



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 4 年度
活動報告

Vol. 15

はじめに

工学における課題解決と価値創成への貢献の観点から、今後のシミュレーション技術の果たすべき役割は「材料開発に始まり設計と製造を経て実用に使われ最終的に廃棄に至るまで、人工物がたどる一連の段階を一気通貫で事前にシミュレーションし、それぞれの段階で起こりえる課題を事前に予測し解決手段まで提示すること」にあると考えています。革新的シミュレーション研究センター(CISS)では、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きました。

CISS は、発足した平成 20 年からこれまで、文部科学省のプロジェクトを長期にわたり戦略的に推進し、令和 2 年度から令和 4 年度まで「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」の代表機関として実施してきました。令和 5 年 5 月からは 3 年間の予定で、「『富岳』成果創出加速プログラム」「AI の活用による HPC の産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築」を、代表実施機関(課題責任者加藤千幸教授)として推進しています。このプロジェクトは、AI の活用によって HPC の産業応用を飛躍的に拡大できることを実証し、研究開発により得られたソフトウェアの広汎なものづくり分野への展開に貢献するものです。

また、文部科学省のプロジェクトで開発したシミュレーション技術を利用して、平成 30 年度からは、首相のカーボンニュートラル宣言で一気に加速した水素社会構築事業の一翼を担う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)のプロジェクトを継続的に実施しています。現在は、2024 年度までの予定で、「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」を実施し、大規模有限要素解析と機械学習を融合させた最適設計のための IT 基盤の構築に係る研究開発を実施しています。

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、令和 5 年 4 月に三度目の改組を実施しましたが、今後も、第 3 期までと同様に工学における課題解決と価値創成に貢献するべく、HPC(High Performance Computing)環境を利用した先端シミュレーションソフトウェアの研究開発と社会実装のため基盤技術の研究開発を進めていく所存です。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 5 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

吉川 暢宏

革新的シミュレーション研究センター

令和4年度 活動報告

Vol. 15

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	
「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) 新聞・マスコミ報道	
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、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きました。令和 5 年 4 月に実施した三度目の改組にあたっては、工学における課題解決と価値創成に貢献するため、HPC (High Performance Computing) 環境を利用した先端シミュレーションソフトウェアの研究開発のため基盤技術の研究開発に係る検討を進めてきました。

これまで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、それらを展開して、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いました。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きました。

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、国のプロジェクトにおいて、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。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「『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)他を、代表機関として推進しました。また、首相のカーボンニュートラル宣言で一気に加速した水素社会構築事業の一翼を担う、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) のプロジェクトである「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)他を実施してきました。

CISS は以上のように、HPC 技術の果実を産業界に還元するために長期にわたり戦略的にシミュレーションソフトウェア開発を先導してきました。その成果は、我が国の産業競争力を向上させ、国際的リーダーシップを発揮することに大きく貢献しています。



研究開発分野

2. 構成メンバー



加藤 千幸 センター長・教授

Chisachi KATO, Center Director, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 熱流体システム制御工学

Fluid Flow and Thermal Energy Systems Control



吉川 暢宏 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

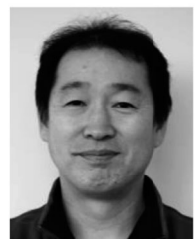
Ryoza OOKA, Professor

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4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ことを目的としている。

令和 4 年度は、数値シミュレーションが、曳航水槽試験を代替し得ることを実証するとともに、省エネデバイスの動作メカニズムの解明に貢献できることを検証した。具体的には、数値曳航水槽の実現のサブテーマに関しては、数値シミュレーションによる予測結果と国内複数社の曳航水槽試験結果との比較検証を行い、両者が良好に一致することを確認した。省エネデバイスによる推進効率の向上のサブテーマに関しては、舵フィンは単独で用いると、ハブ渦の負圧によって効果を発揮しないが、ハブ渦が大幅に拡散される舵バルブと一緒に用いると効果を発揮し、性能が良くなることがわかった。

（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 の実用化を図ることを目的としている。

令和 4 年度は、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できることを検証した。その結果、ポンプの主流部に加えて隙間幅 0.18 mm 程度の細隙部における縦渦も捉える LES 解析により、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込みを得た。また、ポンプの設計流量ならびに部分流量（20 %設計流量）において、壁面近傍の詳細な渦構造も含めて流れ場を明らかにした。部分流量ではポンプ主流と羽根車とケーシング間の間隙部の非定常な干渉による軸スラスト力の変動を捉えることができた。本研究対象である遠心ポンプはプラントなどで使用される実機ポンプ形状相当であり、本研究結果は直接産業界で参照され、ポンプの設計・開発に活用することが可能である。

（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ことを目的としている。

令和 4 年度は、圧縮機サージの初生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に利用可能であることを検証した。前年度のマイルドサージの計算に引き続き、逆流を伴うディープサージの計算を実施した。ディープサージの発生作動点やサージ発生時の周波数および圧力変動レベルは実験結果と良く一致し、世界で初めてディープサージのシミュレーションに成功した。これにより、本シミュレーション技術によってディープサージの発生を予測できることを実証した。さらに、計算結果からディープサージ発生時の、圧縮機内部の非定常流動現象を詳細に明ら

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ことを目的としている。

令和 4 年度は、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）をシミュレーションにより評価が可能であることを検証し、車体を固定した風洞実験条件に対して、接近流の変動や車体の揺動により空気抵抗が最大約 10 % 変化することを明らかにした。また、レーンチェンジ時のドライバー操舵を考慮したシミュレーションを実施し、特に接近流の変動が車体操安性に与える影響について検討を行った。これにより、実設計開発現場におけるリアルワールド評価の重要性を実証すると共に、その利用指針を得た。

（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ことを目的としている。

令和 4 年度は、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が可能であることを検証し、以下の知見を得た。狭帯域音の解析について、格子解像度を 1 mm 以下にすることによりグリルからの狭帯域音の予測が可能である見通しが得られ、狭帯域音の発生機構が明らかとなった。また、広帯域音の解析について、格子ボルツマン法 (LBM) を用いて車両周りの広帯域空力音を従来の分離解法と同程度の精度で予測できることを確認した。空力・構造振動・連成解析により車内騒音を定量的に評価し、流体加振、音響加振の寄与を明らかにした。

（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 4 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、技術基準案の整備を行った。

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。また研究成果を技術基準に反映させ広く社会に還元する。

[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4年度はプロジェクト最終年度であり、以下の研究開発課題に対して技術基準への反映を行い得る多大な成果が得られた。

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。また圧縮残留応力により変化する平均応力の影響を反映させた等価応力振幅の算出方法を確定した。

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、以下の試験を行った。

(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めて試験体を作製した。圧力サイクル試験を実施し、CFRP 軸荷重試験片を用いた疲労試験結果がフープ巻きされた圧力容器に関しても有効であることを示した。

(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。自緊処理により圧縮残留応力を発生させることで寿命が延長できることを示し、その効果の定量的測定が可能であることを示した。

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。自緊処理により発生する強度の圧縮残留応力が疲労寿命に与える影響を、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から考察し、等価応力振幅の算出方法としてまとめた。

(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。軸荷重試験片を用いて得られた最適疲労曲線に対して、試験結果のばらつきを考慮した安全裕度を適切に設定し、設計疲労曲線を求めて技術基準 KHKS 0225 の改定案に取り込んだ。技術基準改定案では解析による設計と安全性の評価が基軸となるが、自緊処理後の応力解析に対する信頼性を、き裂進展速度に関する解析と実測の照合により確保することとし、

その方法論の適用性を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から確認した。

(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。さらに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ー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, 部分充填圧力サイクルによる蓄圧器の寿命延長を正しく見積もるため, 実容器を用いた圧力サイクル試験に加えて 7.5 L 小型容器を用いた 100 万回レベルの圧力サイクル試験を実施し, 提案する累乗則による寿命延長が保守的であることを確認した。その結果を ISO TC197 WG15 で作成中の水素ステーション用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 複合圧力容器の応力解析に基づく寿命予測手法およびその検証方法を技術基準 KHKS0225 の改定案に取り入れた。

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「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)

実施機関: 株式会社 SUPWAT, 国立大学法人東京大学

[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、形状やワイ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ミライ用タイプ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。また軸対称有限要素モデル作成にあたり、ドーム部の製造誤差のモデルへの反映方法について検討した。

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)

破裂圧力の予測が可能な容器メゾスケールモデルを活用して繊維束と樹脂を区別して応力・ひずみ解析を行い、容器軸対象モデルに実用器実力値からメゾスケール構造の異なる部位ごとの強

度クライテリアを設定することで高速演算を実現しつつ、機械学習による複数の強度クライテリア(評価規準)を同時に満たす容器破裂圧力予測の高精度化が可能となった。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、機械学習に供する大量の学習データを蓄積した。

①ー3 機械学習モデルの構築(SUPWAT)

大量に蓄積したデータやメソ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ー1 設計最適化 AI の構築(東京大学, SUPWAT)

タイプ 4 高圧水素容器の破裂圧力 150 MPa を確保したうえで炭素繊維量を最小とする最適設計問題を解き、既存の容器に対して 30 %近い炭素繊維量の削減が可能であることを示した。

③ 「最適設計システムの実証実験」

③ー1 「設計最適化 AI」の有効性の検証(東京大学, SUPWAT)

大型車両や産業用車両への展開を想定し、容器寸法を拡大した設定で、開発した機械学習モデルおよび最適設計探索システムが有効に動作することを確認した。

③ー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試験体容器の設計を行った。

(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た。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、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 に関して得られた主要な成果を記す。

<FrontFlow/blue>

FrontFlow/blue(略称, FFB)は「実効メモリスループット」によってノード単体の実効性能が決まるアプリケーションであるが, 令和 2 年度の段階において「富岳」のメモリー性能を限界まで引き出すことに成功している. メモリスループットの限界を達成した場合, 通信性能がボトルネックとなる. 「富岳」における FFB の並列性能に関する詳細な調査を実施し, 特定のノードの通信リンクに通信負荷が集中することによって, 通信時間が増大していることがわかっている. そこで, 理化学研究所計算科学研究センター運用技術部門と連携して, 「富岳」の通信性能を向上させるための, 計算科学及び計算機科学の分野の振興および発展に関する覚書に基づいた基盤研究を実施している. 具体的には, 通信ネットワークの負荷をできるだけ平準化させるために, プロセス番号と当該プロセスが配置されるノード番号との関連付けをするランクマップの最適化に関する研究を実施している.

(3)教育活動

1) 大学院講義「実践的シミュレーションソフトウェア開発演習」

シミュレーションソフトウェアの利用者と開発者への系統的な教育は, 我が国が本分野を拡大・発展する人材を継続的に創出するための根幹である. 本センターでは, センターならではの特色をもった利用者・開発者教育を展開している. 本項では本学大学院における開発者教育の取り組みを報告する.

計算科学分野は科学技術や先端産業を牽引する基盤の一つである. 計算機システムの能力向上は日進月歩であるが, 計算科学ソフトウェア(本項ではシミュレーションソフトウェアと呼ぶ)の開発教育は極めて少ない. 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, 東京大学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 4 年度現在 14 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 150 名近い受講生を輩出した。

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元年度からリモートとなっていた講義を対面に戻した。リモート講義で培った技術なども適宜導入し、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”, 東京大学出版会, 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”, 東京大学出版会, 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 3 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，今年度で終了する本プロジェクトの最終成果を報告し，それを踏まえて，「富岳」の時代における HPC の利活用したものづくりシミュレーションについて議論し，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する。そして，「富岳」を始めた HPC を利用したシミュレーション技術の，今後のものづくりへの貢献について議論した。

開催日: 令和5年3月1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, および, オンライン(Webex Webinars)
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: 246名(オンサイト参加 24名)
資料作成: 予稿集 67頁

○プログラム

10:00-10:05 開会の挨拶
河原 卓 文部科学省研究振興局参事官(情報担当)付
計算科学技術推進室長

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
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
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建築・産業カンパニー
開発統括部 技術開発部 部長
(兼)技術・研究開発 知的財産統括部 技術・研究開発部
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

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
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
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
安藤 裕啓 スズキ株式会社四輪車両実験部 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と今後の展開」
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
- 西川 達雄 一般財団法人日本造船技術センター 課長
渡邊 啓悦 株式会社荏原製作所建築・産業カンパニー
開発統括部 技術開発部 部長
(兼)技術・研究開発 知的財産統括部 技術・研究開発部
- 古川 雅人 九州大学大学院工学研究院 教授
安藤 裕啓 スズキ株式会社四輪車両実験部 係長
- 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

シンポジウム: 力学の未来

流体力学や破壊力学, 量子力学など, 様々な“力学”に基づくシミュレーションは, 流体力学, 土木・建築工学, 材料強度, マテリアル開発など多岐にわたる分野で応用が進められ, 優れたソフトウェアの普及も相まって研究・開発に広く活用されるようになってきた. シミュレーション技術の高度化と分野の細分化に伴って, 複雑な現象を正確に予測することが求められている. その実現のためには力学モデルの高度化や力学問題の解法に関する方法論に関して新たな展開が必要である. それぞれの分野ごとに発展してきた力学モデルとシミュレーション手法について今一度見直し, 力学問題の本質に関わる課題に対する共通認識を深めたうえで, 基盤となる新たな方法論の策定に向けて, 分野を超えた議論が必要だと思われる.

そこで本シンポジウムでは, 各分野で取り組まれている力学問題のモデリングおよびシミュレーションを俯瞰し, これからの力学シミュレーションの在り方を議論する. 単なる研究成果の発表会ではなく,

むしろ各分野での根本的な問題点や未解決課題を共有し、分野横断的に将来への方針を議論する場とする。

開催日： 令和 5 年 3 月 30 日(木) 10:00-17:00

場 所： 東京大学生産技術研究所 大会議室 (An301・302), および, オンライン (Webex Webinars)

主 催： 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター

参加者数： 144 名 (オンサイト参加 29 名)

○プログラム

冒頭挨拶

吉川暢宏

10:00-11:15 流体分野「これからの流体シミュレーションに期待するもの」

犬伏正信(東京理科大学), 長谷川洋介(東京大学), (司会)加藤千幸

11:15-12:30 材料強度分野「破壊現象の予測における破壊力学の限界と可能性」

都留智仁(日本原子力研究開発機構), 梅野宜崇(東京大学), (司会)栃木栄太

12:30-13:30 休憩

13:30-14:45 建築・土木分野「建築・土木構造物のシミュレーションは正しく解かれているのか？」

飯塚悟(名古屋大学), 長井宏平(東京大学), (司会)吉川暢宏

14:45-16:00 マテリアル分野「原子・電子レベルシミュレーション, 計測, データ科学のその先に」

津田宏治(東京大学), 溝口照康(東京大学), (司会)梅野宜崇

16:00-17:00 総合討論

(司会)吉川暢宏

17:30-19:00 懇談会

第 38 回生研 TSFD シンポジウム

「乱流シミュレーション, データ科学による流れのモデリング, 予測, 制御」

乱流数値シミュレーション研究者の意見交換の場として, 様々な研究分野からご参加を得てきた「生研 TSFD (Turbulence Simulation and Flow Design) シンポジウム」(旧「生研 NST シンポジウム」)は本年度で 38 回目となり, 「乱流シミュレーション, データ科学による流れのモデリング, 予測, 制御」というテーマに関する 9 件の講演を行った。

開催日： 令和 5 年 3 月 9 日(木) 10:15-17:45

場 所： 生産技術研究所 S 棟 1F プレゼンテーションルーム, および, 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

10:15-10:20 開会のご挨拶(長谷川 洋介(東大生研))

【第1部】 司会:長谷川 洋介(東大生研)

10:20-11:00 「バンプを有するチャンネル乱流での吹出し・吸込みによる抵抗低減効果」

大河内 祐輔(慶大), 難波江 佑介(東理大), 深潟 康二(慶大)

11:00-11:40 「壁乱流制御のための最適制御入力の特性とその機械学習による抽出」

弓削田 悠介(東大), 長谷川 洋介(東大生研)

11:40-12:20 「二次元レゾルベント解析による渦放出抑制フィードバック制御則の提案」

佐藤 碧(慶大), 難波江 佑介(東理大), 深潟 康二(慶大)

【第2部】 司会:大岡 龍三(東大生研)

14:00-14:40 「進行波制御によって抵抗低減された乱流境界層流れの LDV 計測」

吉田 泰大(農工大), 光石 暁彦(大阪電通大), 岩本 薫(農工大), 村田 章(農工大)

14:40-15:20 「非一様流における移動センサを用いたスカラー源探査手法に関する研究」

大西 諒(東理大), 太田 佑(東理大), 塚原 隆裕(東理大), Dominik HENZEL(東大), Xu HAN(東大生研), 大澤 崇行(東大生研), 長谷川 洋介(東大生研)

15:20-16:00 「平面クエット流れにおける粘弾性に起因する渦変調と不安定性に関する研究」

仁村 友洋(東理大), 河田 卓也(慶大), 塚原 隆裕(東理大)

【第3部】 司会:半場 藤弘(東大生研)

16:20-17:00 「SGS 応力方程式型モデルによる平面乱流噴流の LES」

松山 新吾(JAXA)

17:00-17:40 「Logarithm conformation representation による圧縮性流体ソルバーの開発」

中澤 嵩(阪大)

17:40-17:45 閉会のご挨拶(加藤 千幸(東大生研))

b) ワークショップ

「富岳」成果報告創出加速プログラム 第6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6回は、各課題の最新状況を報告するとともに、「富岳」の時代における HPC の利活用に関して展望することを目的として開催した。

開催日: 令和4年9月27日(火) 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, および, オンライン(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： 150 名 (オンサイト参加者 24 名含む)

資料作成：「富岳」の時代の HPC の利用成果 112 頁，
「富岳」の時代の成果の実用化とポスト「富岳」の時代に向けて予稿集 17 頁

○プログラム

●「富岳」の時代の HPC の利用成果

(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)

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

10:05-10:30 フライトエンベロープ全域予測を目指した航空機全機高忠実 LES 解析

河合 宗司 東北大学大学院工学研究科 教授

10:30-10:55 富岳を用いた航空機解析の実例紹介と今後の展望

弓取 孝明 三菱重工業株式会社総合研究所 主任

10:55-11:20 意匠空間を考慮した AI 支援多目的最適化による自動車空力デザインの実現に向けて

中島 卓司 広島大学大学院先進理工系科学研究科 准教授

(司会 山田 和豊 岩手大学理工学部 准教授)

11:20-11:45 自動車広帯域空力音予測の取り組み

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

FFX を用いた自動車空力音解析

飯田 明由 豊橋技術科学大学大学院工学研究科 教授

11:45-12:10 「富岳」を利用した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

12:10-12:35 乱流の直接シミュレーションによる曳航水槽代替技術の実用化

美濃部 貴幸 一般財団法人日本造船技術センター 係長

(司会 津田 伸一 九州大学大学院工学研究院 准教授)

13:35-14:00 極端自然擾乱下の都市・建築における減災・快適性能の検証

田村 哲郎 東京工業大学環境・社会理工学院 名誉教授

- 14:00-14:25 日本の洋上ウィンドファームの開発・運用における HPC の役割
吉村 忍 東京大学大学院工学系研究科 教授
- 14:25-14:50 「富岳」活用によるカーボンニュートラル社会に向けた水素焚ガスタービンへの取組
柚木 啓太 三菱重工業株式会社総合研究所 主任
- 14:50-15:05 HPC のクラウド提供における取り組み
小澤 幹安 富士通株式会社 HPC Cloud 事業部

●「富岳」の時代の成果の実用化とポスト「富岳」の時代に向けて

(司会 飯田 明由 豊橋技術科学大学大学院工学研究科 教授)

- 15:20-15:35 「富岳」の時代の成果の実用化とポスト「富岳」の時代の展望
加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 センター長・教授
- 15:35-16:55 パネルディスカッション
- パネリスト 近藤 正章 国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究センター
チームリーダー
- 今村 博 株式会社ウインドエナジーコンサルティング 代表取締役
- 畑中 圭太 三菱重工業株式会社総合研究所 主席チーム統括
- 中島 卓司 広島大学大学院先進理工系科学研究科 准教授
- 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
- 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
- 吉村 忍 東京大学大学院工学系研究科 教授
- 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
- 河合 宗司 東北大学大学院工学研究科 教授
- 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
- 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 69 回 LES 研究会

開催日: 令和 4 年 5 月 10 日 (火) 14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「陰的 LES と DNS の比較を通した LES に関する一考察」

松山 新吾 宇宙航空研究開発機構

第 70 回 LES 研究会

開催日: 令和 4 年 7 月 8 日 (金) 14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「実市街地における乱流場と放射場の連成解析に関する検討」

新井 舞子 大成建設株式会社

第 71 回 LES 研究会

開催日: 令和 4 年 9 月 20 日 (火) 14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「乱流衝突噴流熱伝達現象の DNS 解析と予測について」

服部 博文 名古屋工業大学

第 72 回 LES 研究会

開催日: 令和 4 年 11 月 11 日 (金) 14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「気象モデルの高解像度化による「グレーゾーン」問題」

伊藤 純至 東北大学

第 73 回 LES 研究会

開催日: 令和 5 年 1 月 10 日 (火) 14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「低圧旋回渦同定手法を用いた横風時の自動車の空気抵抗増大に寄与する渦の同定」

中村 優佑 マツダ株式会社

d) セミナー・講習会

第 14 回 PHASE/0 利用講習会: 基礎編

電子状態計算(バンド計算)に初めて取り組む方を対象に、講義と実習を組み合わせ、理解しやすいように工夫したプログラムを用意した、通算 10 回目の基礎編の利用講習会を開催した。

開催日: 令和 4 年 9 月 8 日 (木) 10:00-17:00

場 所: 東京大学生産技術研究所 As 棟中セミナー室 4

主 催: 東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター

参加者数: 2 名

e) 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 3 回シンポジウム

開催日: 令和 5 年 1 月 27 日(金)

場 所: 東京大学山上会館 本館 大会議室, 他オンライン開催

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 6 回 CAE ワークショップ

開催日: 令和 5 年 3 月 10 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 15 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 4 年 12 月 9 日(金) 13:00~16:50

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 2022

開催日: 令和 4 年 12 月 15 日(木)

場 所: 学術総合センター(竹橋)2F 一橋大学 一橋講堂 中会議場, 他オンライン

主 催: 国立研究開発法人物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクニクス研究拠点
PHASE システム研究会, 特定非営利活動法人 物質材料科学ソフトウェア研究会
株式会社アスミス

ABINIT-MP 講習会

開催日: 令和 5 年 2 月 20 日(月)

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, 名古屋大学情報基盤センター

スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー2022 秋

開催日: 令和 4 年 9 月 28 日(水)

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 2022

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および成果等の展示紹介を行う

た.

開催日: 令和4年9月1日(木)～2日(金)

場 所: 神戸国際展示場1号館

第9回「富岳」を中核とする 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4年10月27日(木)・28日(金)

場 所: オンライン開催

SC22

研究開発したソフトウェアの紹介を行うため, ブースの展示を行い, ポスターや動画放映で研究成果の展示を行った.

開催日: 令和4年11月13日(日)～18日(金)

場 所: 米国テキサス州ダラス

3) ニュースレターの発行

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

令和4年度は Vol. 35, Vol. 36 を発行した.

(1) Vol. 35

発 行 日: 令和4年6月

発行部数: 600部

内容: 1面 巻頭言『「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も残すところ1年 プロジェクト完遂に向けて, 実証計算を加速』
2-3面 第2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 LES 解析ソルバーFrontFlow/blue (FFB) と FrontFlow/x (FFX)」

(2) Vol. 36

発 行 日: 令和5年1月

発行部数: 600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5年目を終えるにあたって」
2面 「富岳」成果創出加速プログラム 第6回 HPC ものづくり統合ワークショップ
3面 国際フロンティア産業メッセ2022 および, 国際会議 SC22 出展報告
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「FrontCOMP シリーズをプラットフォーム上で展開」

4) 新聞・マスコミ報道

新聞・WEB 新聞

(1) 「国交省 設備設計 AI で支援 23 年度以降 直轄営繕に導入」・2022.5.19・日刊建設工業新

聞

- (2) 「設備設計支援 AI 実現可能性を検証 将来的な導入へ詳細検討 国交省」・2022.5.24・建設通信新聞
- (3) 「CN の課題再整理 設計, 施工部門など報告 建築学会大会・総合研究協議会」・2022.9.7・建設通信
- (4) 「CN にデータ, AI の活用を」・2022.9.7・建設通信

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や開発したプログラムや風洞実験を利用した、自動車、船舶、ターボ機械等の流れや音の予測と音源の解明などを目指して、以下に示す研究を行っている。以下に記載した研究内容の一部は、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) 解析ソルバを開発した。

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し、通信時間が短縮されることを確認した。現在、通信時間をさらに短縮することを目的として、理化学研究所計算科学研究センターと共同研究を実施している。

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。令和 4 年度は粒子モデルおよび衝突モデルの拡張、LES 計算用の SGS モデルの実装方法の改良、キューブ境界処理の改良、減衰機能 (ダンピング機能) の実装、およびファイル出力機能の実装を行い、アプリケーションの利便性を高めるとともに、以下に示すような基礎検証および実証計算を実施した。

(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開始した。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った。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た。令和 4 年度は上記の数値シミュレーションの精度を検証し、十分な予測精度が得られることを確認するとともに、省エネデバイスのメカニズムを明らかにした。

【自動車】

令和 3 年度には 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。令和 4 年度はこれらの課題を解決するために、上記(1)に示したようなアプリケーションの改良を行い、空力音の予測結果が風洞試験結果と良好に一致することを確認した。また、データ出力機能を応用して、計算結果の波数・周波数分析を行い、ドアミラーや A ピラーまわりの音源の特徴を明らかにした。

【ターボ機械】

令和 3 年度には FFB を利用して 200□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、音響解析ソルバー(FFB-A)と組み合わせることによって、音源強度が比較的強い場合は音圧レベルを定量的に予測できることを確認した。令和 4 年度は多翼遠心ファンの性能と音の予測に取り組んだ。その結果、性能は定量的に予測できるが、音の予測には課題が残る、予測方法を改良する必要があることが明らかとなった。

令和 3 年度には 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。また、実機のプロアモデルの計算を実施し、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た。令和 4 年度は FFB の圧縮性流れ解析ソルバを利用した計算をさらに進め、2 次元翼まわりの流れ(空力特性)や発生する音が十分な精度で予測できることを確認した。また、実機プロアの計算も進め、プロアの性能がほぼ定量的に予測できることを確認した。

(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

これまで、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きた。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た。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。令和 4 年度はステップまわりの流れから発生する音の予測結果を風洞実験結果と比較し、定量的な予測が可能であることを示すとともに、主要な音源を明らかにした。さらに、ステップによる音の散乱効果と音圧スペクトルとの関係も明らかにした。また、Lattice Boltzmann 法 (LBM) に基づく LES 解析ソルバ FFX の精度検証を進め、円柱まわりの流れや角柱まわりの流れから発生する音の予測結果を直接計算結果 (Direct Numerical Computation, DNS) や風洞実験結果と比較し、音圧レベルが定量的に予測できることを確認した。さらに、平板乱流境界層の計算を行い、平均速度分布、変動速度分布や乱流エネルギーの収支 (バジェット) が定量的に予測できることを明らかにした。ただし、SGS モデルやキューブ境界の扱いを改良する必要があることが明らかとなった。

(1) 研究成果一覧

国際会議予稿集

- 1) Yoshihiro Shirasu, Yasumasa Suzuki, Chisachi Kato: Experimental study on aerodynamic sound generated from flow around a forward facing step, February, 2023, Journal of Fluid Science and Technology, Vol.18, No.1, 2023, DOI: 10.1299/jfst.2023jfst0020.

国際会議アブストラクト

- 2) Chisachi Kato: Engineering Applications of Large-scale Fluid-flow Computations, 2022.10.25, 34th Workbench on Sustained Simulation Performance, 東北大学.

学会講演論文

- 1) 加藤千幸:「富岳」の時代の大規模流体解析の現状と将来展望, 2022.9.12, 第 19 回海洋エネルギーシンポジウム 2022 (OES2022), 佐賀大学.
- 2) 加藤千幸:「富岳」の時代のシミュレーションとものづくり, 2022.11.11, 第 31 回日本国際工作機械見本市, 東京ビッグサイト.
- 3) 加藤千幸:「富岳」の時代の HPC の産業応用と今後の展開, 2023.1.24, 「富岳」EXPANDS〜可能性を拡張する〜, TKP 東京駅大手町カンファレンスセンター.

(2) 研究プロジェクト

民間等との共同研究等

- 1) 実環境風下における空気力発生メカニズムの解明

- 2) 「CFD による船舶性能推定精度向上に関する研究」
- 3) 「『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」
- 4) ポスト京に向けた高速 LBM コードの検証

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・構造体の代表的シミュレーション手法である有限要素法は、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発展の相関が高く、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であるため、機器設計の有力なツールとしての地位を確立してきた。しかしながら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に対しては、非均質性による応力場の局所的不連続性により解析の信頼性を確保できるまでには至っていない。「富岳」に代表される大規模並列計算機を活用することで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) CFRP 材料の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。また熱衝撃により発生する樹脂マイクロクラックの評価にも同様の方法論が有効である。

(2) CFRP 製燃料容器の開発

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。また宇宙輸送機用の液化燃料タンクの開発において重要な評価項目である、極低温下での CFRP 材料の強度信頼性手法を、製造プロセスとも関連させて検討している。

(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ている。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Shinichiro Takemoto and Nobuhiro Yoshikawa: Strength evaluation of CFRP structure of high pressure hydrogen tank based on mesoscale analysis, August 2022, Materials Today Communications, Vol. 32, 103966. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.103966>

和文論文

- 1) 阿部雅史, 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 CFRP 積層板の疲労寿命予測, 2022年9月, 日本複合材料学会誌, No. 48, Vol. 5, pp.183-190.

国際会議予稿集

- 1) Naoki Morita, Masashi Abe, Yuka Sahara, Masahiro Hojo and Nobuhiro Yoshikawa: Versatile fatigue life evaluation of CFRP laminates based on interfacial normal stress, August 2022, 15th World Congress on Computational Mechanics and 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM-APCOM 2022), MS0112-2275.

学会講演論文

- 1) 秋田幸仁, 吉川暢宏: ミクロスケール解析に基づく熱可塑性CFRPの疲労寿命予測, 2022年9月, 第47回複合材料シンポジウム, 論文No. B207.
- 2) 秋田幸仁, 吉川暢宏: 熱可塑性CFRP材料の疲労破壊メカニズム, 2022年9月, [No.22-49] 日本機械学会M&M2022 材料力学カンファレンス, 論文No. OS1627.
- 3) 赤座昌佳, 松田哲也, 久保凱, 北條正弘, 森田直樹, 吉川暢宏: 非弾性ツースケール解析に基づくCFRPの層間疲労寿命評価手法の提案, 2022年9月, [No.22-49] 日本機械学会M&M2022 材料力学カンファレンス, 論文No. OS1628.

(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 5)
- 2) 炭素繊維強化熱可塑プラスチック製 LNG 配管端部の最適設計法に関する研究
- 3) ミクロ応力解析に基づくブリーチング解析を用いた極低温推進薬タンク用 CFRP 材のマイクロクラック発生メカニズムの検討
- 4) 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

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(NEDO)「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(NEDO)「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」
- 3) (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」
- 4) (国研)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・シミュレーション (LES) モデル、レイノルズ平均 (RANS) モデルに関する基礎研究と、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の研究を行っている。

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。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。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だ。さらに乱流の非局所性に着目し、乱流スカラーフラックスの非局所渦拡散率のモデリングを試みた。

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) N. Yokoi, Y. Masada, T. Takiwaki: Modelling stellar convective transport with plumes: I. Non-equilibrium turbulence effect in double-averaging formulation, October 2022, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Vol. 516, pp. 2718-2735.
- 2) F. Hamba: Analysis and modelling of non-local eddy diffusivity for turbulent scalar flux, November 2022, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 950, A38 1-22.

国際会議予稿集

- 1) F. Hamba: Scale-space energy density and inhomogeneous effect in turbulent channel flow, July 2022, Proceedings of 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, 49.
- 2) M. Horie, F. Hamba: Production and transport of turbulent helicity in wall-normal rotating channel flow, July 2022, Proceedings of 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, 379.
- 3) N. Yokoi, Y. Masada, T. Takiwaki: Modeling turbulent transport associated with plumes in stellar convection, July 2022, Proceedings of 44th COSPAR Scientific Assembly, E2.4_48.
- 4) N. Yokoi: Effects of pseudo-scalar invariants in turbulent momentum transport, November 2022, Proceedings of International Congress on Plasma Physics 2022, Tu2C-2.

学会講演論文

- 1) 半場藤弘: 乱流の非局所渦拡散率の解析とモデリング, 2022 年 12 月, 第 36 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, A05-1.
- 2) 半場藤弘: 応答関数を用いた乱流の非局所渦拡散率の解析, 2023 年 3 月, 日本物理学会 2023 年春季大会概要集, 23aL2-8.

(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。引張変形を受けるポリカーボネートの応力-ひずみ特性に及ぼす分子構造の影響を定量的に示し定式化することを目的とし、広範な分子構造のバリエーションに対し変形解析を実施した。これまで最大引張り応力($\sigma_{\max}$)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ていたが、本年度は最大応力を与える臨界ひずみ(ε_c)に関して検討を拡張した。 ε_c についても N_e と R_g の2変数関数で表記することができたが、その関数形は $\sigma_{\max}$ のそれとは異なり、 R_g に関する高次項が必要であることが示された。

(2) ナノ構造体座屈挙動のマルチフィジックス解析

ナノチューブの座屈変形を利用することにより、小さいひずみ幅で急激な物性変化を起こす新しいナノデバイスや、広いひずみ範囲を許容するしなやかなナノ構造体などの創製が期待できる。我々は原子シミュレーション並びに非経験的および半経験的量子力学計算(バンド計算)を用いて、ナノ構造体の変形挙動とそれに伴う物性変化に関する検討を行っている。分子動力学法による単層カーボンナノチューブの軸方向圧縮解析を、広範な径サイズのモデルに対して網羅的に行うことにより、その座屈挙動について調べた。サイズの変化に伴い座屈モードがオイラー型・キンク型・フィン型と遷移することを示した。また、座屈時の圧縮荷重およびひずみの大きさは、無欠陥ナノチューブでは座屈モード境界でピークを示すのに対し、欠陥を有する場合にはなだらかな変化を示すことが明らかとなり、欠陥導入による座屈挙動制御の可能性を提示した。また、以前より提唱している人工ニューラルネットワーク(ANN)モデルを用いた電子状態予測手法についても改良を続けており、第一原理計算に代えて半経験的バンド計算を採用することで教師データを大幅に増加し、ナノ構造体座屈に伴うバンドギャップ変化の予測について一定の精度向上を見ることができた。

(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, 階層的マルチスケールモデルについて, 機械学習を用いた階層間接続スキームの開発を行っている。昨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が, 本年度はその精度検証と向上に取組み, 適切なパラメータ範囲を設定することで優良な予測精度が得られること, 教師データの外挿となる範囲においては予測精度が明確に低下することを示した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) H. Shima, Y. Umeno and T. Sumigawa: Analytic formulation of elastic field around edge dislocation adjacent to slanted free surface, 2022, Royal Society Open Science, Vol. 9, 220151.
- 2) H. Shima, T. Sumigawa and Y. Umeno: Nonsingular stress distribution of edge dislocations near zero-traction boundary, 2022, Materials, Vol. 15, 4929.
- 3) Y. Umeno, A. Kubo, C. Wang and H. Shima: Diameter-change-induced transition in buckling modes of defective zigzag carbon nanotubes, 2022, Nanomaterials, Vol. 12, 2617.
- 4) T. Leelaprachakul, A. Kubo and Y. Umeno: Coarse-grained molecular dynamics simulation of polycarbonate deformation: Dependence of mechanical performance by the effect of spatial distribution and topological constraints, 2023, Polymers, Vol. 15, 43.
- 5) Y. Umeno, E. Kawai, A. Kubo, H. Shima and T. Sumigawa: Inductive Determination of Rate-Reaction Equation Parameters for Dislocation Structure Formation Using Artificial Neural Network, 2023, Materials, Vol. 16, 2108.

国際会議アブストラクト

- 1) Y. Umeno, A. Kubo and E. Kawai: Multiscale modeling simulation of nano-micro metal fatigue, WCCM-APCOM2022, 2022.7.31-8.5, Yokohama, Japan.
- 2) T. Leelaprachakul, A. Kubo and Y. Umeno: Effect of molecular structure on mechanical properties of polycarbonate: A coarse-grained molecular dynamics study, WCCM-APCOM2022, 2022.7.31-8.5, Yokohama, Japan.
- 3) E. Kawai, A. Kubo and Y. Umeno: Effect of cross-section shape on critical resolved shear stress of crystal slip in nanorods: A molecular dynamics study, WCCM-APCOM2022, 2022.7.31-8.5, Yokohama, Japan.
- 4) E. Kawai, A. Kubo and Y. Umeno: Molecular dynamics simulation of slip behavior of Cu single crystal nanorods under uniaxial tension and compression loading, ICMR2022 6th International Conference on Materials and Reliability, 2022.12.7-9, Yamaguchi, Japan.
- 5) A. Kubo, E. Kawai and Y. Umeno: Molecular dynamics simulation of fatigue of single-crystal metal nanorods, ICMR2022 6th International Conference on Materials and Reliability, 2022.12.7-9,

Yamaguchi, Japan.

- 6) T. Leelaprachakul, A. Kubo and Y. Umeno: Fracture behavior of polycarbonate at a molecular level: effect of spatial distribution, entanglement, and molecular weight, ICMR2022 6th International Conference on Materials and Reliability, 2022.12.7-9, Yamaguchi, Japan.

学会講演論文

- 1) 久保淳, 河合江美, 梅野宜崇: Cu単結晶ナノロッドの疲労変形に関する分子動力学解析, 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム, 2022年5月29-31日, 大阪科学技術センター, 講演論文集USB.
- 2) 河合江美, 久保淳, 梅野宜崇: 分子動力学法による金属ナノロッドでの臨界分解せん断応力に及ぼす断面形状の影響の解明, 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム, 2022年5月29日～31日, 大阪科学技術センター, 講演論文集USB.
- 3) 河合江美, 久保淳, 梅野宜崇: 単軸負荷を受けるCu単結晶ナノロッドでのすべり挙動に関する分子動力学シミュレーション, 日本機械学会2022年度年次大会, 2022年9月11日～14日, 富山大学, 講演論文集USB.
- 4) 久保淳, 河合江美, 梅野宜崇: Cuナノロッドの疲労挙動の結晶方位依存性に関する分子動力学解析, 日本機械学会2022年度年次大会, 2022年9月11日～14日, 富山大学, 講演論文集USB.
- 5) 河合江美, 久保淳, 梅野宜崇: 分子動力学法による単軸荷重下での単結晶金属ナノロッドのすべり挙動解析, 日本機械学会M&M2022材料力学カンファレンス, 2022年9月26日～28日, 弘前大学, 講演論文集USB.
- 6) 久保淳, 河合江美, 梅野宜崇: 分子動力学法による単結晶金属ナノロッドの疲労変形解析: 結晶方位の影響, 日本機械学会M&M2022材料力学カンファレンス, 2022年9月26日～28日, 弘前大学, 講演論文集USB.
- 7) 河合江美, 久保淳, 梅野宜崇: 単結晶金属ナノロッドのすべり挙動に関する分子動力学解析: 断面形状の影響, 日本機械学会第34回計算力学講演会, 2022年11月16日～18日, オンライン, 講演論文集USB.
- 8) 久保淳, 河合江美, 梅野宜崇: 分子動力学法によるFCC金属中の転位近傍の応力場解析, 日本機械学会第34回計算力学講演会, 2022年11月16日～18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) (代表)「座屈が誘起するナノ構造体の巨大物性応答の解明と新奇デバイスの力学設計」
- 2) 基盤研究(S) (分担)「ナノダイナミクス観察に基づいた材料強度発現メカニズムの基盤的学理開拓」
- 3) 基盤研究(A) (分担)「ナノ flexoelectricity の解明と buckling メモリ素子の創製」
- 4) 基盤研究(A) (分担)「空間周期性の構造安定論的解釈と合理化社会・構造システム設計思想

のパラダイムシフト」

民間等との共同研究

- 1) 「複合材料の付着特性シミュレーション」
- 2) 「研磨シミュレーション技術の構築」

受託研究

①公的資金

- 1) (国研)科学技術振興機構(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) 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) Yuhn, C., Oshima, M., Chen, Y., Hayakawa, M., Yamada, S., “Uncertainty quantification in cerebral circulation simulations focusing on the collateral flow: Surrogate model approach with machine learning”, PLOS Computational Biology, Vol.18(7), pp. e1009996, doi: 10.1371/journal.pcbi.1009996 (2022).
- 2) Aoyagi, M., Oshima, M., Oishi, M., Kita, S., Fujita, K., Imai, H., Oishi, S., Ohmori, H., Ono, T., “Computational fluid dynamic analysis of the nasal respiratory function before and after postero-superior repositioning of the maxilla”, PLOS ONE, Vol.17(4), pp. e0267677, doi: 10.1371/journal.pone.0267677 (2022).

国際会議予稿集

- 1) Kobayashi, M., Chen, Y., Oshima, M., “Development of a penalized spline fitting method for parameterization of vascular geometry extracted from medical image”, 7th International Conference on Computational and Mathematical Biomedical Engineering (CMBE22), (2022).
- 2) Mukai, N., Natsume, T., Oishi, M., Oshima, M., "Liquid Injection Simulation with Wettability Representation Method Considering Adhesion and Spreading Works", 7th International Conference on Computational and Mathematical Biomedical Engineering (CMBE22), (2022).

学会講演論文

- 1) 大島まり:「医用画像×血流シミュレーション×機械学習の新しい展開:脳内循環に対する予測医療」, 第30回豊田理研懇話会(2023).
- 2) 馮建晴, 大島まり, 小林匡治:「血流解析における表面平滑手法の血行力学因子に与える影響の検証」, 第33回バイオフィロンティア講演会(2022).
- 3) 三好紘太郎, 保科克之, 三浦裕, 向井信彦, 大島まり:「腹部大動脈瘤における薬剤内包ミセルの流体一粒子連成解析」, 第33回バイオフィロンティア講演会(2022).
- 4) 慶田真弘, 山本創太, 大石正道, 大島まり:「血管内皮細胞骨格の骨格配向の定量評価」, LIFE2022(2022).

総説・解説

- 1) 酒井幹夫, 伊井仁志, 大島まり:「WCCM-APCOM 2022 特集(Track-4 Computational Multiphysics)」, 計算工学, 27巻, 4号, pp.8-9(2022).

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(A) 脳卒中リスク予測のための全身一脳循環代謝の解析システムの構築

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」という方針で開発したシミュレーション・システム ProteinDF/QCLObot 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/QCLObot 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いる。来年度も引き続き実施する。

(2) QCLObot 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 法の新コードを引き続き整備した。今年度は重なりによる分子軌道の解析法を開発した。来年度も引き続き実施する。

(3) ProteinDF/QCLObot のオープンソース化

(1), (2)の性能改善・機能追加を中心に、ProteinDF/QCLObot 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) ACE2 におけるスパイクタンパク質結合部位の電子状態解析

SARS-CoV-2 ウイルスの感染は、ACE2 にスパイクタンパク質が結合することで始まる。そのため、スパイクタンパク質の阻害剤は COVID-19 の治療薬やウイルス検出剤の候補となりうる。本研究では、ACE2 タンパク質のスパイクタンパク質に隣接する領域において正準分子軌道(CMO)計算を行った。60 個のアミノ酸残基からなる ACE2 の計算モデルで CMO 計算に基づき、正確な静電ポテンシャルを得ることができた。

(5) 正準分子軌道法による PETase の活性部位の触媒反応発生における役割に関する研究

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。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 の電子構造計算を試みた。その結果、PETase の触媒三残基が形成する電子構造を維持し、Serine のヒドロキシル酸素はその求核性を示した。周辺アミノ酸残基は触媒三残基の特徴的な立体構造と電子構造を保護している可能性が示唆された。

(6) インターフェロン $\alpha 2$ の電子状態に基づく作用機序の研究

インターフェロン(IFN) $\alpha 2$ は 165 残基からなるタンパク質で、アミノ酸配列の 23 番目のみが野生株(IFN $\alpha 2a$)と異なる(Lys23Arg)遺伝子組み換えの IFN $\alpha 2b$ が存在する。また、IFN $\alpha 2a$ はインターフェロン受容体(IFNAR2)に結合する。23 番目のアミノ酸は IFNAR2 と直に接しないが、IFN $\alpha 2b$ の方がより活性が高いことが知られている。本研究ではこの原因を探るために正準分子軌道計算を行い、変異に伴う電子状態の差異を調べた。静電ポテンシャルや Mulliken 電荷の結果から、Lys23Arg の差異によってクーロン力に利得が生まれる可能性が示唆された。

(7) アミロイド線維状と細胞固有プリオンとの電子構造研究

正準分子軌道計算により正常 PrP^C とアミロイドフィブリルの前半部の電子構造を求めた。Lys111 と Asp144 付近の原子電荷が重要な変化を示していた。ESP を比較したところ、124-130 残基がフィブリルの構造維持に重要な役割を果たしている可能性があることが示唆された。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) 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 2611, 020005 (2022); <https://doi.org/10.1063/5.0119366>.

国際会議アブストラクト

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: “Study on Analysis Approach of Canonical Kohn-Sham Molecular Orbital Calculation in Large-scale Molecular System”, 17th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE2022), Crete, Greece, Oct. 26-29, 2022.

学会講演論文

- 1) 平野敏行, 佐藤文俊: “大規模正準分子軌道計算の実情と今後”, 令和 4 年電気学会基礎・材料・共通部門大会, 鹿児島県(西之表市), 9 月 14 日, 2022.
- 2) 平野敏行, 佐藤文俊: “ACE2 におけるスパイクタンパク質結合部位の電子状態”, 第 16 回分子科学討論会, 神奈川県(横浜), 9 月 19 日, 2022.

総説・解説・紀要

- 1) 王天宇, 平野敏行, 佐藤文俊: “Study on the Role in the Catalytic Reaction Occurrence of the Active Site in PETase by Canonical Molecular Orbital Method”, 生産研究, 74, 161, 2022.
- 2) 中岡亮太, 平野敏行, 佐藤文俊: “インターフェロン $\alpha 2$ の電子状態に基づく作用機序の研究”, 生産研究, 74, 153, 2022.
- 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, 74, 247-251, 2022.

(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」

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。これまでに半導体材料、ガラス材料、有機分子材料、電池材料などの先進材料を研究対象としてきた。令和4年度においては以下の研究を行ってきた。

(1) 半導体界面における新たな準安定構造形成メカニズムの解明

物質の界面は、半導体や電池など様々な機能と密接に関係している。一方で、界面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る。そのため、界面における最安定構造を決定する取り組みが精力的に行われる一方で、界面に現れる準安定構造の解析は進められていない。一方で、近年では機械学習ポテンシャルのように、DFTと同等程度の精度を持ちつつ、高速に計算することが可能な手法が提案されている。本研究では、高精度なポテンシャルを活用し、電子デバイスに不可欠なシリコンに関して、これまで最安定構造が知られている $\Sigma 9$ 粒界に関する準安定構造の探索とその電子構造を調べた。

その結果、高温下において存在可能な準安定構造が存在することを明らかにした。さらに、同準安定構造の電子構造を調べた結果、バンドギャップが大幅に小さくなる可能性が示された。同様な解析を様々な界面に関して行った結果、比較的低温でも準安定構造があらわれる界面が存在することも明らかとなった。

(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。一方で、そのようなスペクトルは実験で取得されるものが多く、データ数が限られている。高精度なスペクトルシミュレーションにより、多くの物質のスペクトル形状を知ることが出来れば、物質解析が加速できると期待される。

本研究グループは、このようなスペクトルの現状を打破すべく、内殻電子励起スペクトルのシミュレーションを網羅的にを行い、スペクトルデータベースの作成を行った。昨今の複合材料や接着材料の広い利用を鑑み、特に炭素のK端に注目した。すでに報告されている有機分子のデータベースを活用し、約11万本のC-K端スペクトルを計算した。網羅的なスペクトル計算から、実験と計算の差を埋めることのできる回帰式を提案することが出来た。同スペクトルデータベースを用いた新たな構造解析法の開発に現在取り組んでいる。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) K. Nakazawa, Y. Tsukada, S. Amma, K. Mitsuishi, K. Shibata, and T. Mizoguchi, "Multimetastability effect on the intermediate stage of phase separation in BaO-SiO₂ glass", Phys. Rev. Res., 4 (2022) 033052-1-8. doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.033052 [Open Access].
- 2) K. Matsunaga, M. Yoshiya, N. Shibata, H. Ohta, and T. Mizoguchi, "Ceramic science of crystal defect cores", J. Ceram. Soc. Jpn, (2022). doi.org/10.2109/jcersj2.22080. [Open Access].
- 3) YS. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi, "interface_master: Python package building CSL and approximate CSL interfaces of any two lattices -- an effective tool for interface engineers", arxiv, (2022). https://arxiv.org/abs/2211.15173.
- 4) YS. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi, "A defect formation mechanism induced by structural reconstruction of a well-known silicon grain boundary", Acta Mater., 250, 118827-1-11. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.118827.

和文論文

- 1) 溝口照康, 梅野宜崇, "深層学習モデリング活用によるナノ材料シミュレーション", 機械の研究, Vol. 74, No. 5, P 329-336.
- 2) 溝口照康, 柴田基洋, "STEM-EELS を用いた局所原子配位環境と熱膨張の計測", ファインセラミックスレポート, Vol. 40, No. 4, , P 146-153.
- 3) 世古敦人, 豊浦和明, 柴田基洋, 溝口照康, "機能コア解析のためのソフトウェア開発と応用", まてりあ, Vol. 61, No. 10, P 634-639.

国際会議アブストラクト

- 1) Teruyasu Mizoguchi, "Data-driven approaches for EELS", 日本顕微鏡学会学術講演会・Thailand-Japan international sympo, 2022, 5/13, 郡山市, 福島県.
- 2) Kiyoo Shibata, "In Situ TEM Measurement of Magnetic and Thermal Dynamic Process of Nano-Scale Structures", 2022 MRS Spring Meeting & Exhibit, Online, May 25, 2022.
- 3) Teruyasu Mizoguchi, "Data-driven spectral analysis for materials characterization", CIMTEC 2022, Perugia, Italy, 6/23, 2022.
- 4) Teruyasu Mizoguchi, "Machine learning approach for interface and surface", International Symposium on Noble and Nano Materials (ISNNM2022), Jeju, Korea, 11/14, 2022.
- 5) Teruyasu Mizoguchi, "Application of AI for EELS", Kamakura 2022, Kamakura, Kanagawa, 11/21, 2022.
- 6) K. Shibata, and T. Mizoguchi, "Prediction of Carbon K Edge Spectra of Organic Molecules Using a Graph Neural Network", 2022 MRS Fall Meeting & Exhibit, Boston, MA, USA, 2022/12/1.
- 7) Izumi Takahara, Poyen Chen, Kiyoo Shibata, Teruyasu Mizoguchi, "Prediction of Electronic Density of States at Ground State from ELNES/XANES", 2022 MRS Fall Meeting & Exhibit, Boston, MA, USA, 2022/12/1.
- 8) Poyen Chen, Kiyoo Shibata, Teruyasu Mizoguchi, "Ground state electronic structure prediction from ELNES/XANES by machine learning", The 4th East-Asia Microscopy Conference (EAMC4), Online, 2022/12/4.

- 9) Y. Hata, Y. S. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi, "Development of a systematic and efficient method for searching for the most stable grain boundary structures: A method based on non-identical termination combination", 2022 MRS Fall Meeting & Exhibit, Online, 2022/12/7.

学会講演論文

- 1) 溝口照康, "一次元記述子を用いた表面・分子物性の予測", 表面真空学会・関東支部会講演会, オンライン, 4/15, 2022.
- 2) 溝口照康, "機械学習を活用した格子欠陥における構造機能相関の理解", 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム, 2022, 5/29, オンライン.
- 3) 溝口照康, "原子と電子で生産技術, 最近インフォマティクス", 駒場リサーチキャンパス公開講演会, 駒場リサーチキャンパス, 6/11, 2022.
- 4) 溝口照康, "データ駆動型 XAFS 解析と機械学習を活用した XANES 計算の高速化", 第11回SPRING-8 データ科学研究会, ニチイ学館, 神戸市, 8/30, 2022.
- 5) 畑勇気, Xie Yaoshu, 柴田基洋, "非等価な端面組合せに基づく体系的かつ効率的な粒界構造探索", 日本金属学会秋季シンポジウム, 福岡工業大学, 福岡 2022/9/8.
- 6) Xie Yaoshu, 柴田基洋, 溝口照康, "Development and application of software for effective crystal interface modeling", 日本金属学会秋季シンポジウム, 福岡工業大学, 福岡 2022/9/8.
- 7) 川口直登, 柴田基洋, 溝口照康, "第一原理計算を用いた層間化合物の安定性に関する理解", 日本セラミックス協会第35回秋季シンポジウム, 徳島大学, 徳島, 2022/9/15.
- 8) 溝口照康, 畑勇気, Xie Yaoshu, 柴田基洋, "組み合わせ最適化による界面構造の決定", 日本セラミックス協会第35回秋季シンポジウム, 徳島大学, 徳島, 2022/9/15.
- 9) 溝口照康, "MI を活用した界面・表面の構造決定と物性の予測", 化学フェスタ 2022, 船堀, 東京, 10/19, 2022.
- 10) 溝口照康, "第一部:機械学習と第一原理計算を活用した界面・表面の構造解析と物性予測", JFCC 材料計算セミナー, JFCC, 名古屋, 10/26, 2022.
- 11) 溝口照康, "第二部:機械学習と第一原理計算による EELS/XAFS スペクトル解析", JFCC 材料計算セミナー, JFCC, 名古屋, 10/26, 2022.
- 12) 川口直登, 柴田基洋, 溝口照康, "層間化合物のデータベース構築と安定性に関する理解", 第16回 物性科学領域横断研究会, online, 2022/11/25.
- 13) 溝口照康, "機械学習を活用した EELS 解析の高度化", 分析電子顕微鏡討論会, オンライン, Dec. 9, 2022
- 14) 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, 金町, 東京, Dec. 13, 2022.
- 15) 溝口照康, "STEM-EELS や XAFS を用いたガラスの局所分析(第二部)", ニューガラスフォーラム 2022 年度第一回評価技術研究会, オンライン, Jan. 25, 2023.
- 16) 溝口照康, "STEM-EELS や XAFS を用いた局所分析の基礎(第一部)", ニューガラスフォーラム 2022 年度第一回評価技術研究会, オンライン, Jan. 25, 2023.
- 17) 川口直登, 柴田基洋, 溝口照康, "第一原理計算による新規黒鉛層間化合物超伝導体の探索", 第70回応用物理学会 春季学術講演会, 上智大学, 東京, 2023/3/16.
- 18) 西尾健人, 柴田基洋, 溝口照康, "グラフェン上の多様な結合種を予測可能な機械学習モデルの開発", 第70回応用物理学会 春季学術講演会, 上智大学, 東京, 2023/3/17.

- 19) 柴田基洋, 溝口照康, "有機高分子材料分析に向けた機械学習による炭素 K 吸収端 ELNES/XANES の形状予測の検討", 第 70 回応用物理学会 春季学術講演会, 上智大学, 東京, 2023/3/18.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(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) 新学術領域研究(研究領域提案型) 代表「情報科学による機能コア計算設計」

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) 「強誘電体材料のスペクトル計算に関する研究」国内化学メーカー

受託研究

① 公的資金

- 1) (国研) 科学技術振興機構(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 4,000 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) Doyun Lee, Ryozo 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, 2022.4, Sustainable Cities and Society.
- 2) Wenchao Wang, Ryozo Ooka, Hideki Kikumoto, Wonseok Oh, Mengtao Han: Influence of various factors on indoor/outdoor pollen concentration ratio based on experimental research: A review, 2022.5, Building and Environment.
- 3) Chenghao Wei, Ryozo Ooka, Qi Zhou: Performance comparison using different multilayer perceptron input-output formats to predict unsteady indoor temperature distribution, 2022.9, Japan Architecture Review.
- 4) Wonseok Oh, Ryozo Ooka, Hideki Kikumoto, Mengtao Han: Numerical modeling of sneeze airflow and its validation with an experimental dataset, 2022.11, Indoor Air.
- 5) Chao Lin, Yunyi Wang, Ryozo Ooka, Cédric Flageul, Youngseob Kim, Hideki Kikumoto, Zhizhao Wang, and Karine Sartelet: Modeling of street-scale pollutant dispersion by coupled simulation of chemical reaction, aerosol dynamics, and CFD, 2023.1, Atmospheric Chemistry and Physics.

和文論文

- 1) 市川裕幸, 大岡龍三: モデル予測制御に基づくデマンドレスポンスに関する技術動向, 2022, 空気調和衛生工学会論文集.

国際会議予稿集

- 1) Mengtao Han, Ryozo Ooka, Hideki Kikumoto, Wonseok Oh, Yuchen Bu, Shuyuan Hu: Measurements of Exhaled Airflow Velocity Via Human Coughs Using Particle Image Velocimetry (PIV), 2022.5, IAQ 2020: Indoor Environmental Quality Performance Approaches.
- 2) Wonseok Oh, Ryozo Ooka, Hideki Kikumoto, Mengtao Han: Numerical analysis of airflow dynamics generated by human coughing based on PIV experimental results, 2022.5, IAQ 2020: Indoor Environmental Quality Performance Approaches.
- 3) Wonseok Oh, Ryozo Ooka, Hideki Kikumoto, Sihwan Lee: Numerical investigation of the

transmission route of infectious particles produced by human, 2022.5, REHVA 14th HVAC World Congress, CLIMA 2022.

- 4) Yunchen Bu, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Wonseok Oh: Numerical Analysis on the Applicability of Air Purifier for Removal of Indoor Viral Contaminants, 2022.5, IAQ 2020: Indoor Environmental Quality Performance Approaches.
- 5) Wenchao Wang, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Wonseok Oh, Chao Lin, Mengtao Han: Numerical analysis of particle dispersion and removal in differently ventilated rooms, 2022.6, INDOOR AIR 2022: Healthy People in Healthy Indoor Environments.
- 6) Chenghao Wei, Ryoza Ooka, Bingchao Zhang, Qi Zhou: Predicting Unsteady Indoor Temperature Distributions by POD-DNN, 2022.9, The 16th ROOMVENT Conference (ROOMVENT 2022).

(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) データセンターの熱源設備の全体最適化についての研究
- 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

計測や数値解析, 機械学習など様々な分野で高次元配列データが現れ, その解析の必要性が高まっている. 近年, 空間量 $O(n^d)$ をもつ階数 d , 次元数 n の高次元テンソルを $O(dnr^2)$ の分解形に圧縮するテンソルトレイン分解 (TT 分解) が提案され, 注目されている. ここで r は特異値分解 (SVD) を適用した場合のランク数である. テンソルトレイン分解アルゴリズムで用いられている TT-SVD は逐次計算であるため, 膨大な計算時間と使用メモリ量を要する点が課題となっている. この問題点を改善するため, 領域分割的アプローチを用い, TT 分解を分散並列処理するアルゴリズム PTTD を開発してきた. PTTD はテンソルをいくつかの小さいテンソルに分割してノードに割り当て, 並列に TT 分解した後, それらをマージして元のテンソルの TT-format を求めるというアルゴリズムである. 分割数 M が小さい場合は時間計算量が $1/M$ 程度になる非常に優秀な手法であるが, Rounding 処理は時間計算量が $O(M^3)$ に比例するため, 分割数が大きい場合にはボトルネックとなる (図 1).

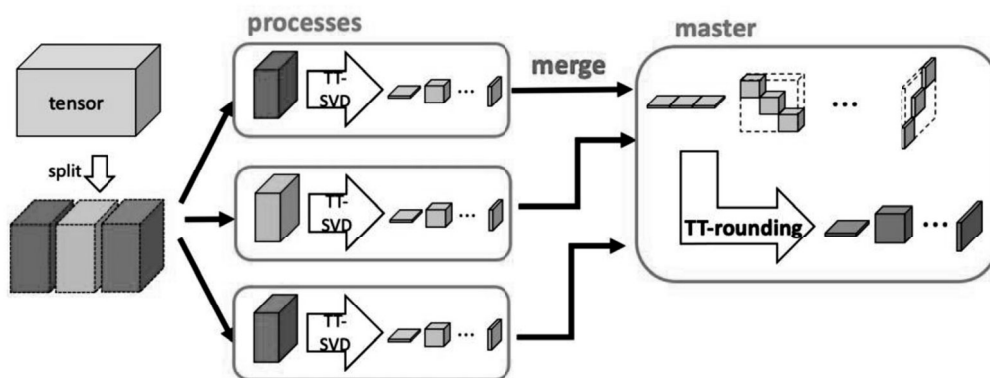


図 1 PTTD アルゴリズム

Rounding 処理には QR 分解と特異値分解で構成される TT-Rounding という手法が用いられてきたが, 本研究ではその中の QR 分解を省くアルゴリズムに加えて, 並列に Rounding 処理を行うことにより, 計算時間を削減するアルゴリズムを提案した (図 2).

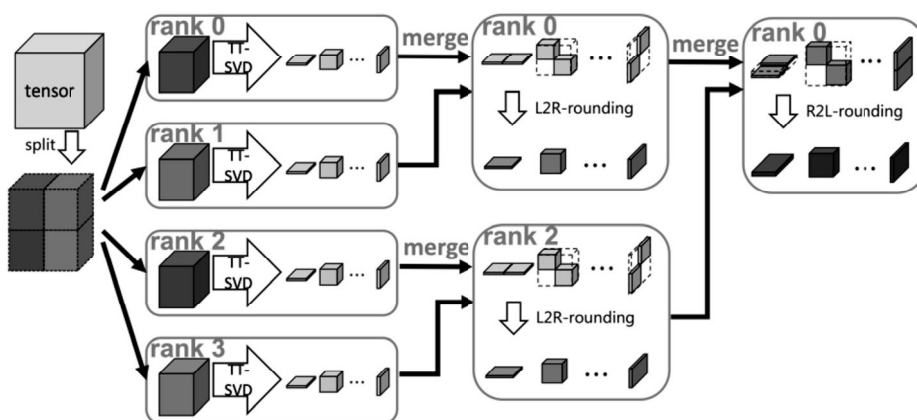


図 2 提案した改良版の PTTD アルゴリズム

数値実験を九州大学情報基盤研究開発センターのスーパーコンピューターシステム ITO で行った。ITO は 1 ノードに 18 コアの Intel Xeon Gold 6154 (Skylake-SP) 2 つと 96 GB のメモリ 2 つを搭載しているが、実験ではフラット MPI を用い 1 ノード 32 コアまでを使用した。実験はランク数が低いことで知られている 6 種類のテンソル (IS, LOG, SIN, ISR, ICR, IPR) に対して並列数を変えて分解した。図 3 には、提案する改善アルゴリズムで 8,192 並列までのスピードアップ率を示す。いずれのテンソルデータに対してもスケーラブルな性能が得られていることがわかる。

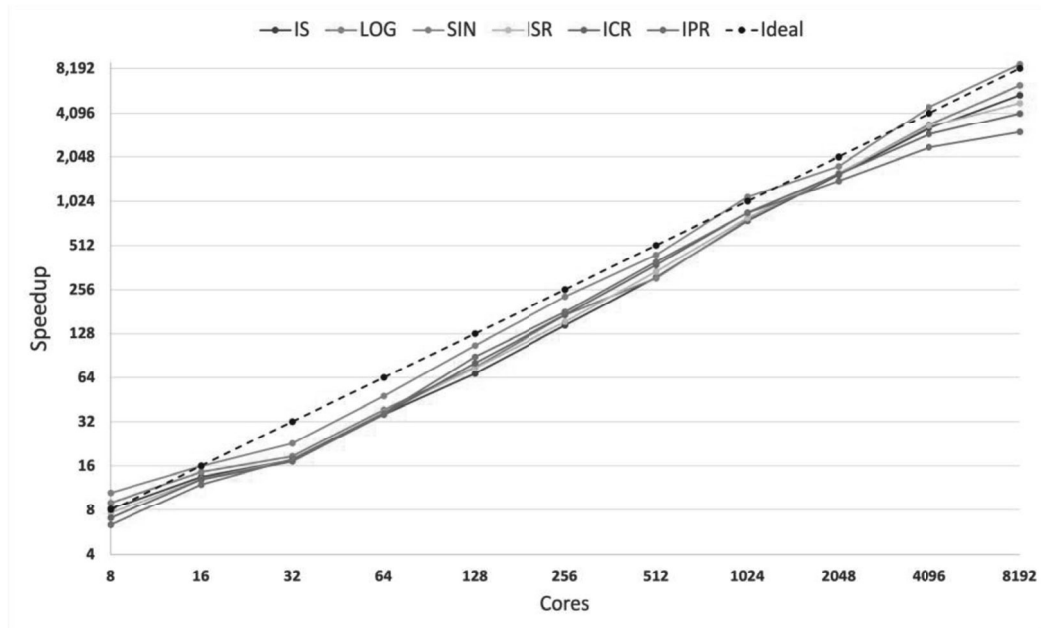


図 3 NOQR-rounding を用いた PTTD の高速化率。Ideal は高速化率と並列数と一緒にある場合を示している。

本研究によって改善された PTTD は、分解でできた TT-format の空間使用量が逐次アルゴリズム TT-SVD よりすこし大きいですが、決定的手法 (乱択アルゴリズム以外) の TT 分解の並列アルゴリズムの中で最も良い性能を示した。乱択アルゴリズムは性能が良いが、誤差をコントロールできない問題点がある。本提案アルゴリズムは、誤差を指定された閾値以下に抑えられる点や任意の次元軸に分散されたテンソルを分解できる点などのメリットがある。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Chenyue Jiao, Chongke Bi, Lu Yang, Zhen Wang, Zijun Xia, and Kenji Ono: ESRGAN-Based Visualization for Large-Scale Volume Data, J Vis <https://doi.org/10.1007/s12650-022-00891-2>, 2022.
- 2) Xin Liang, Sheng Di, Franck Cappello, Mukund Raj, Chunhui Liu, Kenji Ono, Zizhong Chen, Tom Peterka, and Hanqi Guo: Toward Feature-Preserving Vector Field Compression, in IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 2022, doi:10.1109/TVCG.2022.3214821.

学会講演論文

- 1) 川鍋友宏, 村田健史, 山本和憲, 深沢圭一郎, 樋口篤志, 豊嶋紘, 小野謙二: JHPCN 広域分散クラウドを用いた超高解像度時系列画像の多拠点共有実験の報告, AXIES 2022.
- 2) 謝施遥, 小野謙二: テンソルトレイン分解の領域分割型並列計算アルゴリズム PTTD, 応用数理学会年会 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。

2022 年度は、強化学習を壁乱流制御に応用することにより、これまでに研究者が物理的洞察に基づいて開発してきた制御則に対して、より効果的な制御則を発見することに成功した。また、伝熱面の形状／トポロジー最適化においては、これまでの熱伝導と対流熱伝達に加えて、ふく射伝熱を考慮した伝熱面形状の最適化アルゴリズムを開発し、その有効性を示した。これにより、3 つの伝熱モードを全て考慮した上での伝熱面形状最適化の可能性が拓けた。

(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。

2022 年度は、濃度センサを搭載した移動ロボットを用いて、限られた計測情報に基づきスカラー源や濃度分布を推定し、さらにその結果に基づき次の計測点を能動的に決定するアルゴリズムを適用することにより、実験風洞においてその探索性能を実証した。

(3) コロイド流体の塗布乾燥における微粒子の自己配列化

燃料電池、リチウムイオン電池、太陽電池、光学デバイス等のアプリケーションでは、微細な粒子を基板上に規則正しく配列することによって、新規機能を創出する試みが進められている。多くの場合、これらの粒子膜は、粒子を分散させた溶媒を基板上に塗布、乾燥させることによって製造される。しかし、スラリーの塗布乾燥は、液膜流れ、相変化、表面張力効果、粒子間相互作用、熱・物質輸送を内包する複雑な現象であり、塗布・乾燥条件の決定は経験に大きく頼っているのが現状である。

2022 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い、従来、単一の液滴を射出することが難しいと考えられていた条件下において、安定した液滴射出を実現するアクチュエータ駆動波形を実験的に発見することに成功した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Nakazawa, T., Misaka, T., Hasegawa, Y.: “Optimal Design for Suppressing Time Fluctuation Part of Two-Dimensional Jet in Crossflow”, International Journal of Computational Fluid Dynamics, Vol. 36, No. 2, 112-124 (2022).
- 2) Kaneko, K., Huang, Z., Sato, T., Ujikawa, N., Hayakawa, T., Hasegawa, Y., Suzuki, H.: “Investigation of the vibration-induced local flow around a micro-pillar under various vibration conditions”, Mechanical Engineering Journal, Vol. 10, No. 1, pp. 22-00223 (2023).
- 3) Liu, M., Hasegawa, Y.: “Volume penalization method for solving coupled radiative-conductive heat transfer problems in complex geometries”, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 200, 123499 (2023).
- 4) Gong, J., Onishi, J., Komatsu, Y., Mao, N., Kametani, Y., Hasegawa, Y., Shikazono, N.: “Heat transfer and pressure loss characteristics of an offset fin with oblique waves”, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 200, 123522 (2023).
- 5) Wang, H., Hasegawa, Y.: “Multi-objective optimization of actuation waveform for high-precision drop-on-demand inkjet printing”, Physics of Fluids, Vol. 35, Issue 1, 013318 (2023).

(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)
- 5) 基盤研究(A)「脳卒中リスク予測のための全身一脳循環代謝の解析システム構築」

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) 「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」
- 3) 「空調用熱交換器の最適設計」
- 4) 「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(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)

- 2) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO) 先導研究プログラム／エネルギー・環境新技術先導研究プログラム／表面・構造機能化による新概念熱物質交換器開発(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) Mohamed Adel, Koji Matsumoto, Tamon Ueda, Kohei Nagai: Material comparative analysis of crack-bridging degradation of SFRC structural beams under flexural fatigue loading, Construction and Building Materials, Vol. 339, 127642, 2022.
- 2) Kumar Avadh, Punyawut Jiradilok, John E. Bolander, Kohei Nagai: 3D mesoscale simulation of the influence of corrosion on loss of tension stiffening in reinforced concrete, Construction and Building Materials, Vol. 339, 127684, 2022.

- 3) Kumar Avadh, Kohei Nagai: 3D RBSM Analysis of Bond Degradation in Corroded Reinforced Concrete as Observed Using Digital Image Correlation, *Materials*, 15, 6470, 2022.
- 4) Seyed Yaser Mousavi Siamakani, Kohei Nagai, Punyawut Jiradilok, Raktipong Sahamitmongkol: Prevention of concrete breakout failure of expansion anchor in tension by post-installed reinforcement: Discrete analysis and experiment, *Case Studies in Construction Materials*, Vol. 17, e01233, 2022.
- 5) Jie Luo, Shingo Asamoto, Kohei Nagai: An analytical investigation of bond deterioration between rebar and ASR/DEF-damaged concrete with and without stirrup confinement using 3D RBSM, *Construction and Building Materials*, Vol. 351, 128923, 2022.
- 6) Haoyu Peng, Kumar Avadh, Kohei Nagai: Analysis of Non-uniform Local Strain in Corroded Reinforcing Bar in Concrete using Digital Image Correlation, *Journal of Advanced Concrete Technology*, Vol. 21, Issue 1, pp. 42-57, January, 2023.
- 7) Cheng Jiang, Kumar Avadh, Kohei Nagai: A mesoscale simulation of the FRP-to-concrete interfacial debonding propagation process by 3D RBSM, *Composite Structures*, Vol. 304, 116336, 2023.
- 8) Jie Luo, Shingo Asamoto, Kohei Nagai: Mesoscale simulation of compression-induced cracking and failure of ASR-damaged concrete with stirrup confinement, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 277, 108977, 2023.
- 9) Patrick Nicholas Hadinata, Djoni Simanta, Liyanto Eddy, Kohei Nagai: Multiclass Segmentation of Concrete Surface Damages Using U-Net and DeepLabV3+, *Applied Sciences*, Vol. 13, Issue 4, 2398, 2023.

和文論文

- 1) 龍田 齊, 原田 豊, 貫井 敬章, 柴 洸希, 清水 亮平, 長井 宏平: 勾配ブースティング決定木と畳み込みニューラルネットワークを組み合わせた橋梁の劣化進展推定, *AI・データサイエンス論文集*, 3 巻, J2 号, pp. 1017-102, 2022.

国際会議予稿集

- 1) Jie Luo, Yi Wang, Shingo Asamoto, Kohei Nagai: Meso-scale analysis of steel-concrete bond damaged by alkali-silica reaction via a 3D Rigid Body Spring Model, *Proceedings of Bond in Concrete 2022-Bond, Anchorage Detailing*, pp. 1001-1012, 2022.
- 2) Jie Luo, Shingo Asamoto, Kohei Nagai: A study on the bond deterioration between ASR/DEF damaged concrete and reinforcement using discrete mesoscale analysis, *76th RILEM Annual Week 2022 and International Conference on Regeneration and Conservation of Structures (ICRCS 2022)*, Kyoto, Japan, 2022.
- 3) Suhas S Joshi, Vikas Singh Kuntal, Kumar Avadh, Kohei Nagai: Validation of the mesoscale MPC-RBSM simulation system to estimate the corrosion level of reinforcement in concrete from surface crack information, *76th RILEM Annual Week 2022 and International Conference on Regeneration and Conservation of Structures (ICRCS 2022)*, Kyoto, Japan, 2022.

- 4) Hiroshi Yokota, Kohei Nagai, Koji Sakai: Life cycle management of concrete structures based on sustainability indicators, Acta Polytechnica CTU Proceedings, 33, pp. 644-650, 2022.

学会講演論文

- 1) Jie Luo, Kohei Nagai: Investigation on the bond behavior between rebar and ASR damaged concrete by discrete analysis model, 第 66 回理論応用力学講演会講演論文集, GS6-02, 2022.
- 2) Suhas Joshi, Kohei Nagai: Verification of the inverse estimation of corrosion from surface crack width using model predictive control (MPC) combined with mesoscale simulation, 第 66 回理論応用力学講演会講演論文集, GS6-05, 2022.
- 3) 牧祐之, 横山広, 榎谷浩, 長井宏平, 中村拓郎, 野村貴律, 田仲秀行: 自律飛行型ドローンによる床版下面画像からの角欠け検出に関する試験, 土木学会全国大会第 77 回年次学術講演会, CS19-13, 2022.

総説・解説

- 1) 長井宏平: 社会データを活用した維持管理の時代へ, 巻頭言, 月刊「建設」, 2023 年 2 月号, pp. 4-5, 2023.
- 2) 半井健一郎, 長井宏平, 大野定俊, 丸山一平: Journal of Advanced Concrete Technology の現状と課題, コンクリート工学, Vol. 61, No. 3, pp. 266-272, 2023.
- 3) 道路メンテナンスが目指すべき姿とは, 道路, 2022 年 10 月号, pp. 8-14, 2022 (インタビュー記事).
- 4) 松山公年, 長井宏平: 橋梁メンテナンスのための構造工学【実践編】最終回これからの橋梁メンテナンス, 橋梁と基礎, 2022 年 7 月号, 2022.
- 5) 下村匠, 長井宏平: PC 橋に関する海外の話題—JICA による維持管理技術者育成の海外展開、fib Model Code の改訂状況—, プレストレストコンクリート工学会第 49 回 PC 技術講習会, 2022.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(A)【代表】深層学習を実装した微細構造解析による鉄筋コンクリート内部損傷の逆推定と性能評価
- 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

民間等との共同研究

- 1) 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)
- 2) 日本鉄鋼連盟研究振興財団研究助成【代表】「深層学習 GAN を用いた橋梁鋼製支承腐食劣化の三次元外観変状予測」
- 3) 上田記念財団研究助成【代表】「連続繊維シート補強 RC 部材の鉄筋腐食による剥離剥落リスクの微細構造解析による検討」

受託研究

① 公的資金

- 1) (国研) 科学技術振興機構 (JST) SATREPS【分担】タイ国における自然災害リスクを考慮に入れたインフラマネジメント技術の開発

革新的シミュレーション研究センター 令和4年度 活動報告 Vol. 15

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

