.

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。

2021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。

2021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。

2021 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) Takashi Nakazawa, Takashi Misaka, Yosuke Hasegawa: Optimal Design for Suppressing Time Fluctuation Part of Two-Dimensional Jet in Crossflow, International Journal of Computational Fluid Dynamics, accepted.
- 2) Ansel L. Blumens, Minglang Yin, Hiroyuki Nakajima, Yosuke Hasegawa, Zhen Li, Geroge E. Karniadakis: Multiscale parareal algorithm for long-time mesoscopic simulations of microvascular blood flow in zebrafish: Computational Mechanics, Vol. 68, 1131-1152 (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: PLOS Computational Biology, June 16, (2021).
- 4) Arjun J. Kaithakkal, Yukinori Kamenita, Yosuke Hasegawa: Dissimilar heat transfer enhancement in a fully developed laminar channel flow subject to a traveling wave-like wall blowing and suction: International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 164, 120485 (2021).

和文論文

- 1) 伊藤宗嵩, 長谷川洋介: チャネル乱流の最適制御におけるレイノルズ数の影響, 生産研究, Vol. 74, No.1, pp. 29-33 (2022).
- 2) 園田隆博, 劉竺辰, 伊藤宗嵩, 長谷川洋介: 壁乱流制御における強化学習の有効性の検証, 生産研究, Vol. 74, No.1, pp. 35-38 (2022).

国際会議予稿集

- 1) K. Kaneko, N. Ujikawa, Y. Hasegawa, T. Hayakawa, and H. Suzuki, A numerical simulation of pumpless-chaotic micromixer utilizing the vibration-induced flow, Acoustofluidics 2021, Online, 26-27 August 2021, Oral presentation.
- 2) K. Kaneko, M. Tsugane, T. Sato, T. Hayakawa, Y. Hasegawa, H. Suzuki, Evaluation of the Capturing Efficiency of Exosome in a Micromixer Driven by the Vibration-Induced Flow, μ TAS 2021, online, 2021.10, poster presentation.
- 3) T. Sato, H. Zhitai, N. Ujikawa, K. Kaneko, Y. Hasegawa, T. Hayakawa, H. Suzuki, Numerical and Experimental Analysis of the Vibration-Induced Flow around Complex Pillar Shapes, μ TAS 2021, online, 2021.10, poster presentation.
- 4) K. Kaneko, N. Ujikawa, Y. Hasegawa, T. Hayakawa, H. Suzuki, Numerical simulation of microfluidics-based nanoparticle capture utilizing the vibration-induced flow, Pacificchem 2021,

Online, December 16 - 21, 2021, Oral presentation.

- 5) T. Sato, K. Kaneko, T. Okano, Y. Hasegawa, T. Hayakawa, H. Suzuki, Evaluation of the capturing efficiency nanoparticles in the vibration-induced micromixer, Pacifichem 2021, Online, December 16 - 21, 2021, Oral presentation.

学会講演論文

- 1) 園田隆博, Liu, Z., 伊藤宗嵩, 長谷川洋介:「強化学習を用いた摩擦抵抗低減のための壁乱流制御則の開発」, 日本機械学会 2021年度 年次大会, 千葉, 2021年9月5-8日.
- 2) Liu, Z., 長谷川洋介:「チャネル乱流における過去と未来の壁面計測データが大規模構造推定に与える影響」, 日本流体力学会年会2021, 東大生研, 2021年9月21-23日.
- 3) 伊藤宗嵩, 長谷川洋介:「チャネル乱流の最適制御におけるレイノルズ数効果の調査」, 日本流体力学会年会2021, 東大生研, 2021年9月21-23日.
- 4) 園田隆博, Liu, Z., 伊藤宗嵩, 長谷川洋介:「壁乱流制御のための強化学習におけるハイパーパラメータの影響」, 日本流体力学会年会2021, 東大生研, 2021年9月21-23日.
- 5) Chen, D., 伊藤宗嵩, 亀谷幸憲, 長谷川洋介:「OpenFOAMを用いた熱交換器設計のための多目的トポロジー最適化」, 日本流体力学会年会2021, 東大生研, 2021年9月21-23日.
- 6) 細矢太一, 伊藤宗嵩, 亀谷幸憲, 塚原隆裕, 長谷川洋介:「4次元変分法を用いたダクト内円柱周り流れ場推定における計測領域の影響」, 日本流体力学会年会2021, 東大生研, 2021年9月21-23日.
- 7) Yang, L., Henzel, D., Karniadakis, G., 長谷川洋介:「深層カーネルを用いた物理法則を考慮したガウス過程によるスカラー源と濃度場の推定」, 日本流体力学会年会2021, 東大生研, 2021年9月21-23日.
- 8) 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スカラー源と濃度場推定のためのセンサー配置の能動学習」, 日本流体力学会年会2021, 東大生研, 2021年9月21-23日.
- 9) Wang, H., 長谷川洋介:「高精度インクジェット・プリンティングのための駆動波形のベイズ最適化」, 日本流体力学会年会2021, 東大生研, 2021年9月21-23日.
- 10) Kumar, V., Cai, S., 中倉満帆, 中嶋洋行, Karniadakis, G., 長谷川洋介:「人工知能速度測定を用いたゼブラフィッシュ後脳基底動脈の血流推定」, 日本流体力学会年会2021, 東大生研, 2021年9月21-23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 S「機械学習を活用した革新的流れ制御パラダイムの創出と実践」(分担)

民間等との共同研究

- 1) 「車載用送風機の最適設計のための解析技術開発」
- 2) 「随伴解析による金属 3DP を活用した熱交換器への応用」
- 3) 「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」
- 4) 「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」
- 5) 「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」
- 6) 「ディップコーティングによる成形品表面の平滑化に関する共同研究」

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「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)
- 2) (国研) 新エネルギー・産業技術総合開発機構「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／表面・構造機能化による新コンセプト熱物質交換器開発」(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) Hafiza Fatima Zahid, Punyawut Jiradilok, Vikas Singh Kuntal, Kohei Nagai: Investigation of the effects of multiple and multi-directional reinforcement on corrosion-induced concrete cracking pattern, Construction and Building Materials, Vol. 283, 122594, 2021.
<https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2021.122594>.
- 2) Mohamed Adel, Koji Matsumoto, Kohei Nagai: Crack-bridging degradation and evolution in SFRC structural beams under variable amplitude flexural cyclic loading, Composite Structures, Vol. 272,

- 114176, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2021.114176>.
- 3) Patrick Nicholas Hadinata, Djoni Simanta, Liyanto Eddy, Kohei Nagai: Crack Detection on Concrete Surfaces Using Deep Encoder-Decoder Convolutional Neural Network: A Comparison Study Between U-Net and DeepLabV3+, Journal of the Civil Engineering Forum, Vol. 7, No. 3, pp.323-334, 2021. <https://doi.org/10.22146/jcef.65288>.
 - 4) Kumar Avadh, Punyawut Jiradilok, John E. Bolander, Kohei Nagai: Direct observation of the local bond behavior between corroded reinforcing bars and concrete using digital image correlation, Cement and Concrete Composites, Vol. 123, 104180, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2021.104180>.
 - 5) John E. Bolander, Jan Eliáš, Gianluca Cusatis, Kohei Nagai: Discrete mechanical models of concrete fracture, Engineering Fracture Mechanics, Vol. 257, 108030, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2021.108030>.
 - 6) Vikas Singh Kuntal, Punyawut Jiradilok, John E. Bolander, Kohei Nagai: Estimating corrosion levels along confined steel bars in concrete using surface crack measurements and mesoscale simulations guided by model predictive control, Cement and Concrete Composites, Vol. 124, 104233, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2021.104233>.
 - 7) Mohamed Adel, Hiroshi Yokoyama, Hitoshi Tatsuta, Takanori Nomura, Yuki Ando, Takuro Nakamura, Hiroshi Masuya, Kohei Nagai: Early damage detection of fatigue failure for RC deck slabs under wheel load moving test using image analysis with artificial intelligence, Engineering Structures, Vol. 246, 113050, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2021.113050>.
 - 8) Suhas S. Joshi, Kumar Avadh, Vikas Singh Kuntal, Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai: Investigating the effect of rebar corrosion order and arrangement on cracking behaviour of RC panels using 3D discrete analysis, Construction and Building Materials, Vol. 325, 126730, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.126730>.

国際会議予稿集

- 1) Kumar Avadh, Kohei Nagai: Investigating the effect of corrosion on cracking and tension stiffening in reinforced concrete by 3D mesoscale discrete model, Proceedings of the 3rd CACRCS Workshop Capacity Assessment of Corroded Reinforced Concrete Structure, pp41-44, 2021.
- 2) Jie Luo, Yi Wang, Shingo Asamoto, Kohei Nagai: An Investigation of Reinforcement Confinement on ASR Expansion and Cracking by 3D RBSM, Proceedings of The 9th International Conference of Asian Concrete Federation (ACF2020/2021), MT63-72, 2021.
- 3) Suhas S Joshi, Kumar Avadh, Vikas Singh Kuntal, Kohei Nagai: Investigating the effect of sequence of corrosion application on the cracking pattern in concrete panel using 3D RBSM, Proceedings of the 9th International Conference of Asian Concrete Federation (ACF2020/2021), MT91-101, 2021.
- 4) Kohei Nagai: Mesoscale Simulation of Corroded Reinforced Concrete Members using a Discrete Analysis Model, Proceedings of the 2nd ZHITU Symposium on Advances in Civil Engineering,

pp.43-44, 2021.

- 5) Kumar Avadh, Kohei Nagai: Directly Observing the Interaction between Rebar and Concrete after Corrosion using Digital Image Correlation, Proceedings of the 2nd ZHITU Symposium on Advances in Civil Engineering, pp.140-141, 2021.
- 6) N. Suzuki, K. Nagai, T. Sanagawa: Reliability analysis on cantilever retaining walls embedded into stiff ground (Part 1: Contribution of major uncertainties in the elasto-plastic subgrade reaction method), Proceedings of the Second International Conference on Press-in Engineering 2021, CRC Press, 2021. <https://doi.org/10.1201/9781003215226>
- 7) N. Suzuki, Y. Ishihara, K. Nagai: Reliability analysis on cantilever retaining walls embedded into stiff ground (Part 2: Construction management with piling data), Proceedings of the Second International Conference on Press-in Engineering 2021, CRC Press, 2021. <https://doi.org/10.1201/9781003215226>
- 8) Michael Henry, Koji Matsumoto, Hiroshi Yokota, Kohei Nagai: Exploring the transfer of knowledge by Japanese engineers after participation in infrastructure maintenance training programs, Bridge Maintenance, Safety, Management, Life-Cycle Sustainability and Innovations, CRC Press, pp.4084-4088, 2021. <https://doi.org/10.1201/9780429279119>
- 9) Yi Wang, Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai: Investigation of Combined ASR and DEF Induced Damage on Concrete by Using RBSM Simulation, EASEC16, Lecture Notes in Civil Engineering, vol 101. Springer, Singapore, 2021. https://doi.org/10.1007/978-981-15-8079-6_175

総説・解説

- 1) 長井宏平: 論文を書くことについて学んだこと(米国UC Davisに滞在して), コンクリート工学, Vol.59, No.11, pp.971-972, 2021.
- 2) 長井宏平: 微細構造解析によるRC表面ひび割れ情報に基づくコンクリート内部の鉄筋腐食分布の逆推定, コンクリート工学, Vol.59, No.5, pp.410-415, 2021.
- 3) 陸好宏史, 伊藤均, 勝田浩一, 河邊修作, 関口豪賢, 中井聖棋, 長井宏平, 二井谷教治, 細居清剛, 細谷学, 牧田通, 吉野正道: PC 橋に関する海外の話題—イタリアにおける橋梁の崩壊事例、fib シンポジウム2019—, プレストレストコンクリート工学会第48回PC 技術講習会, pp.87-100, 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(B))【代表】損傷後に補修したRC構造性能評価のための微細構造解析システムの構築
- 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(清水建設株式会社)
- 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3年度 活動報告 Vol. 14

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

