



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 5 年度  
活動報告

Vol. 16





## 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 4 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(令和 5 年度まで)、長谷川洋介教授(令和 6 年度から))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／分割製造 TYPE4 高圧水素容器の最適設計のためのメゾ・マクロツースケール解析に基づくボス・ドーム部強度高精度予測軸対称有限要素モデルの開発と実証」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的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 6 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 5 年度 活動報告

Vol. 16

### 目 次

|                                             |    |
|---------------------------------------------|----|
| 1. 革新的シミュレーション研究センターの概要 .....               | 1  |
| 2. 構成メンバー .....                             | 3  |
| 3. センターの活動実績 .....                          | 7  |
| (1) 大型プロジェクトの推進                             |    |
| 1) 文部科学省「『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」     |    |
| (実施期間: 令和 5～令和 7 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                |    |
| 「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                             |    |
| ／分割製造 TYPE4 高圧水素容器の最適設計のためのメゾ・マクロツースケール解析に基 |    |
| づくボス・ドーム部強度高精度予測軸対称有限要素モデルの開発と実証」           |    |
| (実施期間: 令和 5～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 .....                          | 33 |



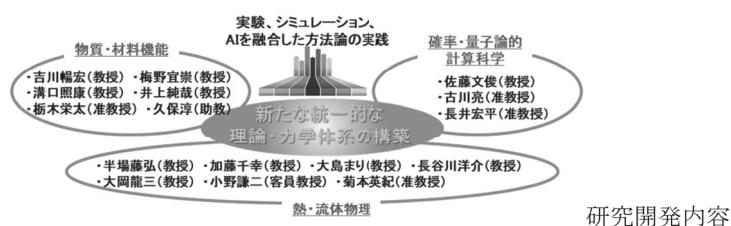
## 1. 革新的シミュレーション研究センターの概要

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の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べく、High Performance Computing (HPC) 環境を利用した先端の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』『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』(実施期間: 令和 5～令和 7 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 4 年度)、「分割製造 TYPE4 高圧水素容器の最適設計のためのメゾ・マクロツースケール解析に基づくボス・ドーム部強度高精度予測軸対称有限要素モデルの開発と実証」(実施期間: 令和 5～令和 6 年度)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。





## 2. 構成メンバー



吉川 暢宏 センター長・教授

Nobuhiro YOSHIKAWA, 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 マルチスケール固体力学

Multi-scale Solid Mechanics



梅野 宜崇 副センター長・教授

Yoshitaka UMENO, Deputy Director of Center, 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



半場 藤弘 教授

Fujihiko 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



加藤 千幸 教授

Chisachi KATO, 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



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



長谷川 洋介 教授

Yosuke HASEGAWA, 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



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



井上 純哉 教授

Junya INOUE, 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 鉄鋼冶金インフォマティクス

Materials Informatics in Physical Metallurgy



大岡 龍三 教授

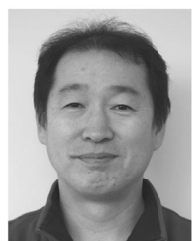
Ryozo OOKA, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 都市エネルギー工学

Urban Energy Engineering



小野 謙二 客員教授

Kenji ONO, Visiting Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 大規模計算機工学

Large-Scale Computer Engineering





古川 亮 准教授

Akira FURUKAWA, 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 複雑流体物理学

Physics of Complex Fluids



栃木 栄太 准教授

Eita TOCHIGI, Associate Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 ナノスケール材料強度学

Nanoscale Strength of Materials



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



菊本 英紀 准教授

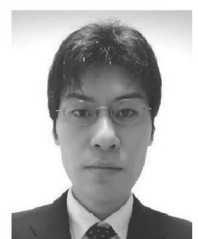
Hideki KIKUMOTO, Associate Professor

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 複雑系環境制御工学

Control Engineering of Complex Environmental System



久保 淳 助教

Atsushi KUBO, Research Associate

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 ナノ・マイクロ計算材料力学

Nano-Micro Mechanophysics



### 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」

「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」

(実施期間: 令和 5～令和 7 年度) 課題責任者: 加藤千幸(東京大学生産技術研究所)

#### [概 要]

AIを活用することによってHPCの適用範囲を飛躍的に拡大するための研究開発を実施し, 強力な産学連携体制の下, その効果を実証する. さらに, 大規模な産学連携コンソーシアム組織等と連携することによって, 実証研究の成果を幅広い産業分野に展開する. また, 研究成果の社会実装, すなわち, 研究成果の実用化を加速するために次世代計算基盤を構築する.

#### [詳 細]

本課題はHPCの産業応用を飛躍的に拡大し, 産業界におけるHPCの実用化を加速するための基盤的な研究, 基盤研究の産業上の効果を検証するための, カーボンニュートラル時代のものづくりを代表する実証研究, および, 実証された基盤研究の成果を幅広い産業分野に展開するための次世代計算基盤の構築に係る6つの研究テーマを実施することによって補助事業の目的を達成する.

令和5年度に実施した具体的な事業内容について, 以下に記す.

#### ( i ) 研究開発

##### (研究テーマ 1) AI を活用した実機スケール乱流の予測モデルの開発

本研究テーマでは, 「富岳」上で実行する HPC シミュレーションによって生成された膨大なデータを深層学習させ, データの中に潜在する特徴量やパターンを抽出することによって, HPC シミュレーションと同等の精度を維持しつつ, 計算コストを飛躍的に軽減できる壁面挙動予測モデルを開発する. さらに, 多数の計算結果を集約することにより設計空間を短時間に探索できる高精度なサロゲートモデルを構築する. これら 2 つの研究成果を組み合わせることで, HPC を用いた新たな設計論を提案する.

令和 5 年度は, 乱流境界層の Wall-resolved LES データベースの作成・学習用ネットワークの構築, および, サロゲートモデル構築用の教師用データの作成・ネットワークの構築を実施した. 前者の壁面挙動予測モデルの開発については, ネットワーク構造を提案し, その中に含まれる二つの主要なネットワーク, すなわち, 壁面近傍の情報から壁面せん断応力を出力するネットワーク(生成器), および, 壁モデルを用いて計算された流れ場と Wall-resolved LES で得られた流れ場を判別するネットワーク(判別器)の基盤コードを開発し, その動作検証により, 正常に動作していることを確認した. サロゲートモデルについては, ネットワークの基本構造を検討し, 従来の設計変数に加えて, 流れ場の空間構造を組み込んだネットワーク, および, 流れ場の空間情報を自己符号化器により低次元に圧縮するネットワークを開発し, その動作検証により, 正常に動作していることを確認した.

##### (研究テーマ 2) スマート in-situ 可視化基盤の構築

本研究テーマでは, これまで自動車などの輸送機器の空力・騒音問題を主たる対象として実証研究に用いられてきた複雑現象統合シミュレーションフレームワーク CUBE の機能を拡充して HPC の適用

分野を飛躍的に拡大するために、スマート in-situ 可視化基盤の構築に係る研究開発を実施する。

令和 5 年度は、in-situ 可視化基盤の構築と最適視点推定技術の実装を実施した。具体的には、独自に開発を進める可視化基盤ソフトウェア(Kyoto Visualization System(KVS))を使って in-situ 可視化を実現するための基本フレームワークを開発した。本フレームワークは C++で実装されており、CUBE、および、OpenFOAM や独自のテスト用 Fortran ソルバ向けの接続機能を開発し、動作検証と性能評価を行い、正常に動作していることを確認した。また、最適視点推定機能を実装したモジュールや最適な注視点を推定する技術を開発し、基本フレームワーク向けのモジュールとして実装し、正常に動作していることを確認した。

### （研究テーマ 3）実船の推進性能の予測

本研究テーマでは、「研究テーマ 1:AIを活用した実機スケール乱流の予測モデルの開発」において開発する壁面挙動予測モデルを、有限要素法による LES 解析アプリケーションである FrontFlow/blue (FFB)に実装し、10 億程度の計算格子によって、模型試験スケールの流場と模型船の推進性能を予測する。その予測結果を Wall-Resolved LES の計算結果と比較することによって予測精度を検証する。さらに、600 億程度の計算格子を用いて、実船スケールの流場と実船の推進性能を予測し、試験結果等と比較することによって、予測精度を検証する。

令和 5 年度は、壁面挙動予測モデルの実装を準備した。FFB に対する壁面挙動予測モデルの実装準備として、実際に壁面挙動予測モデルの使用が想定される船の形状で、壁面挙動予測モデルの入っていない粗い計算格子を使った計算結果(Under-resolved LES)と Wall-resolved LES の結果について統計的性質の違いについて分析した。また、研究テーマ 1 で開発した判別器を用いて、船底など船体表面の曲率半径が大きい領域では、違う船型の数種類のレイノルズ数でも同一の判別器で Wall-resolved LES と Under-resolved LES の計算結果が判別できることが確認された。アプリケーション開発としては壁面挙動予測モデルの入力に必要なデータの抽出を効率的に行えるようなコードの改変を行った。Under-resolved LES の計算結果は、壁付近の小さな渦が再現できず、摩擦応力を過大評価する場合と過小評価する場合があることなど、壁面挙動予測モデルを実用化する上で重要な知見が得られた。

### （研究テーマ 4）自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立

本研究テーマでは、「研究テーマ 1:AIを活用した実機スケール乱流の予測モデルの開発」において開発する壁面挙動予測モデルを活用して、自動車の開発現場で実施可能な、数億格子から 10 億格子規模の LES によって空力騒音を精度良く予測する技術を構築し、上記の研究成果の実用化を加速する。さらに、「研究テーマ 2:スマート in-situ 可視化基盤の構築」において開発する研究成果を活用して、車両まわりの主要な空力音源を高確度に特定する技術を開発する。

令和 5 年度は、CUBE および FFX に対する壁面挙動予測モデルの実装準備を実施した。CUBE に対する壁面挙動予測モデルの実装準備として、エントロピーのバランスを考慮した KEEP スキームの実装と壁面近傍における計算の不安定性の改善、実車を対象とした広帯域バサバサ音予測のためのベンチマーク問題の選定と空間解像度の検討、バサバサ音予測のための変動風モジュールの開発を実施した。FFX に対する壁面挙動予測モデルの実装準備として、格子ボルツマン法の壁面処理について検討し、自動車のような複雑形状を安定的に計算するには、バウンスバック法の処理の改良が必要なこ

とを明らかにし、質量の保存性を保つための改善処理を行い、安定な解析を行えるようにした。その結果、格子数 10 億格子程度でも空力騒音が精度良く解析できることを確認した。解析結果に関して、波数周波数スペクトル解析を用いて音場と流れ場に分離し、音源を解析できることを確認した。

#### （研究テーマ 5）ヒートポンプ用ファンの性能向上

本研究テーマでは、「研究テーマ 1: AI を活用した実機スケール乱流の予測モデルの開発」において開発するサロゲートモデルを活用し、従来は検討されていなかった広範な設計パラメータを探索することによって、従来性能を大幅に凌駕するプロペラファンを設計する。

令和 5 年度は、ヒートポンプ用ファンの設計パラメータの抜本的な見直しを実施した。自動車ラジエータ用ファンなどの軸流ファンを参考にして、ファンの上流設計で重要となる、主要な形状パラメータと性能との関係を調査した。この調査にあたり、実機ファンの 3 次元形状測定に基づく設計とモデリングを行う環境を構築した。ファン単体での性能評価によるプロペラファンの数値解析を行い、設計パラメータ（形状）の範囲を大幅に拡大したファンを開発した。開発したファンをエアコン室外機流路に組み込み込んだ数値解析を実施し、従来ファンの性能を上回る結果を得ることができ、本研究テーマで開発するファンの概念設計を完了した。

#### （研究テーマ 6）次世代計算基盤の構築

本研究テーマでは、「研究テーマ 3: 実船の推進性能の予測」、「研究テーマ 4: 自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立」、および「研究テーマ 5: ヒートポンプ用ファンの性能向上」によって産業上の利用効果が実証された HPC アプリケーション FFB, FFX, および CUBE を、今後のハードウェアの主流になるものと考えられる GPGPU に移植し、HPC シミュレーションを幅広い産業分野に展開する。また、ハードウェア性能の今後の進展予測に鑑み、アプリケーションの実効性能がメモリー性能律速にならない解析アルゴリズムを研究開発するとともに、「富岳」の実効通信性能を向上させるための基盤研究を実施する。

令和 5 年度は、課題内の代表的なアプリケーション FFB を NVIDIA 社製 GPU A1 に移植し、GPU 単体実効性能 257 GFLOPS, 64 GPU の並列実効性能 12,963 GFLOPS, 並列化効率 78.8 % を達成した。また、FFB の「富岳」におけるプロセス間通信に要する時間を短縮し、並列化効率を向上させるために、ランクマップを最適化するアルゴリズムを開発し、192 ノード・384 プロセスの並列計算において、通信時間を 24.0 % 短縮し、通信時間を含めた計算時間を 5.4 % 短縮した。さらに、最適化アルゴリズムの改良によって、192 ノード、768 プロセス間の通信ランクマップの作成時間を 70 時間から 6.36 秒に大幅に短縮した。

#### （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。また、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」および「HPC を活用した自動車次世

代 CAE コンソーシアム」等に対して，研究成果の展開を実施する。

令和 5 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。得られた成果については，シンポジウム等を開催し，公開した。また，実証研究の成果を広い産業分野に展開するため，FFX へ回転系解析機能を実装し，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」に展開した。

## 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「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／分割製造 TYPE4 高圧水素容器の最適設計のためのメゾ・マクロツースケール解析に基づくボス・ドーム部強度高精度予測軸対称有限要素モデルの開発と実証」

(実施期間: 令和 5～令和 6 年度) 吉川暢宏(東京大学生産技術研究所)

### [概 要]

2050年のカーボンニュートラル実現を目指すため，燃料電池自動車(以下FCV)普及拡大に向けて，主要構成部品であるTYPE4高圧水素容器の大幅な低価格化が求められている。達成のためには，2023年ロードマップ解説書P. 46図2.4.1-2に掲げられている高コスト要因である炭素繊維強化プラスチック(以下CFRP)使用量の削減シナリオを着実に実行していくことが重要である。

削減シナリオの一つとして示されている「積層最適化」によるCFRP使用量大幅削減を目的として，2021-2022年度の2年間，「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」(以下「機械学習を用いた高圧水素容器最適設計プロジェクト(2021-2022)」)の研究を実施した。その成果として，容器のCFRP積層，ボス口元径やドーム形状などの設計パラメータを変化させて解析から求めた容器破裂強度を機械学習データとして大量に蓄積し最適化探索を行うことにより，膨大な積層パターンの中からCFRP使用量を最小とする最適容器構造を見出すことが可能となった。

容器破裂強度は，大量の学習データ蓄積のため，1データ当たり1分程度の短時間でモデル化と解析が行える2次元「軸対称有限要素モデル」による線形有限要素解析から求まる「繊維方向ひずみ値」を破壊規準として用いた。しかし，実容器の調査結果や繊維束の積層状態を高機能にモデル化した3次元「メゾスケール有限要素モデル」解析との比較により，設計モデルを設定する軸対称モデルにおける繊維方向ひずみ値は，実容器に対し直胴部では比較的誤差が小であるのに対しボス・ドーム部で特に誤差が大きく，最適設計探索においては補正を行う必要があることが再確認された。

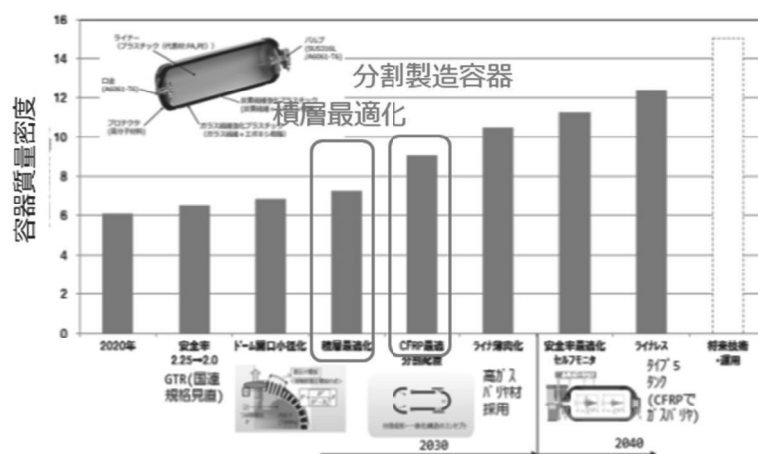
一方，FCV用TYPE4容器低価格化の最有力手段と目されている，ロードマップのCFRP使用量削減シナリオにもある「CFRP部の分割製造容器」に関しては，ロボットによるテーププレースメント工法やチョップド繊維による成形工法などを用いることができるため，「機械学習を用いた高圧水素容器最適設計プロジェクト(2021-2022)」で前提としてきたフィラメントワインディング工法による一体構造容器と比較してCFRP積層自由度が各段に増大する。よって，分割製造容器のCFRP使用量最小となる最適容器をこ

れまでの開発経験値から導き出すことは非常に困難であり、積層パターンがさらに増大しても最適容器探索が可能な機械学習の活用が必須と考える。また、分割されたボス・ドーム部と直胴部それぞれCFRP使用量最小のものを結合することが全体としても最小になるであろうことを考慮すると、軸対称モデルによるボス・ドーム部が高精度に予測された強度の下での探索が重要になってくる。

軸対称モデルは、繊維束の交差によるクリンプやボス部近傍の樹脂の厚みや周方向の不規則性などが簡略化されており、解析誤差が避けられないモデルである。これまで軸対称モデルは容器の研究開発や許認可試験の裏付けのための解析などに広く使われてきているが、製造メーカなどでは各社ノウハウによる実容器との合わせ込みや、実容器との誤差の小さい容器直胴部で破裂させる設計の工夫などにより、解析誤差を許容しつつ活用するに留まっている。

これまでの研究において、直胴部については、軸対称モデルの誤差の主要因は繊維束交差で発生するクリンプ部の局所ひずみであることがほぼ解明できている。しかし、ボス・ドーム部については、ボス口元部や3次元曲面での繊維束交差部に曲げや接触の加わる複雑な応力・ひずみ場であるため、実容器を再現した高機能モデルであるメゾスケールモデルによる強度予測の研究が東京大学を中心に行われてきているが、簡易モデルである軸対称モデルによる強度予測の高精度化への数理的検討による取り組みはこれまで行われていない。

そこで、本開発では、分割製造TYPE4高压水素容器の最適設計に貢献することを目的として、機械学習での最適設計探索に必須である軸対称モデルにおけるボス・ドーム部強度予測の高精度化に取り組む。さらに高精度軸対称モデルを用いて、一体容器に加え分割製造容器での探索も可能な機械学習による容器最適設計システムを構築する。



CFRP使用材料削減ロードマップ目標値\*

\*2023年ロードマップ解説書P. 46図2.4.1-2より

## [詳 細]

### ①「メゾスケールパラメータの定式化」

破裂強度を決定するメゾスケール構造パラメータを軸対称モデルの要素剛性マトリクスに導入するため構成則を定式化する。繊維束の配向と交差によるクリンプの状況が場所ごとに異なるボス・ドーム部に

においてもメゾスケール解析と同等の繊維方向ひずみの解析精度を実現するため軸対称モデルの構成則を要素ごとに設定する。

1) メゾスケールパラメータの数値化

「繊維束の交差状態」「繊維束の回転移動」「ボス／繊維束の接触状態」をモデル化し、数値化の手法を検討する。

2) 軸対称モデルの構成則として要素剛性マトリクスに導入するためのメゾスケールパラメータ決定手法

ボス・ドーム部において周方向に変動するメゾスケールパラメータのバリエーションを数理的に表現し、軸対称モデルの構成則として要素ごとに要素剛性マトリクスに導入する手法を検討する。

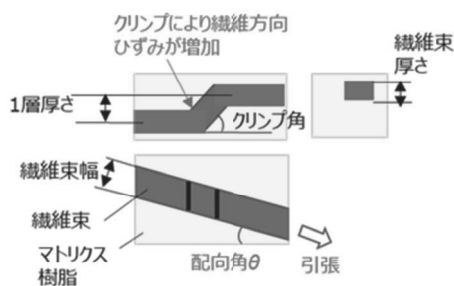
①-1 メゾスケール構造パラメータ「繊維束の交差状態」の定式化

実容器の繊維束による交差状態を再現したメゾスケール解析において、繊維束の交差で発生するクリンプ（繊維に発生する屈曲）で繊維束に局所ひずみが生じることが確認できている。よって、「局所ひずみを含む繊維方向ひずみ最大値」>「繊維破断ひずみ」となったときに容器が破裂に至ると仮定する。従来の軸対称モデルは、繊維束の交差で生じるクリンプの局所的ひずみ上昇は評価できない。そこで、軸対称モデルCFRP各要素の要素剛性マトリクスにおいて、クリンプ部の局所ひずみ発生部位の剛性変動を補正することで高精度化を図る。



メゾスケールモデル 最大主ひずみコンター図

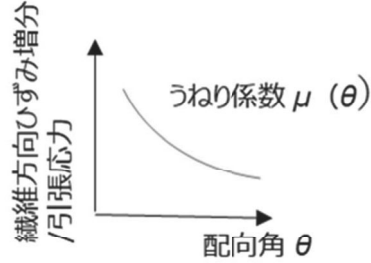
Step 1. クリンプ部の解析モデル（またはモデルの理論式）を作成する。



クリンプ部の解析モデル



Step 2. クリンプ部の剛性変動のパラメータとして、「配向角 $\theta$ 」に対する「ひずみ/引張応力」との関係式(うねり係数 $\mu(\theta)$ とする)を求める。本研究では、他のパラメータ(クリンプ角, 繊維束厚さ, 幅, 1層厚さ, 繊維束物性, マトリクス樹脂物性, 繊維体積含有率 $V_f$ )は固定値とする。



クリンプ部による剛性変動のパラメータ

Step 3. 軸対称モデル各要素の配向角における「うねり係数 $\mu(\theta)$ 」を除いた繊維方向の弾性係数 $E_l(\theta)$ を用い要素剛性マトリクスを構成する。繊維方向にのみひずみ増加すると仮定し, 繊維方向弾性係数 $E_l$ にうねり係数 $\mu(\theta)$ を以下の式に従って組み込む。

$$E_l(\theta) = V_f E_{\text{繊維}} / \mu(\theta) + (1 - V_f) E_{\text{マトリクス樹脂}}$$

コンプライアンスマトリクス(要素剛性マトリクスの逆行列)の $E_l$ を配向角 $\theta$ の関数である上式に置き換える。

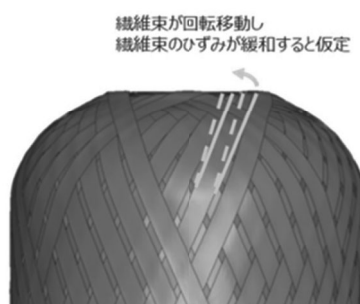
$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/E_1(\theta) & -\nu_{21}/E_2 & -\nu_{31}/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{12}/E_1(\theta) & 1/E_2 & -\nu_{32}/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{13}/E_1(\theta) & -\nu_{23}/E_2 & 1/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/G_{23} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/G_{31} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/G_{12} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \tau_{23} \\ \tau_{31} \\ \tau_{12} \end{Bmatrix}$$

ここで添え字1は繊維方向, 2は面内繊維直交方向, 3は面外繊維直交方向を示す。上式によって補正したコンプライアンスマトリクス(要素剛性マトリクスの逆行列)を軸対称モデルのCFRP各要素それぞれに組み込む。

#### ①-2 メゾスケール構造パラメータ「繊維束の回転移動」の定式化

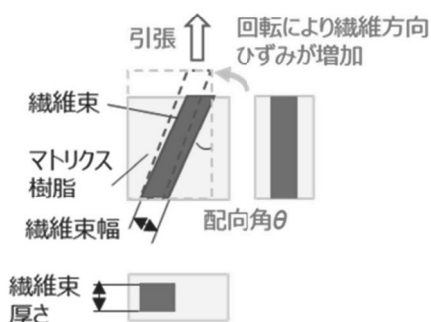
従来の軸対称モデルとメゾスケールモデルを同じ内圧, 同じ積層で計算すると, 口金の軸方向への移動距離が軸対称モデルよりもメゾスケールモデルの方が大きいことがわかった。この理由として, ドーム部が内圧により大変形するとき繊維束の回転移動が起これ, 軸方向に大きく移動することで繊維束のひずみが緩和されるとの仮説を立てた。従来の軸対称モデルは, 繊維束の回転移動が無い微小変形前提のモデルであり, 内圧によってCFRP(繊維束+マトリクス)に微小ひずみが付加される。本開発においては, 大変形を考慮し軸対称モデルの要素剛性マトリクスにおいて繊維束の回転移動によるひず

み緩和に相当する剛性変動を補正することで高精度化を図る。



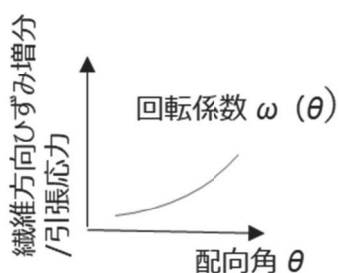
メゾスケールモデルによる繊維束の回転変動の仮説

Step 1. 繊維束回転移動の解析モデル(またはモデルの理論式)を作成する。



繊維束の回転移動の解析モデル

Step 2. 回転による剛性変動のパラメータとして、「配向角 $\theta$ 」に対する「ひずみ/引張応力との関係式(回転係数 $\omega(\theta)$ とする)を求める。本研究では、他のパラメータ(繊維束厚さ, 幅, 繊維束物性, マトリクス樹脂物性, 繊維体積含有率 $V_f$ )は固定値とする。



繊維束の回転移動による剛性変動のパラメータ

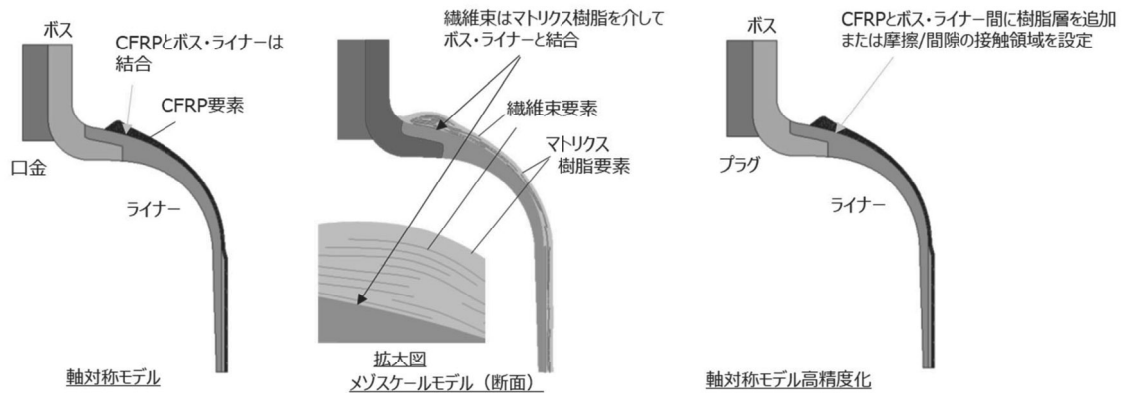
Step 3. 軸対称モデル各要素の配向角における「回転係数 $\omega(\theta)$ 」で乗じた要素剛性マトリクスを構成する。繊維方向, 直交方向全体にひずみが影響すると仮定し, コンプライアンスマトリクス(要素剛性マトリクスの逆行列)に回転係数 $\omega(\theta)$ で除すことによって行列全体を補正する。

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \gamma_3 \end{Bmatrix} = \frac{1}{\alpha(\theta)} \begin{pmatrix} 1/E_1 & -\nu_{21}/E_2 & -\nu_{31}/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{12}/E_1 & 1/E_2 & -\nu_{32}/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{13}/E_1 & -\nu_{23}/E_2 & 1/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/G_{23} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/G_{31} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/G_{12} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \tau_{23} \\ \tau_{31} \\ \tau_{12} \end{Bmatrix}$$

ここで添え字1は繊維方向, 2は面内繊維直交方向, 3は面外繊維直交方向を示す. 上式によって補正したコンプライアンスマトリクス(要素剛性マトリクスの逆行列)を軸対称モデルのCFRP各要素それぞれに組みこむ. 上式の $E_i$ を①-1 Step 3の $E_i(0)$ に置き換えることにより「繊維束交差状態」「繊維束の回転移動」を同時に組み込むことができる.

### ①-3 メゾスケール構造パラメータ「ボス／繊維束の接触状態」の定式化

従来の軸対称モデルは, 剛性の比較的高いCFRPとボス・ライナーは共有節点で結合していた. 一方, メゾスケールモデルはボス・ライナーとCFRP層は共有節点で結合しているが, メゾ構造のため剛性の高い繊維束は剛性の低いマトリクス樹脂を介して結合している. 実容器はボス・ライナーとCFRP層とは完全には接着(結合)しておらず, 熱硬化製造時のライナー収縮により間隙ができる. これらから, ボス・ライナーとCFRP層は剛性の低い状態での結合または接触しているとの仮説をたて, 軸対称モデルのボス・ライナーとCFRP層の間に樹脂層を追加または摩擦/間隙の接触領域を設けることで高精度化を図る.



軸対称モデルにおけるボス・ライナーとCFRP間の結合状態の改良

ボス近傍の繊維束折り返し部は実容器やメゾスケールモデルでは何層にも繊維束が重なる. 従来の軸対称モデルは重なりを考慮しない単純な積層形状になっていたが, 本開発では上記の接触状態の改良に合わせ, より実容器の積層状態に近い凸形状でモデル化する. そのうえで, 口金や金属ボス, 樹脂ライナーの剛性・強度も含めた容器全体での剛性・強度解析を行う.



軸対称モデル ボス部近傍の繊維束折り返し部の改良

## ②「構成式の検証」

ヘリカル層のメゾスケール状況を代表させる試験体を用いた破壊試験により、構成則の妥当性を検証する。

### ②-1 ヘリカル巻き円筒胴試験体の内圧破裂試験

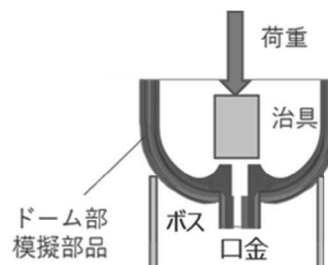
プラスチック製円筒にヘリカル巻きを施し、内圧により破裂試験を実施する。「クリンプ部のひずみ増加量」「繊維束の回転移動量」をひずみゲージ、光ファイバーまたは画像相関法により計測し、構成則を導入した解析と照合する。

### ②-2 ドーム・口金部試験体の曲げ破壊試験

ボスを含むドーム部ヘリカル巻き試験体を製造し、ボス押し込みによる破壊試験を実施する。ボス近傍のひずみをひずみゲージ/光ファイバーで計測し「ボス／炭素繊維束の接触状態」について接触状態を導入した解析と照合する。



円筒胴試験体 内圧破裂試験



ドーム・口金部試験体 曲げ破壊試験

## ③「機械学習による最適設計」

分割製造によって可能となる繊維束の交差のクリンプ解消や繊維束の配置経路の任意性および繊維束片の局所配置などの設計パラメータの拡張を行い、機械学習による最適設計を試みる。設計パラメータ拡張により、一体容器における最適積層に対し分割容器の最適積層は全く異なる積層パターンになる可能性が高い。

### ③-1 分割成形により拡張された設計パラメータの軸対称モデルへの導入

拡張された設計パラメータのパラメトリック表記方法の検討と、繊維束のメゾスケールパラメータ表記方法の検討を行う。従来の軸対称モデルはフープ層、ヘリカル層、ハイアングルヘリカル層といったフィラメントワインディング工法で成形可能なCFRP積層のみを考慮していた。分割成形による、クリンプの無いヘリカル層、チョップド繊維の成形工法で可能な疑似ランダム配向またはある一定方向に繊維配向

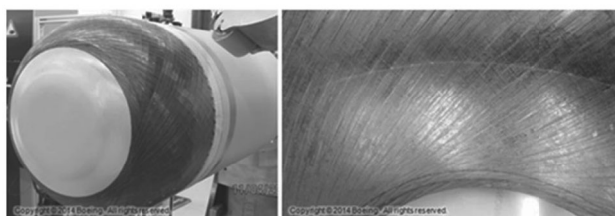
する層，口金部のみ重点的に配置した層などを表現するために必要な追加メゾスケールパラメータを設定し，分割容器を高精度に再現する軸対称モデル化の方法を検討する。

### ③-2 軸対称モデルの要素ごとの構成則決定

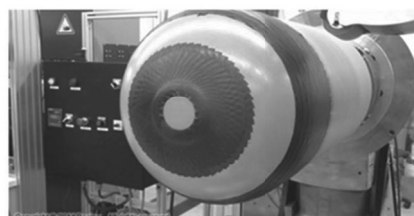
新たに導入されたメゾスケールパラメータにより，要素ごとの構成則の変化を検討する。メゾスケールパラメータが拡張されたことに伴い，本研究で導入した構成則が成立するかを検証し，必要に応じて修正を加える。

### ③-3 機械学習による最適容器の探索

「機械学習を用いた高圧水素容器最適設計プロジェクト(2021-2022)」で得られた，機械学習を用いた軸対称モデルの設計パラメータからCFRP使用量最小となる最適容器の探索アルゴリズムを活用する。分割容器の学習が行えるように入出力関係を改良し，分割容器における高精度軸対称モデルでの最適容器の探索を行う。



交差によるクリンプを回避した任意方向の繊維束配置



繊維束片の局所配置による金属ボスとの連結強化

## (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」「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」(以下，HPC 産業応用拡大プロジェクト)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「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)，および，令和 4 年度まで実施された文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムの 1 課題である「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」(以下，「富岳」流体予測革新プロジェクト)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が実施されたものである。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、および、HPC 産業応用拡大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、これらの機関との連携体制をさらに強化し、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、「富岳」の通信性能を向上させることを目的として、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。その結果、「富岳」の 192 ノード・384 プロセスの並列計算において、通信時間を 24.0 %短縮し、通信時間を含めた計算時間を 5.4 %短縮した。さらに、最適化アルゴリズムの改良によって、192 ノード、768 プロセス間の通信ランクマップの作成時間を 70 時間から 6.36 秒に大幅に短縮した。

### (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。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 5 年度現在 15 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」東京大学出版会(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」東京大学出版会(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。今年度は昨年度同様対面講義で行い、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。

なお、加藤千幸教授、居駒幹夫非常勤講師は今年度で退任され、非常勤講師は来年度交代する。

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.
- ・ 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.25, No.5, 2023 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』『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』第 1 回 HPC 産業応用拡大プロジェクトシンポジウム

文部科学省『『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』(略称「HPC 産業応用拡大プロジェクト」)では, 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の実証, 研究成果の幅広いものづくり分野への展開, 次世代の計算基盤となる解析アルゴリズムの開発を進めている。

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を狙いとし, 本プロジェクトの最新の成果を報告し, それを踏まえて, HPC と AI 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。次世代の計算基盤技術の, 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 6 年 3 月 21 日(木)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: 251 名(オンサイト参加 46 名)

資料作成: 予稿集 141 頁

###### ○プログラム

(司会: 飯田明由 豊橋技術科学大学大学院工学研究科 教授)

10:00-10:05 開会の挨拶

国分 政秀 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

10:05-10:30 全体概要

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授

## I. 基盤技術の研究開発

10:30-11:10 (研究テーマ①)AIを活用した実機スケール乱流の予測モデルの開発

飯田 耕一郎 三菱重工業株式会社総合研究所 主席研究員

長谷川 洋介 東京大学生産技術研究所 教授

11:10-11:50 (研究テーマ②)スマート in-situ 可視化基盤の構築

坂本 尚久 神戸大学大学院システム情報学研究科 准教授

田部井 亮 富士通株式会社先端技術開発本部先端ソフト実証部 部長

## II. 基盤技術を活用した実証研究

(司会:長谷川洋介 東京大学生産技術研究所 教授)

12:50-13:30 (研究テーマ③)実船の推進性能の予測

西川 達雄 一般財団法人日本造船技術センター技術開発部 課長

バダロッティ ティモテオ

株式会社 MTI シミュレーションチーム ユニット長

13:30-14:10 (研究テーマ④)自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立

飯田 明由 豊橋技術科学大学大学院工学研究科 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

川俣 英之 日産自動車株式会社カスタマーパフォーマンス&第二車両実験部

主担

14:10-14:50 (研究テーマ⑤)ヒートポンプ用ファンの性能向上

鈴木 康方 日本大学理工学部 教授

金子 公寿 富士電機株式会社 技術開発本部 デジタルイノベーション研究所

主席

14:50-15:15 (研究テーマ⑥)次世代計算基盤の構築

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授

黒田 明義 理化学研究所計算科学研究センター運用技術部門 技師

## III. パネルディスカッション

(司会:鈴木康方 日本大学理工学部 教授)

15:25-16:55 「AIを利用したものづくりと今後の展開」

モデレータ 長谷川 洋介 東京大学生産技術研究所 教授

パネリスト 加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授

坂本 尚久 神戸大学大学院システム情報学研究科 准教授

西川 達雄 一般財団法人日本造船技術センター 課長

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

16:55-17:00 閉会の挨拶

加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授/研究開発課題責任者

### 第 39 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 ―流れの物理シミュレーション・データ駆動型モデリングの革新と実践―」

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 39 回目となり、「乱流シミュレーションと流れの設計 ―流れの物理シミュレーション・データ駆動型モデリングの革新と実践―」というテーマに関する 9 件の講演を行った。

開催日: 令和 6 年 3 月 11 日(月) 9:30-17:25

場 所: 生産技術研究所 An 棟 2 階コンベンションホール, 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

9:30-9:35 開会の挨拶 大岡 龍三(東京大学)

#### 【基調講演】

9:35-10:25 「LES の現状と今後の展望 〜40 年余りの開発と応用の経験から〜」

加藤 千幸(東京大学)

#### 【一般講演】

##### セッション 1 司会:北澤大輔(東京大学)

10:30-10:55 SGS 応力輸送方程式による LES モデリング

松山 新吾(宇宙航空研究開発機構)

10:55-11:20 周期境界条件を課した単純都市キャノピ周辺気流場の数値流体解析における運動量供給機構による乱流性状への影響

真光 俊樹, 池谷 直樹(九州大学)

11:20-11:45 Numerical prediction of pollutant dispersion within building arrays: Investigating the influence of k-ε model modifications for reproducing periodic large-scale fluctuations in URANS Simulation

Xinyi LI, Tsubasa OKAZE(東京工業大学)

11:45-12:10 Measuring instantaneous and accumulated ventilation rates in single-ventilation scenario of a cubic building using 3D PIV

王 偉(九州大学), 廣瀬 智陽子(福岡県保健環境研究所), 池谷 直樹(九州大学)

##### セッション 2 司会:半場藤弘(東京大学)

13:20-13:45 Volume 型画像データより直接駆動される流れシミュレーションの試み

大島 伸行(北海道大学)

- 13:45-14:10 Comparing artificial neural network models with statistical methods for estimating low-occurrence wind speed at pedestrian levels of simplified arrays  
Yezhan LI, Wei WANG, Naoki Ikegaya (九州大学)
- 14:10-14:35 Extension and analysis of high-resolution wind velocity data by fusing meteorological observations and local objective analysis data in the Tokyo Bay area using POD-LSE  
Xiang WANG, Hideki Kikumoto, Chaoyi HU, Hongyuan Jia (東京大学),  
Keisuke Nakao (電力中央研究所), Ryoza Ooka (東京大学)
- 14:35-15:00 気象予測情報の都市街路スケールへの3次元深層超解像  
小野寺 孔明, 安田 勇輝, 大西 領 (東京工業大学)
- セッション3 司会:長谷川洋介(東京大学)
- 15:15-15:40 シミュレーテッドアニーリング／量子アニーリングを用いた流れの計算  
高木 謙一郎, 千田 晃, 守矢 直樹, 青木 汐里, 遠藤 克浩, 村松 眞由, 深淵 康二 (慶應大学)
- 15:40-16:05 パーセル近似を導入した格子-粒子カップリングを用いた雨水条件下でのSLD着氷シミュレーション  
兼次 正隆, 阿部 優輝, 福留 功二, 藤村 宗一郎, 山本 誠 (東京理科大学)
- 16:05-16:30 ゼブラフィッシュ胚における血管リモデリング前後の血行動態の3次元数値解析  
奥須賀 康佑, 塚原 隆裕 (東京理科大学), 長谷川 洋介 (東京大学)
- 16:30-16:55 U-LSTMを用いた粘弾性乱流の構成応力予測  
中島 英哲, 塚原 隆裕 (東京理科大学)
- 16:55-17:20 機械学習を用いた壁乱流最適制御におけるコスト関数の自動探索  
弓削田 悠介, 長谷川 洋介 (東京大学)
- 17:20-17:25 閉会の挨拶 菊本 英紀 (東京大学)

## b) ワークショップ

### 第7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7回は、これまで「富岳」を利用して得た成果を概観し、ポスト「富岳」時代を見据えた、最新鋭のスーパーコンピュータにおけるものづくりシミュレーション技術について展望することを目的として開催した。

開催日: 令和5年12月5日(火)10:00-17:00

場所: 東京大学生産技術研究所 大会議室, 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  
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  
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「航空機デジタルフライトが拓く体開発 DX に向けた実証研究」プロジェクト
- 協 力： スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
- 参加者数： 132 名(オンライン参加者 26 名含む)
- 資料作成：「富岳」成果創出加速プログラム課題の最新状況セッション予稿集 60 頁，  
「富岳」等の利用成果セッション予稿集 52 頁，  
ポスト「富岳」時代を見据えた HPC 技術とその産業応用への期待セッション予稿集 44 頁

#### ○プログラム

##### ●「富岳」成果創出加速プログラム課題の最新状況

(司会 鈴木康方 日本大学理工学部 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 教授
- 10:05-10:35 洋上風力発電への富岳シミュレーションの貢献  
吉村 忍 東京大学大学院工学系研究科 教授
- 10:35-11:05 Society 5.0 時代のスマートデザインプロジェクトの概要について  
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
- 11:05-11:35 「富岳」航空機プロジェクト:高忠実な圧縮性流体解析基盤アプリ FFVHC-ACE の今後の展開と最新状況  
河合 宗司 東北大学大学院工学研究科 教授
- 11:35-12:05 ものづくり分野における HPC シミュレーションの応用 ～現状と今後の展望～  
加藤 千幸 東京大学生産技術研究所 教授

##### ●「富岳」等の利用成果

(司会 飯田明由 豊橋技術科学大学大学院工学研究科 教授)

- 13:00-13:25 スーパーコンピューターを活用した次世代タイヤ材料の開発  
角田 昌也 住友ゴム工業株式会社研究開発本部 研究第一部長
- 13:25-13:50 性能・騒音を目的変数とするボックスファン多目的最適化計算結果の分析  
山出 吉伸 みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社  
サイエンスソリューション部 課長
- 13:50-14:15 乱流微粒化モデルを統合した大規模 LES による航空用エンジン燃焼器性能の推定  
渡邊 裕章 九州大学大学院総合理工学研究院 教授

14:15-14:40 流体—構造物連成解析による長大斜張橋の耐風性評価

杉山 裕樹 阪神高速道路株式会社

(一般財団法人阪神高速先進技術研究所調査研究部

橋梁・構造研究室長 上席研究員(出向中))

●ポスト「富岳」時代を見据えた HPC 技術とその産業応用への期待

(司会 高木亮治 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 准教授)

14:50-15:15 HPC+AI/デジタルツインが実現するものづくり HPC 分野の実例と未来像, システムアーキテクチャについて

Ian Karlin NVIDIA Corporation, Principal Engineer

永田 聡美 エヌビディア合同会社 エンタープライズ事業部

15:15-15:40 次世代計算基盤に係る調査研究事業の検討状況について

佐野 健太郎 理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー

15:40-16:05 富岳における非構造格子アプリケーションの通信最適化

中村 宜文 理化学研究所計算科学研究センター運用技術部門 技師

16:05-16:30 深層学習を用いたシミュレーション結果を予測する代理モデル開発の取り組み

下川辺 隆史 東京大学情報基盤センター 准教授

16:30-16:55 次世代熱流体システム設計のための伝熱面形状最適化

亀谷 幸憲 明治大学理工学部機械情報工学科 専任講師

16:55-17:00 閉会の挨拶

河合 宗司 東北大学大学院工学研究科 教授

## ワークショップ:力学の未来

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。特に、近年注目を集めている機械学習技術や量子コンピュータの活用は、力学シミュレーションにも大きな変革をもたらしつつある。

そこで、流体力学、土木・建築工学、材料強度、マテリアル等の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ことを目的として、ワークショップシリーズを企画した。

### 第1回ワークショップ:力学の未来(材料強度分野)

開催日: 令和5年10月4日(水) 15:00-17:00

場 所: 東京大学生産技術研究所 食堂コマニ, 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: 73名(オンサイト参加 14名)

○プログラム

(司会 梅野宜崇 東京大学生産技術研究所 教授)

- 15:00-15:45 材料力学特性解析にむけた機械学習ポテンシャルの開発と適用  
森 英喜 産業技術短期大学機械工学科 准教授
- 15:45-16:30 ナノ・マイクロ疲労問題に対するマルチスケールモデリングの取組み  
梅野 宜崇 東京大学生産技術研究所 教授
- 16:30-17:00 総合討論

第2回ワークショップ:力学の未来(マテリアル分野:生成 AI と知財)

開催日: 令和5年11月8日(水)15:00-17:15

場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室1(An401/402), 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: 98名(オンサイト参加 15名)

○プログラム

(司会 溝口照康 東京大学生産技術研究所 教授)

- 15:00-16:00 材料研究を加速するための生成 AI・大規模言語モデルの活用検討  
畠山 欽 東京工業大学物質理工学院材料系 助教
- 16:15-17:15 AI 関連発明の現状  
菅野 智子 東京大学生産技術研究所 教授

第3回ワークショップ:力学の未来(流体力学分野)

開催日: 令和5年12月21日(木)15:00-17:00

場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室1(An401/402), 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: 148名(オンサイト参加 15名)

○プログラム

(司会 長谷川洋介 東京大学生産技術研究所 教授)

- 15:00-15:45 流体力学はどこに向かうのか  
長谷川 洋介 東京大学生産技術研究所 教授
- 15:45-16:30 データ駆動型乱流研究のこれから ～力学・安定性の観点から～  
犬伏 正信 東京理科大学理学部第一部応用数学科 准教授
- 16:30-17:00 総合討論

第4回ワークショップ:力学の未来(量子化学分野:量子コンピューティング)

開催日: 令和6年3月5日(火)15:00-17:00

場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室1(An401/402), 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: 98 名(オンライン参加 20 名)

○プログラム

(司会 佐藤文俊 東京大学生産技術研究所 教授)

|             |                                                          |
|-------------|----------------------------------------------------------|
| 15:00-15:05 | はじめに<br>佐藤 文俊 東京大学生産技術研究所 教授                             |
| 15:05-15:50 | 量子位相推定:量子世界の自然法則を活用した量子化学計算法<br>杉崎 研司 慶應義塾大学理工学研究科 特任准教授 |
| 15:50-16:35 | 化学反応シミュレータの研究開発と将来展望<br>高橋 英男 東京大学大学院工学系研究科 博士後期課程 1 年   |
| 16:35-17:00 | 総合討論                                                     |

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 74 回 LES 研究会

開催日: 令和 5 年 5 月 9 日(火)14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「格子ボルツマン法とアクチュエーターラインモデルによる風車後流の LES 解析」

渡辺 勢也 九州大学

第 75 回 LES 研究会

開催日: 令和 5 年 7 月 14 日(金)14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「円管の急回転および急停止による円管内乱流の DNS」

岡本 正芳 静岡大学

第 76 回 LES 研究会

開催日: 令和 5 年 9 月 12 日(火)14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「機械学習による LES のための乱流モデリング:SGS 応力モデルと壁面モデルの開発」

服部 裕司 東北大学



第 77 回 LES 研究会

開催日: 令和 5 年 11 月 10 日(金)14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「都市空気環境における発生源同定:LES による随伴濃度解析とセンサ配置の最適化」

賈 鴻源 東京大学生産技術研究所

第 78 回 LES 研究会

開催日: 令和 6 年 1 月 9 日(火)14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「ファサード形状を再現した実建物モデルの広範囲・高解像度 LES による風圧力推定」

河合 英徳 お茶の水女子大学

d) セミナー・講習会

第 18 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 16 回目の基礎編の利用講習会を開催した.

開催日: 令和 5 年 8 月 24 日(木)13:00-17:00

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: 9 名

実践的ものづくりシミュレーショントレーニングコース「機械学習を利用した高圧水素容器の最適設計」

開催日: 令和 5 年 10 月 3 日(火)13:30~4 日(水)12:00

場 所: 東京大学生産技術研究所 大セミナー室および吉川研究室

主 催: 東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター, 株式会社 SUPWAT

参加者数: 8 名

e) 共催・後援・その他

水素社会の実現に不可欠な高圧水素タンク開発にイノベーションをもたらす機械学習技術

開催日: 令和 5 年 7 月 21 日(金)17:00~18:30

場 所: オフライン(東京大学生産技術研究所 大会議室)とオンライン(Zoom)によるハイブリッド開催

共 催: 株式会社 SUPWAT

#### NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2023

開催日： 令和 5 年 12 月 6 日(水) 13:30~15:55

場 所： オンサイト(学術総合センター(竹橋)2F 一橋大学 一橋講堂 中会議場 3,4)と  
オンライン(Zoom)によるハイブリッド開催

主 催： 国立研究開発法人物質・材料研究機構 ナノアーキテクトニクス材料研究センター,  
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,  
株式会社アスムス

#### 第 16 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 5 年 12 月 8 日(金) 13:00~17:30

場 所： Webinar 方式によるオンライン開催

主 催： スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

#### スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー2023

開催日： 令和 5 年 12 月 15 日(金) 13:00~17:30

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

#### 第 7 回 CAE ワークショップ～CAE シミュレーションの今と広がる支援サービス～

開催日： 令和 6 年 3 月 8 日(金) 13:00~17:30

場 所： オンサイト(会場:秋葉原 UDX NEXT-2)とオンライン(Zoom)によるハイブリッド開催

主 催： 一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)

#### ABINIT-MP 講習会

開催日： 令和 6 年 3 月 14 日(木) 13:00~17:20

場 所： 一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)東京事務所

主 催： 一般財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)

## 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 2023

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、これまでのアプリケーションの開発状況および最新の成果等の展示紹介を行った。

開催日： 令和 5 年 9 月 7 日(木)～8 日(金)

場 所： 神戸国際展示場 1 号館

## 第 10 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 5 年 10 月 25 日(水)・26 日(木)

場 所： 現地会場(THE GRAND HALL)およびオンライン(Slack, Zoom)によるハイブリッド開催

## SC23

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 5 年 11 月 13 日(月)～16 日(木)

場 所： 米国コロラド州デンバー Colorado Convention Center

## 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 5 年度は Vol. 37, Vol. 38 を発行した。

### (1) Vol. 37

発 行 日： 令和 5 年 6 月

発行部数： 650 部

内容： 1 面 巻頭言「令和 5 年 4 月に第 4 期革新的シミュレーション研究センターに改組」  
2 面 第 4 期革新的シミュレーション研究センターの紹介  
3 面 第 4 期革新的シミュレーション研究センターの主要事業  
4-7 面 センター所属新メンバー研究紹介  
8 面 第 3 回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウム, および, シンポジウム: 力学の未来の開催報告

### (2) Vol. 38

発 行 日： 令和 6 年 1 月

発行部数： 600 部

内容： 1 面 巻頭言「将来のシミュレーション技術を議論」  
2 面 ワークショップ: 力学の未来開催報告  
3 面 第 7 回 HPC ものづくり統合ワークショップ開催報告  
4-5 面 センター所属メンバー研究紹介  
6 面 セミナー「水素社会の実現に不可欠な高圧水素タンク開発にイノベーションをもたらす機械学習技術」, および, 実践的ものづくりシミュレーショントレーニングコース「機械学習を利用した高圧水素容器の最適設計」の開催報告  
国際フロンティア産業メッセ 2023, および, 国際会議 SC23 の出展報告



## 4. 各研究室の活動実績

### 吉川暢宏研究室 マルチスケール固体力学

グリーントランスフォーメーション(GX)を推進するための主要なエネルギー媒体は水素である。水素はエネルギー密度が低いいため高圧あるいは液化により運搬効率を向上させる必要がある。必然的に容器に対する負荷は高くなり、軽量化の要求と相まって高度な信頼性評価が必要となる。GXの牽引役と目されている燃料電池自動車においては、水素タンクの軽量化と低コスト化が必須の課題である。液化水素の活用も視野に入れた開発が進められてはいるが、現状では70 MPaの超高圧で水素を圧縮し搭載する炭素繊維強化プラスチック(Carbon Fiber Reinforced Plastic, CFRP)製高圧水素タンクの搭載が現実的である。合理的判断により設計を高度化するためのシミュレーション技術が求められているが、CFRP材料の非均質性およびフィラメントワインディングによる製法により発生す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材料の強度信頼性評価手法を、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) Hongzhou Zhai, Qi Wu, Tengfei Bai, Nobuhiro Yoshikawa, Ke Xiong and Changhao Chen: Multi-scale finite element simulation of the thermoforming of a woven fabric glass fiber/polyetherimide thermoplastic composite, June 2023, Journal of Composite Materials, Vol. 57 (18), pp.2933-2954. DOI: 10.1177/00219983231178901
- 2) Yoshihiko Hangai, Yuta Yamamoto, Yu Goto, Kenji Okada and Nobuhiro Yoshikawa: Friction Welding of Polycarbonate Plate and Aluminum Foam Fabricated by Precursor Foaming Process, July 2023, Metals, 13, No. 1366. <https://doi.org/10.3390/met13081366>
- 3) Sang-Won Kim, Nobuhiro Yoshikawa: Numerical Fatigue Life Evaluation with Experimental Results for Type III Accumulators, October 2023, ASME Journal of Pressure Vessel Technology, Vol. 145. 051506, doi:10.1115/1.4063042
- 4) Yoshihiko Hangai, Reiji Yamazaki, Takaaki Suzuki and Nobuhiro Yoshikawa: Fabrication of Composite Material by Directly Printing Resin on Aluminum Foam by 3D Printer, March 2024, Materials, 17, 1124. <https://doi.org/10.3390/ma17051124>

### 和文論文

- 1) 秋田幸仁, 吉川暢宏: 一方向強化熱可塑性炭素繊維強化プラスチック試験片の樹脂部塑性ひずみ範囲による疲労寿命予測, 2023年6月, 日本複合材料学会誌, 第49巻, 第3号, pp.82-90.
- 2) 竹本真一郎, 吉川暢宏: Type 4水素タンクの極限軽量設計のための樹脂強度モデルの高度化, 2023年11月, 日本機械学会論文集, Vol.89, No.927, p.23-00224. [DOI: 10.1299/transjsme. 23-00224]
- 3) 森田直樹, 今井洋輔, 吉川暢宏: 短繊維CFRPの不確定性を考慮したマクロスケール強度モデリングに関する検討, 2023年12月, 日本複合材料学会誌, 第49巻, 第6号, pp.191-198.
- 4) 竹本真一郎, 吉川暢宏, 横山卓矢: 機械学習を用いた樹脂ライナー複合高圧水素容器の最適設計仕様探索, 2024年2月, 圧力技術, 第62巻, 第1号, pp.28-36.
- 5) 秋田幸仁, 吉川暢宏, 梶原優介: テラヘルツ透過測定による熱可塑性樹脂の分子配向と疲労破壊メカニズムの相関に関する一考察, 2024年3月, 成形加工, 第36巻, 第3号, pp.128-134.
- 6) 高木樹, 半谷禎彦, 吉川暢宏: A1050ポアラスアルミニウムの圧縮および摩擦攪拌プロセスによる緻密化と残存発泡剤を用いた繰り返し発泡, 2024年3月, 軽金属, 第74巻, 第2号, pp. 131-133. <https://doi.org/10.2464/jilm.74.131>

### 学会講演論文

- 1) 秋田幸仁, 吉川暢宏: 樹脂部の材料非線形性を考慮した熱可塑性CFRP試験片の疲労寿命予測,

2023年9月, 複合材料学会, 第48回複合材料シンポジウム予稿集, pp.88-89.

- 2) 森瑛一朗, 松田哲也, 辻川千晴, 小坂井峻, 森田直樹, 北條正弘, 吉川暢宏: CFRP ファンブレードのダブテール接続部に対する非弾性ツースケール解析, 2023年9月, [No.23-15] 日本機械学会M&M2023 材料力学カンファレンス, 論文No. CL0109.
- 3) 山本雄太, 半谷禎彦, 吉川暢宏, 小倉卓哉, 森貞好昭, 藤井英俊: ADC12ポーラスアルミニウムと熱可塑性樹脂の摩擦圧接時における樹脂の含浸挙動のX線透過観察, 2023年10月, 日本鑄造工学会第182回全国講演大会講演概要集, p.33.
- 4) 小泉草太, 半谷禎彦, 吉川暢宏: ADC12ポーラスアルミニウムコア/PCTAからなるサンドイッチ材の作製, 2023年10月, 日本鑄造工学会第182回全国講演大会講演概要集, p.34.
- 5) 富田雄, 半谷禎彦, 西田進一, 鈴木良祐, 吉川暢宏: ポーラスアルミニウム作製時における摩擦攪拌接合の溶湯直接圧延を用いた簡便化方法, 2023年10月, 日本鑄造工学会第182回全国講演大会講演概要集, p.35.
- 6) 山崎玲士, 半谷禎彦, 吉川暢宏: シート加熱しているADC12ポーラスアルミニウムに対する3Dプリンターを用いた樹脂の直接印刷接合, 2023年10月, 日本鑄造工学会第182回全国講演大会講演概要集, p.36.
- 7) 兼子結斗, 半谷禎彦, 吉川暢宏: ポーラスアルミニウムの連続的な発泡とプレス成形方法の検討, 2023年10月, 日本鑄造工学会第182回全国講演大会講演概要集, p.37.
- 8) 石内健太郎, 半谷禎彦, 天谷賢児, 吉川暢宏, 小倉卓哉, 森貞好昭, 藤井英俊: ローラー成形時におけるADC12製ポーラスアルミニウムの気孔挙動のその場観察, 2023年10月, 日本鑄造工学会第182回全国講演大会講演概要集, p.38.
- 9) 林郁孝, 東條千太, 小林紘, 吉川暢宏: 部分充填によるタイプ3蓄圧器の圧力サイクル寿命延長, 2023年10月, 第10回構造物の安全性・信頼性に関する国内シンポジウム, JCROSSAR2023講演論文集, OS7-7C.
- 10) 竹本真一郎, 吉川暢宏, 横山卓矢: 機械学習を用いたType 4容器の最適設計探索, 2023年11月, 令和5年度 秋季講演会概要集, 日本高圧力技術協会, pp.87-97.
- 11) 山崎玲士, 半谷禎彦, 吉川暢宏: ポーラスアルミニウムに対する3Dプリンターを用いた樹脂の直接印刷接合による複合材料の作製と圧縮性能の評価, 2023年11月, 第74回塑性加工連合講演会, pp.135-136.
- 12) 高木樹, 半谷禎彦, 西田進一, 吉川暢宏: ポーラスアルミニウムの再発泡化および発泡条件の検討, 2023年11月, 第74回塑性加工連合講演会, pp.139-140.
- 13) 鈴木巽, 半谷禎彦, 後藤悠, 天谷賢児, 吉川暢宏: ポーラスアルミニウムへのロボットアームを用いたプレス金型による波形形状付与, 2023年11月, 第74回塑性加工連合講演会, pp.141-142.
- 14) 長竹真吾, 半谷禎彦, 吉川暢宏: A6061とA1050ポーラスアルミニウムの加熱発泡直後のローラー成形による接合, 2023年11月, 軽金属学会第145回秋期大会, pp.257-258.
- 15) 石貝拓磨, 半谷禎彦, 吉川暢宏: ADC12-SS400の突き合わせ接合体のガス欠陥を利用したポーラス化による分離の検討, 2023年11月, 軽金属学会第145回秋期大会, pp.259-260.

- 16) 高木樹, 半谷禎彦, 石貝拓磨, 西田進一, 吉川暢宏: ポーラス化によるA1050アルミニウム/SS400鋼接合体の分離および再発泡化, 2023年11月, 軽金属学会第145回秋期大会, pp. 305-306.
- 17) 山本雄太, 半谷禎彦, 岡田賢二, 後藤悠, 田中宏行, 吉川暢宏: 摩擦圧接による発泡アルミニウムと熱可塑性樹脂の異種材料接合, 2023年11月, 軽金属学会第145回秋期大会, pp. 311-312.
- 18) 鈴木巽, 半谷禎彦, 天谷賢児, 吉川暢宏: 発泡直後の形状付与によるADC12とA6061からなる複合ポーラスアルミニウムの作製, 2023年11月, 軽金属学会第145回秋期大会, pp. 353-354.

## (2) 研究プロジェクト

### 民間等との共同研究

- 1) CFRP 大型極低温推進薬タンク製造技術の研究
- 2) 炭素繊維強化熱可塑プラスチック製 LNG 配管と金属部材接合界面の形状最適化に関する研究
- 3) ミクロ応力解析に基づくブーミ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

### 受託研究

#### ① 公的資金

- 1) (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」
- 2) (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／分割製造TYPE4 高圧水素容器の最適設計のためのメゾ・マクロツースケール解析に基づくボス・ドーム部強度高精度予測軸対称有限要素モデルの開発と実証」



## 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・破壊挙動に及ぼす分子量分散度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。本年度は、これまで行った分子構造(絡み合い点数・分子の回転半径)が及ぼす機械的挙動への影響の検討に加え、分子量分散度(重量平均分子量と数平均分子量の比であり、異なる分子鎖長のポリマーが混在する割合を示す)が及ぼす効果も含めて検証した。降伏後のひずみ硬化挙動には回転半径の影響が強く分子量分散度はあまり効かない一方で、最大応力には回転半径と分散度の両方が影響することを明らかにした。

### (2) ナノロッドにおける結晶すべり挙動の分子動力学解析

金属材料の塑性変形や破壊には転位の発生・運動に伴う結晶すべり挙動が深く関与しているが、ナノ構造体ではその挙動はマクロ材と大きく異なることが指摘されている。ナノ材料では表面の影響を強く受けることがその主要因の一つと言われているが、その詳細は十分に明らかになっていない。我々はCu, Al, Auなどの典型的な金属材料を対象にナノロッドモデルの引張りおよび繰返し荷重負荷の分子動力学解析を実施し、引張負荷、(引張/圧縮)繰返し負荷によるすべり挙動を精査した。引張負荷による表面からの転位発生については、転位発生時の臨界分解せん断応力を定量的に評価したところ、シュミット因子・すべり面に対する垂直応力の影響に加え、特定の表面ステップが存在する場合には臨界分解せん断応力が大きく変化する可能性があることが分かった。また、繰返し負荷を与えた場合、部分転位同士の相互作用により空孔列が生成され、それが新たな転位発生源となるという、ナノ材料に特有な転位減発現機構が明らかとなった。

### (3) 機械学習を援用した統合マルチスケール法構築とナノ・マイクロ疲労現象の解明

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きた。本年度は、転位相互作用の下での組織形成過程を記述する反応拡散方程式に基づく二次元 WA モデル解析を行い、不動転位・可動転位の拡散係数が異方性を持つ場合の転位パターン形成について検討した。実験により観察される、疲労に特徴的な PSB (固執すべり帯) 構造を形成する WA モデルパラメータが帰納的に探索可能であることを示した。

## (1) 研究成果一覧

### 欧文論文

- 1) Hiroyuki Shima, Yoshitaka Umeno and Takashi Sumigawa: Spot-Ladder Selection of Dislocation Patterns in Metal Fatigue, May 2023, Symmetry, Vol. 15, 1028.
- 2) Emi Kawai, Atsushi Kubo and Yoshitaka Umeno: Atomistic simulation for initiation of crystal slip deformation from surface of nanoscale copper single-crystal nanowires, June 2023, Computational Materials Science, Vol. 226, 112246.
- 3) Atsushi Kubo, Emi Kawai, Takashi Sumigawa, Hiroyuki Shima and Yoshitaka Umeno: Defect Formation Mechanisms in Metal Nanowire under Cyclic Loading: A Molecular Dynamics Study, August 2023, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol. 31, 065020.
- 4) Tatchaphon Leelaprachakul, Atsushi Kubo and Yoshitaka Umeno: Coarse-grained Molecular Dynamics Simulation on Strain-hardening and Fracture Behaviors of Polycarbonate: Effect of Polydispersity and Spatial Distribution, October 2023, Journal of Polymer Research, Vol. 30, 398.
- 5) Akihiro Tobise, Hiroyuki Shima, Yuri Akiba, Yoshitaka Umeno, Emi Kawai, Atsushi Kubo, Masataka Abe and Takashi Sumigawa: Surface outflow effect on dislocation structures in micrometer-sized metals, December 2023, Extreme Mechanics Letters, Vol. 65, 102094.
- 6) Yoshitaka Umeno, Atsushi Kubo, Yuto Kurata, Daisuke Sakaniwa, Fumiaki N. Ishikawa, and Kenji Yamaguchi: Molecular dynamics study of thermal transport at interface between alumina and epoxy resin, February 2024, AIP Advances, Vol. 14, 025316.

### 和文論文

- 1) 久保淳, 河合江美, 梅野宜崇: 繰り返し荷重を受ける銅ナノワイヤの塑性変形に関する分子動力学法解析: 結晶方位の影響, 2024年2月, 材料, Vol. 73, No.2 pp. 115-120.
- 2) 河合江美, 久保淳, 梅野宜崇: 銅単結晶ナノワイヤにおける転位発生強度の支配因子に関する定量的検討, 2024年2月, 材料, Vol. 73, No.2 pp. 121-128.

### 国際会議アブストラクト

- 1) Yoshitaka Umeno, Emi Kawai and Atsushi Kubo: Machine-learning determination of reaction-diffusion model parameters for dislocation pattern formation, GSEMSE2023 Global Summit and Expo on Materials Science and Engineering, 2023.06.19-20, online.
- 2) Yoshitaka Umeno, Emi Kawai and Atsushi Kubo: Inductive determination of reaction-diffusion model

parameters for dislocation pattern formation using machine-learning: Toward deduction-induction integrated multiscale simulation, THERMEC'2023 International Conference on Processing & Manufacturing of advanced Materials, 2023.07.03-07, Vienna, Austria.

- 3) Shizhe Deng, Atsushi Kubo and Yoshitaka Umeno: Oil film delamination and recovery process on nanostructured surfaces in boundary lubrication: a coarse-grained molecular dynamics study, ITC Fukuoka 2023 9th International Tribology Conference, 2023.09.25-30, Fukuoka International Congress Center, Fukuoka, Japan.
- 4) Emi Kawai, Atsushi Kubo and Yoshitaka Umeno: Atomistic simulation for dislocation emission in gold single-crystal thin film from notch, MRM2023/IUMRS-ICA2023 Grand Meeting, 2023.12.11-16, Kyoto, Japan.
- 5) Atsushi Kubo, Emi Kawai and Yoshitaka Umeno: Stochastic Modeling and Atomistic Simulation of Dislocation Diffusion under Fatigue, MRM2023/IUMRS-ICA2023 Grand Meeting, 2023.12.11-16, Kyoto, Japan.
- 6) Yoshitaka Umeno, Emi Kawai and Atsushi Kubo: Integration of Deduction-Induction Approaches of Multiscale Simulation Models for Dislocation Pattern Formation in Fatigue, MRM2023/IUMRS-ICA2023 Grand Meeting, 2023.12.11-16, Kyoto, Japan.

#### 学会講演論文

- 1) 久保淳, 河合江美, 梅野宜崇: 繰返し負荷を受ける転位の拡散運動に関する確率論的モデルの導出および分子動力学法解析, 2023年5月28日, 第8回マルチスケール材料力学シンポジウム, つくば国際会議場, 講演論文集USB.
- 2) 河合江美, 久保淳, 梅野宜崇: 銅単結晶ナノロッドにおけるすべり発生の支配因子に関する定量的検討, 2023年5月28日, 第8回マルチスケール材料力学シンポジウム, つくば国際会議場, 講演論文集USB.
- 3) 増谷浩一, 大淵真志, 高東智佳子, 福永明, 谷村瞭, 久保淳, 梅野宜崇: 砥粒と基板の接触形態に着目したCMPの分子動力学シミュレーション, 2023年9月13日～15日, 精密工学会2023年度秋季大会, 福岡工業大学, 講演論文集USB.
- 4) 梅野宜崇, Tatchaphon Leelaprachakul, 久保淳, 河合江美: ポリカーボネート分子構造が機械的特性に及ぼす影響に関する粗視化分子動力学解析, 2023年9月27日～29日, M&M2023材料力学カンファレンス, 筑波大学, 講演論文集USB.
- 5) 久保淳, 河合江美, 梅野宜崇: 確率論的モデルと分子動力学法解析による疲労環境下の転位拡散メカニズムの検討, 2023年9月27日～29日, M&M2023材料力学カンファレンス, 筑波大学, 講演論文集USB.
- 6) 河合江美, 久保淳, 梅野宜崇: 切欠きを有する金単結晶での転位生成に関する分子動力学解析, 2023年9月27日～29日, M&M2023材料力学カンファレンス, 筑波大学, 講演論文集USB.
- 7) 久保淳, 河合江美, 梅野宜崇: 金属疲労における転位組織形成メカニズムに関する理論的検討および応力場解析, 2023年10月25日～27日, 第36回計算力学講演会, 豊橋商工会議所, 講演論文

集USB.

- 8) 梅野宜崇, 邓师哲, 久保淳, 河合江美, 境界潤滑状態における油膜生成と剥離の粗視化分子動力学解析, 第36回計算力学講演会, 2023年10月25日～27日, 豊橋商工会議所, 講演論文集USB.
- 9) 河合江美, 久保淳, 梅野宜崇: 分子動力学法による金単結晶での応力集中部からの転位生成シミュレーション, 2023年10月25日～27日, 第36回計算力学講演会, 豊橋商工会議所, 講演論文集USB.
- 10) 谷村瞭, 久保淳, 増谷浩一, 大淵真志, 高東智佳子, 福永明, 梅野宜崇: 化学機械研磨における材料除去メカニズムに関する反応分子動力学解析, 2023年10月25日～27日, 第36回計算力学講演会, 豊橋商工会議所, 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)「ナノ構造体分岐現象のマルチフィジックス: 脆性・延性遷移制御の力学設計」
- 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」

### 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髙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」

## 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ている。また、機械学習などのデータ科学の手法も乱流予測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り、機械学習の入出力変数の設定にも乱流の物理的知見が必要となる。また、実用問題における流体現象には複雑な物理現象を伴う場合が多く、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 モデルを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を行い、二つのモデルを統合した乱流モデルの開発をめざしている。

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、発熱を伴う非一様圧縮乱流の直接数値計算データを用いてエネルギーフラックスの逆勾配現象の機構の考察を行った。

### (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) Nobumitsu Yokoi: Non-equilibrium turbulent transport in convective plumes obtained from closure theory, June 2023, Atmosphere, Vol. 14, No.6, 1013.
- 2) Nobumitsu Yokoi: Unappreciated cross-helicity effects in plasma physics: anti-diffusion effects in dynamo and momentum transport, November 2023, Reviews of Modern Plasma Physics, Vol. 7, 33.
- 3) Fujihiro Hamba: Non-local eddy diffusivity model based on turbulent energy density in scale space, December 2023, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 977, A11.

### 国際会議予稿集

- 1) Nobumitsu Yokoi: Non-equilibrium turbulence effects on plumes, November 2023, Proceedings of AAPPS-DPP 2023: 7th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics, PL-34.
- 2) Nobumitsu Yokoi: Non-equilibrium effects in turbulent convection and dynamos, December 2023, Proceedings of American Geophysical Union Meeting (AGU 2023), NG43A-0707.
- 3) TingTing Fang, Zhuchen Liu, Fujihiro Hamba, Yosuke Hasegawa: Non-local effects on Reynolds shear stress and turbulent heat flux in wall turbulence subject to a streamwise traveling wave of wall blowing and suction, December 2023, Proceedings of 9th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, ASCHT2023-075.
- 4) Nobumitsu Yokoi, Youhei Masada, Tomoya Takiwaki: Effect of coherent fluctuation in stellar convection viewed from non-equilibrium turbulence, January 2024, Progress in Turbulence X, 105 1-6, Springer.

### 著書・訳書

- 1) Nobumitsu Yokoi: Transport in helical fluid turbulence, Helicities in Geophysics, Astrophysics, and Beyond, Geophysical Monograph 283, First Edition. (Eds.) K. Kuzanyan, N. Yokoi, M. K. Georgoulis, and R. Stepanov, pp. 25-50, John Wiley & Sons.

### 学会講演論文

- 1) 半場藤弘: 乱流のスケール空間エネルギー密度と非局所渦拡散率, 2023 年 9 月, 日本物理学会第 78 回年次大会講演概要集, 18pB202-11.
- 2) 中村元紀, 半場藤弘: 乱流レイリー流れにおける熱フラックスの逆勾配拡散, 2023 年 9 月, 日本流体力学会年会 2023 講演論文集, E4-04.

- 3) TingTing Fang, Zhuchen Liu, Fujihiro Hamba, Yosuke Hasegawa : Interpretation of dissimilar momentum and heat transfer based on the non-locality of eddy viscosity and diffusivity in a fully developed channel flow, 2023 年 9 月, 日本流体力学会年会 2023 講演論文集, E1-04.

## (2)研究プロジェクト

### 科研費による研究

- 1) 基盤研究(B)「自己無撞着な乱流モデルを組み込んだ超新星数値計算の実現-中性子星誕生の動力学」
- 2) 基盤研究(C)「非局所渦拡散率を用いた乱流の壁面減衰効果の解明」

## 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・音響解析のための数値計算アルゴリズムやアプリケーションソフトウェアの研究開発、開発したソフトウェアを駆使した、自動車、船舶、ターボ機械等の性能や信頼性の向上を目指した応用研究を実施している。また、複雑な現象の解明や乱流モデルなどの精度検証などを目的とした基礎研究も実施している。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ことを付記する。

### (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ソフトウェアの研究開発

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、文部科学省研究振興局が所管するプロジェクト「『富岳』成果創出加速プログラム」の1つの課題「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」の一環として、FrontFlow/blue (FFB) および FrontFlow/x (FFX) の2つの大規模 Large Eddy Simulation (LES) 解析用アプリケーションソフトウェア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、大規模 LES 計算用アプリケーションソフトウェアである。FFB は計算実行時に自動的に計算メッシュを細分化する機能を具備しており、非圧縮性流体および圧縮性流体の大規模な応用計算が可能である。令和5年度はFFBの産業応用を加速するために、High Performance Computing (HPC) の主流のプラットフォームになりつつある GPGPU へのポーティングを実施するとともに、「富岳」のようなネットワークボロジーにおける並列計算性能を向上させるための研究を実施した。具体的には、本学情報基盤センターおよび NVIDIA 株式会社の協力を得て、FFB を GPGPU A100 へ移植し、GPGPU A100 1 基あたり 257 GFLOPS (理論ピーク性能の 1.32 %), 同 64 基を使用した並列計算において、実効性能 12,963 GFLOPS, 並列化効率 78.8 % を達成した。また、理化学研究所計算科学研究センター運用技術部門の協力を得て、通信経路の輻輳を回避し、通信時間を短縮するために、ランクマップを最適化するアルゴリズムを開発した。96 ノード・384 プロセスの並列計算において、通信時間を 24.0 % 短縮し、全計算時間を 5.4 % 短縮した。さらに、最適化アルゴリズムを改良し、192 ノード、768 プロセスの通信ランクマップの最適化時間を 70 時間から 6.36 秒に大幅に短縮した。

FFX は Lattice Boltzmann 法 (LBM) に基づく LES 計算用アプリケーションソフトウェアであり、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の自動生成が可能である。また、低マッハ数の流れから発生する音の直接計算も可能である。LBM は計算格子あたりのメモリー負荷や 1 時間ステップの演算量が少ないため、FFX によって、数千億格子規模の大規模な実用計算が可能である。FFB の応用範囲を広げると同時に使い勝手を向上させるために、令和5年度は前処理 (キューブの並列配置処理) の大幅な時間短縮、複雑な壁面近傍で計算が発散することを防止するための安定化対策、表面データおよびブロックデータの出力機能の実装と外部可視化ツールとの接続、および、回転系計算機能の実装などを行った。



## (2) 船舶・自動車・ターボ機械などに関する応用研究

### 【船体まわりに発達する乱流境界層の Wall-resolved LES】

FFB を用いて、レイノルズ数  $3.8 \times 10^6$  の船型の抵抗ダブル計算（自由表面を考慮せずに全抵抗を求める計算）を実施したところ、これまで基準としていた、粘性長さスケールで無次元化した格子解像度（壁面垂直方向 2.5, 流れ方向 30, スパン方向 10）を用いた場合、水槽試験結果と比較して、全抵抗係数が 2 % 以上過大評価された。そのため、流れ方向とスパン方向の格子解像度を粘性長さスケールを基準として、それぞれ 20 と 7 に向上させた計算を実施したところ、全抵抗係数は小さくなり、1 % 以内の誤差で水槽試験結果と一致した。水槽試験やそれに対応する数値計算では、船首近傍において境界層が確実に乱流遷移するようにスタッド（スパン方向に多数配置した微小な突起）を設置しているが、本船型はスタッド位置における圧力勾配が順圧力勾配であり、また、レイノルズ数が比較的低いいため、スタッド下流の乱流境界層に遷移の影響が残る。このような場合は、レイノルズ数が高い場合よりも高い格子解像度が必要であることが明らかとなった（一般財団法人日本造船技術センターとの共同研究）。

### 【自動車の空力特性の数値計算】

FFX を用いて、DrivAer モデル（メルセデスと Audi が共同開発したベンチマーク用車両形状）の空力計算を実施し、車両後方の床下形状が空力特性に与える影響の調査した。まず、基礎検証として、チャネル乱流を対象として、衝突モデルが平均速度分布や乱れ速度分布の予測精度に与える影響を調査した結果、衝突モデルは乱れ速度分布の予測には大きな影響を与えないが、壁面近傍の運動量輸送に影響を与え、衝突モデルの違いによって壁面摩擦応力の予測結果に数%の差が生じることを明らかにした。したがって、乱流境界層の摩擦抵抗係数を定量的に予測するためには、衝突モデルの予測精度の検証が必要となる。次いで、ディフューザ切り上げ角度と床下フィンの有無が異なる 4 ケースの空力計算を実施し、床下フィンは車両のサイドから流れが流入することを防止し、ディフューザ性能（静圧回復）を向上させるため、抵抗係数の低減に効果があることを明らかにした。また、ディフューザの切り上げ角度を大きくすると抵抗係数は増大するが、床下の静圧が低下しダウンフォースが増大するため、操縦安定性は改善されることを示した（2023 年度東京大学修士論文）。

### 【遠心ポンプの大規模 LES 計算】

多段遠心ポンプは火力発電所のボイラーへの給水や石油やガスなどの高圧プロセスに多用されており、消費電力は 10 MW 以上になるため、ポンプ効率の向上は工学的に重要な課題である。また、高圧のポンプには大きな軸スラストが作用するため、軸スラストやその時間変動の正確な推定も重要である。軸スラストは、ライナー部とよばれる半径方向に 200  $\mu\text{m}$  以下の隙間を持つ細隙部内の流れや羽根車側室内の流れに大きな影響を受けるため、軸スラストの正確な予測にはこれらの漏れ流れの予測も重要となる。従来、Reynolds-Averaged Navier-Stokes（以下、RANS）による、遠心ポンプ内部流れの予測が行われていたが、RANS は細隙部のような遷移流れの予測には適さず、低流量域において発生する、大規模な渦離れ流れの予測にも限界がある。本研究では FFB を用いて、細隙部内の遷移境界層も含めて境界層内の縦渦を直接計算する、最大約 60 億要素の LES 計算を実施した。その結果、漏れ流量や軸スラストなども含めて、ポンプ性能を十分な精度で予測できることを示した。さらに、漏れ流路内の流れと主流路内の流れの相互作用を分析し、軸スラストが時間変動するメカニズムを明らかにした。

ほか、遠心ポンプ内部流れに関する多くの重要な知見を得られた(2023 年度東京大学学位論文)。

#### 【遠心ブローの大規模 LES 計算】

下水処理施設で使用される曝気用の遠心ブローは同施設の電力消費量の半分近くを消費するため、高効率化が求められている。また、季節や時間帯によって下水量が大きく変動するため、曝気風量、すなわち遠心ブローの流量も大きく変動する。したがって、曝気用の遠心ブローには広い作動流量範囲が求められる。従来研究では遠心ブローの高効率化に必須となる、性能の高精度な予測が実現されてなく、損失発生メカニズムも十分には解明されていなかった。また、作動流量範囲の拡大を制約する、旋回失速の発生メカニズムも詳細にはわかっていなかった。本研究では FFB の圧縮性ソルバーを用いて、要素数 160 億の Wall-resolved LES(境界層中の生成スケールの渦まで直接計算する LES)を遠心ブロー内部流れの予測に適用し、性能予測精度を検証するとともに、高効率化や作動流量範囲の拡大を図るために、内部流れを詳細に分析した。その結果、羽根車に流入する流れの流速分布や乱れ強度を適切に再現すれば、ブローの理論圧力係数は Wall-resolved LES によって実験の誤差範囲で予測でき、また、圧力係数も最大 4 %の誤差で予測できることを示した。また、計算格子の解像度は設計点近傍の性能予測には大きな影響を与えないが、低流量域における旋回失速の発生やディフューザ性能の予測精度に大きな影響を与え、Wall-resolved LES によってこれらが正確に予測できることが確認された。さらに、設計点流量における羽根車内の流れを分析した結果、動翼表面の境界層の摩擦損失が羽根車損失の約 7 割を占め、翼間流路後半の翼先端部に形成される翼端漏れ流れによる損失が次に大きいことを明らかにした。また、低流量域において発生する旋回失速の回転速度および失速セル数の個数も Wall-resolved LES によって定量的に予測できることを示した(2023 年度東京大学学位論文)。

### (3) 現象の解明や計算モデルの高度化を目的とした基礎研究

#### 【均質媒体モデルによるキャビテーション流れの数値解析】

キャビテーションはポンプや水車などの水力機械において、流速が増加することによって圧力が低下し、圧力が飽和蒸気圧以下になると発生する沸騰現象であり、その予測は重要な課題である。従来、キャビテーション流れの予測に広く用いられている均質媒体モデル(キャビテーション流れを気相と液相が均一に分散している一つの流体として扱うモデル)の予測精度は十分ではなく、特に、キャビテーションが成長すると翼の揚力や水力機械の性能が急激に低下するブレイクダウンという現象が正確に予測できなかった。本研究では、最大 24 億要素を用いて翼まわりのキャビテーション流れの大規模な LES 計算を実施し、均質媒体モデル自体の予測精度を検証し、格子解像度を向上させてもブレイクダウン特性は正確に予測できないことを示した。また、キャビテーションが発生している領域を通過する流れにおいて運動エネルギーの欠損が発生することを理論的に示すとともに、運動エネルギー欠損を体積力の付加によって補償するモデル(体積力モデル)を提案した。体積力モデルによって、境界層の影響を排除した、単純化された翼まわりのキャビテーション流れのブレイクダウン特性は定量的に予測でき、また、キャビテーション数が高い場合は、境界層の影響を受ける実際の翼まわりのキャビテーション流れのブレイクダウン特性も正確に予測できることを示した。一方、キャビテーション数が低い場合はキャビテーション流れの非定常性が強くなり、定常な流れを仮定して導出した体積力モデルではブレイクダウン特

性を正確には予測できず、課題が残ることもわかった(2023 年度東京大学学位論文)。

#### 【前方ステップまわりの流れから発生する空力音の直接計算】

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、FFX を用いて、発生する空力音の直接計算を実施し、音の発生メカニズムを調査した。まず、基礎検証として、平板乱流境界層の計算を行い、計算領域と境界条件の設定が境界層の壁面摩擦応力係数の発達に大きな影響を与えることを示した。次に、前方ステップの計算において、緩和時間係数の最小値を適切に設定することによって音波に非物理的な振動が発生することを防止できることを示した。また、ステップの角付近で発生する音波と音源との関係について調査し、流れの加速によって引き延ばされた渦の表面に沿うように強い密度変動が生じることを確認した(2023 年度東京大学修士論文)。

### (1)研究成果一覧

#### 欧文論文

- 1) Yoshihiro Shirasu, Yasumasa Suzuki, Chisachi Kato: Experimental study on aerodynamic sound generated from flow around a forward facing step, April 2023, Journal of Fluid Science and Technology, Vol.18, No.1, 2023, DOI: 10.1299/jfst.2023jfst0020.
- 2) Yuya Miki, Shunya Uda, Yasumasa Suzuki, Chisachi Kato: Effect of sound source predicted by large eddy simulation on aerodynamic sound prediction of a box fan, Journal of Fluids Science and Technology, March 2024, Volume 19, Issue 2, Pages JFST0021, DOI <https://doi.org/10.1299/jfst.2024jfst0021>.

#### 和文論文

- 1) 山下太郎, 加藤千幸, 山出吉伸, 今野彰: 流入風のヨー角変動を受ける車両の非定常空力特性, 自動車技術会論文集2023年 54 巻 5 号 915-920.

#### 国際会議予稿集

- 1) Noriaki Kobayashi, Yasumasa Suzuki, Chisachi Kato: Experimental investigation of aerodynamic sound radiated from flow around an airfoil placed in the turbulent flow generated by active turbulence generator, internoise2023, August 20-23, Chiba, JAPAN, No.1-P-3.

#### 学会講演論文

- 1) Chisachi Kato: The Present Status of Large-scale Industrial Simulations and its Future, IAHR 2023 Asia, The 4th IAHR Asian Working Group Symposium on Hydraulic Machinery and Systems 2023.8.12-16, Kashgar, China. (基調講演・招待講演)
- 2) Chisachi Kato: Industrial Applications of Wall-Resolved Large Eddy Simulations - The Present Status and their Perspectives, AICFM2023: The 17th Asian International Conference on Fluid Machinery (AICFM17), 20-23, October 2023, Zhenjiang, China. (基調講演・招待講演)
- 3) 加藤千幸: 大規模な流体シミュレーションの現状と将来展望, 自動車技術会流体技術部門委員会シンポジウム, 2024 年 3 月, 東京. (基調講演・招待講演)

## (2)研究プロジェクト

### 民間等との共同研究等

- 1) 次世代極低 CD 車に向けたアイテム創出(トヨタ自動車株式会社)
- 2) CFD による船舶性能推定精度向上に関する研究(一般財団法人日本造船技術センター)
- 3) 「富岳」を用いたターボ機械の流体騒音直接解析技術及びデータ抽出手法の開発に関する研究(株式会社日立製作所)
- 4) 流体性能の高精度予測と革新的流体設計分科会(一般社団法人ターボ機械協会)

### 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「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」

## 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) マルチモダリティ医用画像を用いた患者固有な末梢血管の灌流領域の分析

患者固有の血流シミュレーションでは、末梢血管の灌流領域における流量を計算の基盤として定量化することが重要である。この目的を達成するため、SPECT のような灌流画像から、患者の具体的な状況に即した灌流領域を明らかにすることが求められる。

従来の研究が患者個人の差異を見落としがちであったのに対し、本研究は患者固有のデータに基づき、より個別化された血流分布の理解を追求する。患者の MRA および SPECT 画像の情報を統合により、patient-specific な末梢血管ネットワークの灌流領域を把握することに焦点を置いている。

具体的には、医用画像レジストレーション、脳形状レジストレーション、および灌流画像のデータマイニングなどの手法を駆使して、患者ごとの末梢血管の灌流領域を特定する。この研究により、patient-specific な血流シミュレーションの精度向上が期待され、脳灌流のメカニズムを深く理解する新たな可能性が示されており、個別治療における SPECT イメージングの価値をさらに強調している。

### (5) 数学モデルの開発による患者固有な末梢側副血行路の定量評価

虚血性脳卒中の回復に役立つ末梢側副血行路を定量的評価することが重要である。しかし、末梢血管が小さく、個人差があるため、医用画像を用いて定量的に評価することが困難である。また、従来の定量的評価は血管造影のような侵襲的手技を依存する。

そこで、本研究では患者個別データを用いて末梢側副血行路の構成と位置について、確率的な分布を提供することを目指している。まず、確率的サンプリングを用いて、末梢血管のコホートを作成する。その後、最適化アルゴリズムを使用して、計算された末梢流量と測定された SPECT データと一致するように調整され、患者の血流再分布を再現する末梢側副血行路が見出された。これにより、末梢側副血流の定量的評価が可能となり、臨床現場において虚血性脳卒中の回復を支援することが可能になる。

## (1) 研究成果一覧

### 欧文論文

- 1) Akira Wakako, Akiyo Sadato, Motoki Oeda, Saeko Higashiguchi, Motoharu Hayakawa, Marie Oshima, and Yuichi Hirose: Development of a Model for plaque Induction in Rat Carotid Arteries, July 2023,

Asian Journal of Neurosurgery, Vol.18(3), pp. 499-507.

#### 国際会議予稿集

- 1) Nobuhiko Mukai, Takuya Natsume, Masamichi Oishi, Marie Oshima: Analysis of Wettability Model Using Adhesion and Spreading Works, (2023), In Proceedings of the 18th International Joint Conference on Computer Vision, Imaging and Computer Graphics Theory and Applications (VISIGRAPP 2023) - Volume 1: GRAPP; ISBN 978-989-758-634-7, SciTePress, pages 230-236.

#### 国際会議アブストラクト

- 1) Marie, Oshima: Investigation of the effects of Revascularization Surgery on Cerebral Circulation by Uncertainty Quantification based on a Machine Learning Technique, 2023.6.27-7.1, The 8th CIJK International Conference on Mathematical and Theoretical Biology, Jeju-si, Jeju-do, Republic of Korea.
- 2) Zixuan Zhao, Yan Chen, Marie Oshima: Automated centerline extraction of Circle of Willis using deep learning approach, 2023.11.15-18, 12th AP Biomech, Kuala Lumpur, Malaysia.
- 3) Marie Oshima: New perspective on a patient-specific blood flow simulation with a machine-learning technique for clinical applications, 2024.1.29-30, The 6th R-CCS International Symposium, Kobe, Japan.

#### 学会講演論文

- 1) To Chi Hang, 山田茂樹, 大島まり: Developing Model of Cerebral Peripheral Network for Collateral Flow Assessment, 2023年6月, 日本機械学会第35回バイオエンジニアリング講演会.
- 2) Alex Nguyen, 山田茂樹, 大島まり: 機械学習による頸動脈再建術後における過灌流リスクの不確かさ解析, 2023年6月, 日本機械学会第35回バイオエンジニアリング講演会.
- 3) 大島まり: 臨床応用に向けた血流シミュレーションの新しい展開, 2023年7月, 日本学術会議医工学シンポジウム2023～医工連携の現在そして未来～.
- 4) 大島まり: 患者個別血管モデリングとデータ駆動型代理モデルを用いたUncertainty Quantification, 2023年9月, 日本機械学会2023年次大会 先端技術フォーラム: 人・社会の不確かさ・複雑さを含めた拡張デジタルツインの構築を目指して.
- 5) 大島 まり: 医用画像×シミュレーション×AIによる血行動態予測の新しい展開, 2023年11月, 第22回日本血管血流学会学術集会.
- 6) 馮建晴, 小林匡治, 大島まり: 血流解析における血管表面平滑化手法の開発, 2023年12月, 第34回バイオフィロンティア講演会.
- 7) 亀田俊太郎, Khoa Alexander Nguyen, 山田茂樹, 大島まり: 機械学習による医用画像の不確かさを考慮した頸動脈血行再建術における過灌流リスク予測, 2023年12月, 第34回バイオフィロンティア講演会.
- 8) 今井直哉, 小林匡治, 大島まり: データ駆動型の血流解析のための 血管中心線を用いた血管モデル変形手法の開発, 2023年12月, 第34回バイオフィロンティア講演会.
- 9) 丹治和也, 大谷智仁, 渡邊嘉之, 山田茂樹, 大島まり, 和田成生: 脳実質内吻合を考慮した全脳

動脈網の構築と血流解析, 2023年12月, 第34回バイオフィロンティア講演会.

#### 総説・解説

- 1) 大島まり, 尹彰永:臨床応用を目指した患者個別血流シミュレーションと機械学習の融合, シミュレーション, 42 巻 3 号, pp.36-42.

## (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ー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) ProteinDF の研究開発

本研究室では密度汎関数法に基づく正準分子軌道計算エンジンである ProteinDF の研究開発を実装、毎年度性能をアップデートしている。今年度は Anderson 法を中心に SCF 計算の二次収束法を再整備した。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 法を中心に、関連する様々なツールを搭載した QCLObot を引き続き整備した。今年度はエネルギー密度解析の主成分解析法を開発した。来年度も引き続き実施する。

### (3) ProteinDF/QCLObot の公開

(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) 大規模正準分子軌道の重なり解析法の開発

巨大分子の正準分子軌道計算から得られる結果は膨大である。高分子の正準分子軌道計算であっても、解析手法は低分子と同じである。そのため、膨大な正準分子軌道計算結果に対する効率的な解析手法の開発が求められている。本研究では、分子軌道の重なりを比較する方法を用いた大規模正準分子軌道計算の解析手法を提案した。

### (5) がん抑制因子 p53 の転写活性化ドメイン由来ペプチドと MDM2 タンパク質複合体の電子構造解析

がん抑制タンパク質 p53 は細胞ストレスに応じて活性化され下流遺伝子の転写を促しがんを抑制する役割を有する。MDM2 は通常 p53 に結合し不要な細胞死を防いでいるが、がん細胞においては過剰発現し p53 の働きを妨げることがある。そこで p53 と MDM2 の結合を阻害し p53 を活性化することでがんを抑制する薬剤の研究開発が行われている。本研究では MDM2 に結合する部位の p53 由来ペプチドを変異させた阻害剤に着目し、正準分子軌道計算により MDM2 との複合体の電子構造を解析した。その結果、複合体形成に伴う電荷の再配置や、変異ペプチドでは主にクーロン相互作用エネルギーで

損得が生じていることを発見した。

#### (6) 量子コンピュータによる化学反応シミュレータの研究開発

本研究室では、量子イノベーションイニシアティブ協議会(QII: <https://qii.jp/>)に参画し、量子コンピュータによる量子化学計算について日立製作所と共同研究を実施している。本研究では、量子・古典ハイブリッドとは異なるフル量子コンピューティングアルゴリズムとそのプログラムを研究開発した。来年度も継続する。

### (1) 研究成果一覧

#### 欧文論文

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Study on Analysis Approach of Canonical Molecular Orbital Calculation in Large-scale Molecular System, March 2024, AIP Conference Proceedings, 3030, 020008.

#### 国際会議アブストラクト

- 1) Zheng Haojie, Hirano Toshiyuki, Tahara Saisei, Sato Fumitoshi: Insight into electronic structure of insulin analogues bound to IGF-1 receptor by quantum-chemistry calculation, June, 16-17, 2023, Bio UT 2023, Tokyo, Japan.
- 2) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Principal Component Analysis of Energies Derived from Canonical Molecular Orbital Calculations of Proteins, September 11-19, 2023, 21st International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM2023), Crete, Greece.

#### 学会講演論文

- 1) Zheng Haojie, 平野敏行, 田原才静, 佐藤文俊: Electronic structure of insulin and its analogues bound to IGF-1 receptor by canonical molecular orbital calculations, 2023 年 5 月 16-19 日, 第 25 回理論化学討論会.
- 2) 平野敏行, Zheng Haojie, 佐藤文俊: 軌道重なり法を用いたタンパク質正準分子軌道計算解析法の研究, 2023 年 9 月 12-15 日, 第 17 回分子科学討論会.
- 3) 植弘雄斗, 平野敏行, 田原才静, 佐藤文俊: アミロイド線維コアおよび細胞内天然型プリオンの電子構造研究, 2023 年 9 月 12-15 日, 第 17 回分子科学討論会.

#### 総説・解説・紀要

- 1) 小杉亨, 平野敏行, 田原才静, 佐藤文俊: がん抑制因子 p53 の転写活性化ドメイン由来ペプチドと MDM2 タンパク質複合体の電子構造解析, 2023 年, 生産研究, 75, 123.
- 2) 佐藤文俊, 平野敏行: タンパク質の正準分子軌道計算シミュレーション, 2023 年, シミュレーション, 42, 115-121, 2023.

## (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およびコードの研究開発」
- 2) 「大規模量子化学計算に関する共同研究」

## 長谷川洋介研究室 界面輸送工学

長谷川洋介研究室では、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。

2023 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。さらに最適制御により得られた制御入力 of 複雑な時空間分布を機械学習で予測するフレームワークを開発した。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。

2023 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。

2023 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) Takahiro Sonoda, Zhuchen Liu, Toshitaka Itoh, Yosuke Hasegawa: Reinforcement Learning of Control Strategies for Reducing Skin Friction Drag in a Fully Developed Channel Flow, April 2023, Journal of Fluid Mechanics, 960, A30. doi:10.1017/jfm.2023.147
- 2) Ming Liu, Yosuke Hasegawa: Adjoint-based shape optimization for radiative transfer using level-set function and volume penalization method, August 2023, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 210, 124158. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124158
- 3) Yusuke Yugeta, Kosetsu Uji, Toshitaka Itoh, Yosuke Hasegawa: Prediction of Optimal Control Input in a Fully Developed Turbulent Channel Flow by Machine Learning, November 2023, Journal of Fluid Science and Technology, Vol. 18, Issue 4, Pages JFST0033. doi:10.1299/jfst.2023jfst0033
- 4) Kohi Fukagata, Kaoru Iwamoto, Yosuke Hasegawa: Turbulent Drag Reduction by Streamwise Traveling Waves of Wall-normal Forcing, January 2024, Annual Review of Fluid Mechanics, Vol. 56. doi: 10.1146/annurev-fluid-120720-021445
- 5) Prashant Kumar, Vivek Kumar, Di Chen, Yosuke Hasegawa: Implementation of a level-set-based volume penalization method for solving fluid flows around bluff bodies, January 2024, Physics of Fluids, Vol. 36, 013608. doi: 10.1063/5.0175971

### 学会講演論文

- 1) Prashant Kumar, Di Chen, Xu Han, Yosuke Hasegawa : Topology optimization of a pin-fin array for heat transfer enhancement and pressure drop suppression in turbulent flow, 2023 年 5 月 24 日-27 日, 第 60 回 日本伝熱シンポジウム, 福岡.
- 2) Xu Han, 大澤崇行, Di Chen, Prashant Kumar, Fengbo Guan, 長谷川洋介 : 非定常法における熱伝達率測定に与える温度計測法の影響, 2023 年 5 月 26 日-27 日, 第 60 回日本伝熱シンポジウム, 福岡.
- 3) 富澤駿, 中嶋洋行, 長谷川洋介 : ゼブラフィッシュにおける赤血球の動力学を考慮した血流シミュレーション, 2023 年 5 月 24 日-27 日, 第 8 回血管生物医学会 若手研究会, 浜松.
- 4) 関根彰吾, 中嶋洋行, 長谷川洋介 : 毛細血管網裏モデリング機構解明のためのゼブラフィッシュ脳内血行力学 1 次元モデル解析, 2023 年 5 月 26 日-27 日, 第 8 回血管生物医学会 若手研究会, 浜松.
- 5) Ming Liu, Yosuke Hasegawa : 随伴法に基づく放射伝達のための多孔質構造体の形状最適化, 2023 年 5 月 24 日-27 日, 第 60 回日本伝熱シンポジウム, 福岡.
- 6) Chen, D., Kumar, P., Hasegawa, Y.: Multi-objective topology optimization of heat exchangers by using a customized optimizer in OpenFOAM, September 6-8, 2023, 14th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Barcelona, Spain.

- 7) Yugeta, Y., Uji, K., Itoh, T., Hasegawa, Y.: Machine learning of Optimal Control Input in a Fully Developed Turbulent Channel Flow, September 11-15, 2023, 12th Turbulence, Heat and Mass Transfer, Rome, Italy.
- 8) Xiao, Y., Han, X., Liu, Z., M., Hasegawa, Y.: Reconstruction of averaged velocity field from limited measurement by RANS-based adjoint method, September 11-15, 2023, 12th Turbulence, Heat and Mass Transfer, Rome, Italy.
- 9) Shogo Sekine, Vivek Kumar, Hiroyuki Nakajima, Yosuke Hasegawa: 1D Vascular Network Analysis of Zebrafish Hindbrain Using Physics-Informed Neural Network and its validation, 2023 年 9 月 20 日-22 日, 日本流体力学会年会 2023, 東京農工大学.
- 10) 弓削田悠介, 長谷川洋介: 最適制御理論とバイズ最適化を組み合わせた壁面摩擦抵抗低減のための壁乱流フィードバック制御則の開発, 2023 年 9 月 20 日-22 日, 日本流体力学会年会 2023, 東京農工大学.
- 11) 劉明, 松原幸治, 長谷川洋介: 非化学量論的化合物を利用した炭酸ガス熱化学分解, 2023 年 10 月 14 日-15 日, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2023, 神戸.
- 12) Fang, T., Liu, Z., Hamba, F., Hasegawa, Y.: Non-local effects on the dissimilarity between Reynolds shear stress and turbulent heat flux in wall turbulence subject to a streamwise traveling wave of wall blowing and suction, December 4-6, 2023, 9th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, Thuwal, Saudi Arabia.
- 13) 冨澤駿, Vivek Kumar, 中嶋洋行, Zhen Li, 長谷川洋介: ゼブラフィッシュにおける赤血球の動力学を考慮した散逸粒子動力学法による血流シミュレーション, 2023 年 12 月 10 日, CVMW2023, 神戸.
- 14) 渡邊翔, 長谷川洋介: PINNs を用いた円柱周り流れにおける抵抗低減及び伝熱促進のための形状最適化, 2023 年 12 月 15 日-17 日, 第 37 回数値流体力学シンポジウム, 名古屋大学.
- 15) 太田佑, Revela Yaroslav, Liu Zhuchen, 塚原隆裕, 長谷川洋介: 有限測定データを用いた POD に基づく速度場の推定と AR 可視化, 2023 年 12 月 15 日-17 日, 第 37 回数値流体力学シンポジウム, 名古屋大学.
- 16) Kumar, V., Nakakura, M., Kumar, P., Nakajima, H., Hasegawa, Y., Karniadakis, G.E.: Predicting the blood flow in zebrafish hindbrain with multiple planes RBCs signal using Artificial Intelligence Velocimetry (AIV), December 20-22, 2023, 10th International and 50th National Conference on Fluid Mechanics and Fluid Power (FMFP), IIT Jodhpur, India.
- 17) Kumar, P., Chen, D., Kumar, V., Hasegawa, Y.: Shape optimization for drag reduction in flow past a circular cylinder in the unsteady laminar regime, December 20-22, 2023, 10th International and 50th National Conference on Fluid Mechanics and Fluid Power (FMFP), IIT Jodhpur, India.

## (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)「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」
- 2) 挑戦的研究(開拓)(代表)「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」
- 3) 基盤研究(S)(分担)「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」
- 4) 基盤研究(A)「脳卒中リスク予測のための全身—脳循環代謝の解析システム構築」

### 民間等との共同研究

- 1) 「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」
- 2) 「空調用熱交換器の最適設計」
- 3) 「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)(分担)「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」
- 2) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)(分担)「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」
- 3) 文部科学省「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」

## 溝口照康研究室 ナノ物質設計工学

溝口照康研究室では、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)を明らかにするとともに、新たな機能を有する材料を探索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5年度においては以下の研究を行ってきた。

### (1) 第一原理計算を活用した機能材料の探索と機能解析

令和5年度においては、超伝導体やイオン伝導体などの種機能材料における第一原理計算を実施した。具体的には、イオンが層状物質にインターカレーションした層間化合物について、そのバンド構造と合成可能性を第一原理計算により系統的に調べた。その結果、これまで報告が無く、さらに合成可能性の高い超伝導物質の存在を理論的に明らかにした。また、同物質のバンド構造を詳細に調べた結果、パイエルス転移を起こして Charge density wave (CDW) 状態の電子構造を有することを明らかにした。

さらに、全固体電池の合成研究をしているグループとも共同研究を実施した。同グループが発見した、ドーパント添加に伴い高いイオン伝導性を示す物質について、そのメカニズムを第一原理計算により解析した。その結果、ドーパントが低濃度で存在する場合は、ドーパントと空孔との相互作用が大きくなり、拡散障壁が上がる(イオン伝導性が下がる)が、ある程度以上のドーパント濃度においては、その相互作用の均衡がとれるようになり、結果としてイオン伝導性が向上するというメカニズムを明らかにした。

### (2) スペクトル生成の物理を超える情報抽出

物質開発の現場では、分光実験により物質の結晶構造や電子状態が調べられている。たとえば、電子線や X 線を利用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有していることが知られている。一方で、分光実験で得られる情報はスペクトル生成の物理により支配されている。例えば、上記の内殻電子励起分光法は、内殻の局在した電子が伝導帯に電気双極子遷移することにより生じる吸収スペクトルに対応している。つまり、同スペクトルにおいては、電気双極子遷移が許容された、伝導帯における部分状態密度に関する情報しか得ることが出来ない。たとえば、同スペクトルからはそのスペクトル生成の物理のために、価電子帯に関する情報は得ることが出来ないことが知られている。もし、価電子帯に関する情報を取得したい場合は、異なる分光実験、たとえば、光電子分光実験を別途実施する必要がある。

本研究グループは、このような分光実験の限界を打破すべく機械学習を活用した。具体的には、内殻電子励起スペクトルから、本来は得ることが出来ない価電子帯の電子構造に関する情報を抽出した。

### (3) 結晶界面の安定構造探索法の開発と機械的特性の解析

結晶界面は多結晶体の機械的特性を決定する重要な領域である一方で、そのシミュレーションは容易ではない。本研究グループは結晶界面の構造を効率的に探索するための手法を開発した。さらに、同領域においてどのように亀裂が進展するのか、その亀裂進展挙動と構造の次元性との相関性を調べ



た. 具体的には, グラフェンとナノチューブという次元性の異なる物質について, それぞれの同種界面において異なる亀裂進展挙動が生じるという現象も明らかにした.

## (1)研究成果一覧

### 欧文論文

- 1) Naoto Kawaguchi, Kiyoo Shibata, and Teruyasu Mizoguchi: Possible New Graphite Intercalation Compounds for Superconductors and Charge Density Wave Materials: Systematic Simulations with Various Intercalants Using a van der Waals Density Functional Method, May 2023, J. Phys. Chem. C, 127 9833-9843. DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c01073
- 2) Po-Yen Chen, Kiyoo Shibata, Katsumi Hagita, Tomohiro Miyata, and Teruyasu Mizoguchi: Prediction of the Ground-State Electronic Structure from Core-loss Spectra of Organic Molecules by Machine Learning, May 2023, J. Phys. Chem. Lett., 14 4858-4865.
- 3) A. Talmantaite, Y. Xie, A. Cohen, P.K. Mohapatra, A. Ismach, T. Mizoguchi, S.J. Clark, B.G. Mendis: Twist-induced interlayer charge buildup in a WS<sub>2</sub> bilayer revealed by electron Compton scattering and density functional theory, June 2023, Phys. Rev. B, 107 235424-1-10.
- 4) Yuxiang Li, Subin Song, Hanseul Kim, Kuniharu Nomoto, Hanvin Kim, Xueying Sun, Satoshi Hori, Kota Suzuki, Naoki Matsui, Masaaki Hirayama, Teruyasu Mizoguchi, Takashi Saito, Takashi Kamiyama, and Ryoji Kanno: A lithium superionic conductor for millimeter-thick battery electrode, July 2023, Science, 381, 50-53.
- 5) Yaoshu Xie, Kiyoo Shibata, and Teruyasu Mizoguchi: Tensile strength of a transverse grain boundary in a single-walled carbon nanotube, October 2023, J. Ceram. Soc. Japan., 131, 621-627.
- 6) Yuki Hata, Yaoshu Xie, Kiyoo Shibata, and Teruyasu Mizoguchi: A guideline for searching for stable grain boundary structure by utilizing crystallographic information: a method based on non-identical termination, October 2023, J. Ceram. Soc. Japan., 131, 738-745.

### 和文論文

- 1) 溝口照康:機械学習を活用した界面および表面の構造解析と物性予測, 2023年11月, セラミックス, 58, 732-736.
- 2) 溝口照康:機械学習を利用した電子・X線分光からの物性予測, 2023年12月, 科学と工業, Vol.97, 357-364.

### 国際会議アブストラクト

- 1) Y. Lee, N. Kawaguchi, Y. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi: First-principles study on moiré ionics: Ion intercalation in twisted bilayer graphene, June 20, 2023, Workshop on Functional Materials Science (FMS2023), Busan, Korea.
- 2) Teruyasu Mizoguchi: Application of Machine Learning for Nano-Characterization, NanoKorea 2023, July 6, 2023, KINTEX, Seoul, Republic of Korea.

- 3) I. Takahara, K. Shibata, and T. Mizoguchi: Implementation of Code to Calculate Crystal Orbital overlap population (COOP) and its Application to the Chemical-Bonding Analysis in Li-intercalated Layered Materials, August 2, 2023, FHI-aims developer's meeting 2023, Hamburg, Germany.
- 4) Kiyoo Shibata and Teruyasu Mizoguchi: Database construction and machine learning prediction of site specific carbon K edge core-loss spectra, September 13, 2023, International Microscopy Congress (IMC20), Busan, Korea.
- 5) I. Takahara, K. Shibata, and T. Mizoguchi: Data-Driven Approach for the Prediction of Ground State Electronic Density of States with Electron Energy Loss Spectroscopy, September 13, 2023, International Microscopy Congress (IMC20), Busan, Korea.
- 6) Y. Lee, K. Shibata, and T. Mizoguchi: First principles calculation of electron energy-loss near edge structure of twisted 2D van der Waals structures, September 13, 2023, International Microscopy Congress (IMC20), Busan, Korea.
- 7) Teruyasu Mizoguchi: Unlocking the power of EELS via machine learning, November 3, 2023, ICAE 2023, Jeju, Korea.
- 8) Teruyasu Mizoguchi: Materials Characterization using DFT simulation, STEM-EELS, and machine learning, November 6, 2023, Dong-A University Seminar, Busan, Korea.
- 9) Teruyasu Mizoguchi: Artificial Intelligence for EELS/XAFS, PRICM 2023, November 21, 2023, Jeju, Korea.
- 10) Kento Nishio, Kiyoo Shibata, Teruyasu Mizoguchi: Prediction of forces and energy based on rotational invariant spherical representations, November 28, 2023, MRS Fall Meeting & Exhibit, Boston, MA USA.
- 11) Naoto Kawaguchi, Kiyoo Shibata, Teruyasu Mizoguchi: Extracting Physics from Database with Systematic DFT Calculations: Intercalation Energies of Layered Intercalation Compounds with Various Ions, November 29, 2023, 2023 MRS Fall Meeting & Exhibit, Boston, MA, USA.
- 12) Naoto Kawaguchi, Kiyoo Shibata, Teruyasu Mizoguchi: Design of Intercalant-Induced Function of Layered Intercalation Compounds via DFT Simulation and Machine Learning, December 12, 2023, Materials Research Meeting (MRM) 2023, Kyoto, Japan.
- 13) Teruyasu Mizoguchi: Machine learning for functional core characterization, December 12, 2023, MRM 2023, Kyoto, Japan.
- 14) Po-Yen, Chen, Kiyoo Shibata, Teruyasu Mizoguchi: Exploring Ground State Electronic Structure of materials through ELNES/XANES Spectra or SMILES Strings via machine learning, December 13, 2023, MRM 2023, Kyoto, Japan.
- 15) Kiyoo Shibata, Teruyasu Mizoguchi: Message Passing Neural Network for Predicting Dipole Moment Dependent Core Electron Excitation Spectra, December 15, 2023, NeurIPS AI4Mat workshop, New Orleans, LA, USA.

#### 学会講演論文

- 1) 溝口照康:機械学習と分光法を用いた物質解析, 2023 年 6 月 24 日, 第 194 回電子セラミック・プロセス研究会, TKP ガーデンシティ PREMIUM 名古屋駅前, 名古屋.

- 2) Teruyasu Mizoguchi: Application of Machine Learning for Nano-Characterization, July 6, 2023, NanoKorea 2023, KINTEX, Seoul, Republic of Korea.
- 3) 柴田基洋, 溝口照康: 炭素 K 端スペクトルのデータベース構築とグラフニューラルネットワークによる予測, 2023 年 7 月 31 日, 新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京.
- 4) 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インターカレントを機能コアとした物質設計, 2023 年 7 月 31 日, 新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京.
- 5) Poyen Chen, 柴田基洋, 溝口照康: 機械学習を利用した ELNES/XANES および SMILES に基づく電子構造の予測, 2023 年 7 月 31 日, 新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京.
- 6) 中川諒紀, 高原泉, 西尾健人, 柴田基洋, 溝口照康: 化学結合データベースの作成と機械学習による予測, 2023 年 7 月 31 日, 新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京.
- 7) 福沢源, 高原泉, 川口直登, 柴田基洋, 溝口照康: インターカレーション化合物の化学結合解析, 2023 年 7 月 31 日, 新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京.
- 8) Yebin Lee, 柴田基洋, 溝口照康: 第一原理計算によるモアレイオニクスの開拓, 新学術領域研究 2023 年 7 月 31 日, 「機能コアの材料科学」若手の会, 東京.
- 9) 高原泉, 柴田基洋, 溝口照康: 物質の逆設計に向けた深層生成モデルの開発, 2023 年 7 月 31 日, 新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京.
- 10) 西尾健人, 柴田基洋, 溝口照康: 基底関数を最適化したグラフニューラルネットワークによる回転不変物性の予測, 2023 年 7 月 31 日, 新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京.
- 11) 溝口照康: 機械学習を用いた XAFS/EELS 解析と表面物性予測, 2023 年 8 月 4 日, 第 61 回オーロラセミナー, 北海道大学触媒科学研究所, 北海道.
- 12) 溝口照康: 機械学習を用いた XAFS/EELS 解析と表面物性予測, 2023 年 8 月 8 日, 第 17 回固体イオニクスセミナー第 5 回若手勉強会, 山形ルーセントタカミヤ, 山形.
- 13) 溝口照康: 次世代放射光 × 情報科学, 2023 年 9 月 11 日, 東大が導く次世代放射光サイエンス, 東京大学弥生講堂, 東京.
- 14) 溝口照康: 機械学習を活用した XAFS スペクトルからの情報抽出, 2023 年 9 月 18 日, 第 9 回 SPring-8 先端放射光技術による化学イノベーション研究会, 品川 AP, 東京.
- 15) 高原泉, 柴田基洋, 溝口照康: 機械学習を用いた内殻電子励起スペクトルからの基底状態原子・電子構造解析法の開発, 2023 年 9 月 19 日, 日本金属学会 2023 年秋季大会, 富山大学, 富山.
- 16) 西尾健人, 柴田基洋, 溝口照康: 事前学習済みグラフニューラルネットワークを活用した小規模データセットに対する材料物性予測, 2023 年 9 月 19 日, 日本金属学会 2023 年秋季大会, 富山大学, 富山.
- 17) 溝口照康: 機械学習と原子分解能計測, 第一原理計算を複合利用したナノ構造解析, 2023 年 10 月 16 日, 東レセミナー, オンライン.
- 18) Teruyasu Mizoguchi: Unlocking the power of EELS via machine learning, November 3, 2023, ICAE 2023, Jeju, Korea.
- 19) Teruyasu Mizoguchi: Materials Characterization using DFT simulation, STEM-EELS, and machine

learning, November 6, 2023, Dong-A University Seminar, Busan, Korea.

- 20) 溝口照康:情報科学が拓く EELS 解析のフロンティア, 2023 年 11 月 12 日, 日本顕微鏡学会シンポジウム・関東支部会講演会, 高崎, 群馬.
- 21) 柴田基洋, 溝口照康:金属ナノクラスター設計のための電子状態密度の特徴解析と予測, 2023 年 11 月 14 日, 日本 MRS-J, 横浜, 神奈川.
- 22) 溝口照康:CASTEP を利用した ELNES/XANES データベースの作成と機械学習を活用したスペクトル解析, 2023 年 11 月 14 日, BIOVIA ユーザーズグループミーティング, 品川, 東京.
- 23) Teruyasu Mizoguchi: Artificial Intelligence for EELS/XAFS, November 21, 2023, PRICM 2023, Jeju, Korea.
- 24) 溝口照康:一次元記述子と機械学習による表面とスペクトル解析, 2023 年 11 月 23 日, 第 46 回ケモインフォマティクス討論会, 中央大学, 東京.
- 25) 高原泉, 柴田基洋, 溝口照康:結晶構造の生成モデリングおよびメトリクスの検討, 2023 年 11 月 23 日, ケモインフォマティクス討論会 2023, 中央大学, 東京.
- 26) 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, 2023 年 12 月 5 日, 東京理科大学特別講義, 葛飾, 東京.
- 27) Teruyasu Mizoguchi:Machine learning for functional core characterization, 2023 年 12 月 12 日, Materials Research Meeting (MRM) 2023, 京都国際会館, 京都.
- 28) 溝口照康:機械学習と理論計算による EELS からの情報抽出, 2024 年 1 月 16 日, 顕微インフォマティクス研究会第5回研究会, 駒場, 東京.
- 29) 溝口照康:機械学習と第一原理計算, 原子分解能計測を活用した無機材料解析, 2024 年 1 月 17 日, 固体化学フォーラム, 京都大学桂キャンパス, 京都.
- 30) 溝口照康:第一原理計算と機械学習による物質探索とナノ構造解析, 2024 年 2 月 6 日, RIST 材料系ワークショップ, 秋葉原, 東京.
- 31) 溝口照康:機械学習を活用した物質の分析と探索, 2024 年 2 月 7 日, 分析イノベーション交流会, 東京たま未来メッセ, 八王子, 東京.
- 32) Yebin Lee, 柴田基洋, 溝口照康:第一原理計算を用いたねじれ二層グラフェンにおけるイオンインターカレーションに関する研究, 2024 年 3 月 12 日, 日本金属学会 2024 春季大会, 東京理科大学, 東京.
- 33) 高原泉, 柴田基洋, 溝口照康:拡散モデルを用いた回転に対する同変・不変量の同時生成による結晶構造生成, 2024 年 3 月 22 日, 応用物理学会 2024 春季大会, 東京都市大学, 東京.
- 34) 柴田基洋, 溝口照康:異方性を考慮したグラフニューラルネットワークの開発:異方的 ELNES/XANES スペクトル予測への利用, 2024 年 3 月 22 日, 応用物理学会 2024 春季大会, 東京都市大学, 東京.

## (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

## 受託研究

### ①公的資金

- 1) 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」
- 2) (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」

## 井上純哉研究室 鉄鋼冶金インフォマティクス

構造材料は幅広い用途に応じて多様な特性(強度, 加工性, 耐食性, 耐熱性, 信頼性, 磁気特性など)を実現することが求められ, その特性を得るためには多種多様な組織構造の実現が求められる. そのため, 例えば高強度鋼では, 高温相から低温相に固相変態する過程で生じる様々な非平衡現象を積極的に活用することで, その組織構造が制御されている. 非平衡現象により得られる材料は平衡論で議論できる材料とは異なり, 合金組成だけではなく冷却速度・保持温度や加工と言ったプロセス条件により無限の形態が得られる可能性があり, その意味で構造材料には更なる発展の可能性が残されていると言える. しかし一方で, 材料開発においては, 様々な合金系での効果検証や最適プロセスの探索が不可欠であり, 十分な経験がなければ膨大な試行錯誤が必要となる. そのため, 材料探索の方向性は材料開発に携わる技術者のノウハウに大きく依存しており, それが日本の材料分野の産業競争力の源泉となってきた. 本研究室では, 独自開発した材料組織の定量測定手法で得られたデータと, 計算材料科学/データ駆動科学を融合することで, 構造材料の特性を支配する因子を抽出し, 少ないデータからでも効率的にノウハウを抽出することで, 新たな材料探索の支援を行う汎用的なプロセス・インフォマティクス技術ことを目指している.

### (1) 材料組織認知深層学習モデルの開発

構造材料の微細組織は非常に複雑なため, その分類や定量評価は長年の経験を積んだ研究者にしかできない, 所謂「匠の技」となっている. ここでは材料技術者が複雑な微細組織を認知する際の思考過程を深層学習モデルに落とし込むことで, 微細組織の微細構造が持つ空間的秩序をプロセス条件や機械的特性の関数とした確率密度関数として獲得し, 様々なプロセス条件や機械特性から鉄鋼組織画像を自動再構成するモデルの開発を行っている.

### (2) データ駆動型冶金学モデルの開発

深層学習モデルの性として, その推定可能範囲はあくまでも内挿領域に過ぎない. 材料開発は未踏領域, つまり外挿領域の探索であり, 単純な深層学習モデルでは信頼性のある探索は厳しい. また, 複雑な合金系に対して単に深層学習モデルだけから, 組織とプロセス条件/機械的特性の連関を確率密度関数として獲得するには, 情報分野で用いられている量と同等の巨大なデータベースが必要となり, 構造材料分野では複数の研究機関が保有するデータを全て集約したとしても, 数桁オーダーで情報が足りない. ここではスパースモデリングやデータ同化手法を適用することで, 実現象を支配する主要な冶金学モデルの獲得や, 冶金学モデルに含まれる不確実性の抽出を試みている.

## (1) 研究成果一覧

### 欧文論文

- 1) Meng Zhang, Koki Hibi, Junya Inoue: GPU-accelerated artificial neural network potential for molecular dynamics simulation, April 2023, Computer Physics Communications, 285 108655.  
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2022.108655>

- 2) Junya Sakurai, Masahiko Demura, Junya Inoue, Masayoshi Yamazaki: Creep life predictions by machine learning methods for ferritic heat resistant steels, October 2023, ISIJ International, Vol. 63, pp. 1786-1797. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.ISIJINT-2023-266>
- 3) Satoshi Noguchi, Syuji Aihara, Junya Inoue: Microstructure estimation by combining deep learning and phase transformation model, January 2024, ISIJ International, Vol. 64, pp. 142-153. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.ISIJINT-2023-365>
- 4) Ling Qiao, Junya Inoue, Jingchuan Zhu: Machine learning guided constitutive model and processing map for Fe2Ni2CrAl1.2 multi-principle element alloys, January 2024, Journal of Materials Research and Technology, Vol. 29, pp. 353-363. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2024.01.119>

#### 和文論文

- 1) 野口聖史, Hui Wang, 井上純哉: 材料設計における深層学習の応用: プロセス・構造・特性連関の抽出, 2023年, 応用統計学, Vol.52, No.2 pp.75-98.
- 2) 野口聖史, 栗飯原周二, 井上純哉: 深層学習と相変態モデルの融合による微細組織推定, 2023年, 鉄と鋼, Vol.109, No.11 pp. 898-914. <https://doi.org/10.2355/tetsutohagane.TETSU-2023-045>

#### 国際会議予稿集

- 1) Meng Zhang, Junya Inoue: Lath boundary sliding in lath martensite quantitatively investigated by using molecular dynamics (MD) simulation and experiment, September 2023, FEMS EUROMAT2023.
- 2) Meng Zhang, Shuang Gong, and Junya Inoue: Substructure boundary sliding in lath martensite quantitatively investigated by using molecular dynamics (MD) simulation and experiment, October 2023, MS&T23.
- 3) Meng Zhang, Shuang Gong, and Junya Inoue: Substructure boundary sliding in lath martensite quantitatively investigated by using molecular dynamics (MD) simulation and experiment, December 2023, MRM2023.
- 4) Junya Inoue and Satoshi Noguchi: Extraction of Process-Structure-Property Linkage using Deep-Learning Methods, December 2023, Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing.

#### 学会講演論文

- 1) Meng Zhang, Shuang Gong, 井上純哉: Substructure boundary sliding in lath martensite quantitatively investigated by using molecular dynamics (MD) simulation and experiment, 2023年9月, 日本金属学会2023年秋期(第173回)講演大会.

## (2) 研究プロジェクト

### 民間等との共同研究

- 1) 組織特徴に基づいた加熱温度の推定技術開発
- 2) 組織認知深層学習モジュールの開発

### 受託研究

#### ① 公的資金

- 1) 文部科学省「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業: 極限環境対応構造材料研究拠点」
- 2) (国研) 科学技術振興機構 (JST) 「ムーンショット型研究開発事業: 多様な環境に適応しインフラ構築を革新する協働 AI ロボット」



## 大岡龍三研究室 都市エネルギー工学

大岡龍三研究室では、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飛沫・飛沫核の動態に関する研究

人の呼吸活動により噴出する飛沫・飛沫核の動的な運動特性と蒸発特性を実測により明確にすることを目的とする。室内環境における感染リスクの評価には、感染源から噴出した飛沫・飛沫核の飛散および拡散による感染経路を再現する数値解析手法(Computational Fluid Dynamics:CFD)が多く活用されている。しかし、CFD 解析には、呼吸気流の方向と速度、飛沫の構成成分比、種類、噴出量、粒径分布などの境界条件を設定する必要がある。そのため、CFD を用いた飛沫・飛沫核の拡散解析をより高精度化する目的で、人の呼吸活動による 3 次元気流の特性と飛沫の蒸発特性の実測を行い、CFD の検証に利用可能なデータベースの構築を行った。

### (2) 単体建物モデル周辺における高温排気ガスの拡散予測

ボイラーや発電機の運転時には、建物周辺で極めて高温な排気ガスが放出される。人々の安全性や建物への影響を解析し適切な対応策を立案するためには、事前の高温排気ガスの拡散予測が必要となる。従来の 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-ε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) 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

近年、デジタルツインと呼ばれる概念が製造業を中心に注目を集めている。現実空間の計測データをサイバー空間に集約し、現実世界を模したシミュレーション環境を構築することで製品の設計業務効率等の改善が期待されている。本研究では、本技術の理論構築および実用化を最終的な到達点に据え、①モデリング手法の開発、②完全自動制御手法の汎用化、③それらの統合プラットフォームの開発、以上の 3 項目について研究を行った。これにより、自動的かつ継続的な省エネ化や省 CO<sub>2</sub> 化、在室者の快適性向上といった効果が多様な建物で期待できる。

### (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) Dun Zhu, Ryoza Ooka: WRF-based scenario experiment research on urban heat island: A review, May 2023, Urban Climate 49, 101512.
- 2) Mengtao Han, Ryoza Ooka: Large-Eddy Simulation Based on the Lattice Boltzmann Method for Built Environment Problems, May 2023, Springer.
- 3) Mengtao Han, Ryoza Ooka: LBM-LES in the outdoor wind environment problem around a single building, May 2023, Large-Eddy Simulation Based on the Lattice Boltzmann Method for Built Environment Problems.
- 4) Mengtao Han, Ryoza Ooka: LBM-LES in Ideal 3D Lid-Driven Cavity Flow Problems, May 2023, Large-Eddy Simulation Based on the Lattice Boltzmann Method for Built Environment Problems.
- 5) Mengtao Han, Ryoza Ooka: From the Lattice Boltzmann Equation to Fluid Governing Equations, May 2023, Large-Eddy Simulation Based on the Lattice Boltzmann Method for Built Environment Problems.
- 6) Mengtao Han, Ryoza Ooka: Implementation of the Boundary Conditions, May 2023, Large-Eddy Simulation Based on the Lattice Boltzmann Method for Built Environment Problems.
- 7) Mengtao Han, Ryoza Ooka: Fundamental Theory of the Lattice Boltzmann Method, May 2023, Large-Eddy Simulation Based on the Lattice Boltzmann Method for Built Environment Problems.
- 8) Mengtao Han, Ryoza Ooka: Turbulence Models and LBM-Based Large-Eddy Simulation (LBM-LES), May 2023, Large-Eddy Simulation Based on the Lattice Boltzmann Method for Built Environment Problems.
- 9) Mengtao Han, Ryoza Ooka: From LBE to LBM: Using the LBM to Solve Built Environment Problems, May 2023, Large-Eddy Simulation Based on the Lattice Boltzmann Method for Built Environment Problems.
- 10) Mengtao Han, Ryoza Ooka: LBM-LES in an Isothermal Indoor Flow Problem, May 2023, Large-Eddy Simulation Based on the Lattice Boltzmann Method for Built Environment Problems.
- 11) Wonseok Oh, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Mengtao Han: Numerical analysis of airflow dynamics generated by human coughing based on PIV experimental results, June 2023, AIVC.
- 12) Mengtao Han, Wonseok Oh, Ryoza Ooka, Yunchen Bu, Hideki Kikumoto, Shuyuan Hu: Measurements of Exhaled Airflow Velocity Via Human Coughs Using Particle Image Velocimetry (PIV), June 2023, AIVC.
- 13) Mengtao Han, Wonseok Oh, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto: Numerical analysis of airflow dynamics generated by human coughing based on PIV experimental results, June 2023, ASHRAE Topical

Conference Proceedings.

- 14) Yunchen Bu, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Wonseok Oh: Numerical Analysis on the Applicability of Air Purifier for Removal of Indoor Viral Contaminants, June 2023, AIVC.
- 15) Chao Lin, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Cédric Flageul, Youngseob Kim, Yunyi Wang, Alice Maison, Yang Zhang, Karine Sartelet: Large-eddy simulations on pollutant reduction effects of road-center hedge and solid barriers in an idealized street canyon, August 2023, Building and Environment 241, 110464.
- 16) Chenghao Wei, Ryoza Ooka: Indoor airflow field reconstruction using physics-informed neural network, 2023.8, Building and Environment, Volume 242, 15 August 2023, 110563.
- 17) Shan Gao, Ryoza Ooka, Wonseok Oh: Overall and local intrinsic clothing insulation using thermal manikin: Impact of methods employed and postures, September 2023, Building and Environment 243, 110639.
- 18) Manoj Kumar Singh, Ryoza Ooka, Hom B Rijal, Sanjay Kumar, Richard de Dear: Adaptive thermal comfort in the offices of three climates of North-East India, September 2023, Journal of Building Engineering 75, 106843.
- 19) Jia Tian, Ryoza Ooka, Doyun Lee: Multi-scale solar radiation and photovoltaic power forecasting with machine learning algorithms in urban environment: A state-of-the-art review, November 2023, Journal of Cleaner Production 426, 139040.
- 20) Wenchao Wang, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Wonseok Oh, Mengtao Han: Comparison of pollen indoor/outdoor ratios during off-peak and peak periods in Japan, December 2023, Building and Environment, Volume 246, 111018.
- 21) Wonseok Oh, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Sihwan Lee: Effects of ventilation rate and social distancing on risk of transmission of disease: a numerical study using Eulerian-Lagrangian method, January 2024, Aerosol Science and Technology, 58, 70-90.
- 22) Jia Tian, Ryoza Ooka: Evaluation of solar energy potential for residential buildings in urban environments based on a parametric approach, March 2024 (available online), Sustainable Cities and Society 106, 105350.

#### 国際会議予稿集

- 1) Masaki Shioya, Taizo Shimo, Yoshiro Shiba, Ichiro Masaki, Ryoza Ooka, Hideki Tanaka, Makiko Ukai, Chisato Tsuchida, Hideki Yuzawa, Takesi Kondo, Ryuta Tsurumi: Development of Sky-source Heat Pump System, June 2023: E3S Web of Conferences 396, 03033.
- 2) Hiroki Ikeda, Yuki Matsuda, Ryoza Ooka: Image Generation Technique of Indoor Temperature Distribution Using Transposed Convolutional Neural Network, June 2023, E3S Web of Conferences 396, 01044.
- 3) Manoj Kumar Singh, Ryoza Ooka, Hom B Rijal, Sanjay Kumar: Characteristics of thermal comfort in the offices of North-East India, June 2023, E3S Web of Conferences 396, 01037.

## (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) 挑戦的研究開拓「飛沫・飛沫核の粒径分布・運動特性と蒸発特性の解明に関する研究」

### 民間等との共同研究

- 1) 人工知能を用いた室内環境の予測・制御に関する研究
- 2) 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

テンソルトレイン (TT) 分解は, テンソルの効率的な圧縮近似と解析の方法で, 近年注目を集めている技術である. TT-SVD は最も一般的に使用される TT 分解アルゴリズムであり, テンソルの形状を順次再形成して圧縮することによって TT 形式のテンソルを構築していく. 大きなテンソルの場合には多くの計算時間とメモリが必要となる点が課題となっている. 本研究では, TT 分解の効率的な分散並列アルゴリズムである PTTD を考案し, テンソルを全プロセスに分散して TT-SVD により並列分解し, その結果をマージして元のテンソルの TT 形式を取得する方法を提案した. マージされた TT 形式のサイズを縮小するためには, 丸め処理を適用している. このアルゴリズムは決定論的であるため, テンソルの TT ランクを事前に知る必要がない点を利用し, 近似誤差を制御する方法を追加した. 実験結果によると, PTTD は 8192 コアを使用して平均スピードアップ 5384 倍を達成し, 近似誤差はコア数の増加とともに減少することを確認した. この誤差を制御する並列処理方法により, スケーラブルで単一ノードに保存できない非常に大きなテンソルを分解することができるようになった. ただし, PTTD は TT-SVD よりもやや大きなサイズの TT 形式を生成する点には注意が必要となる. 数値実験では, 8192 コアで 3017~8714 倍のスピードアップが確認できた. これは TT 分解アルゴリズムにおける最先端の効率を示している. 将来的には, より効率的なアルゴリズムによりさらなる高速化を図る予定である. また, 任意のサイズのテンソルを分散する最適な方法を自動的に見つけるアルゴリズムを開発し, PTTD の計算コストを最小限に抑えることを目指している.

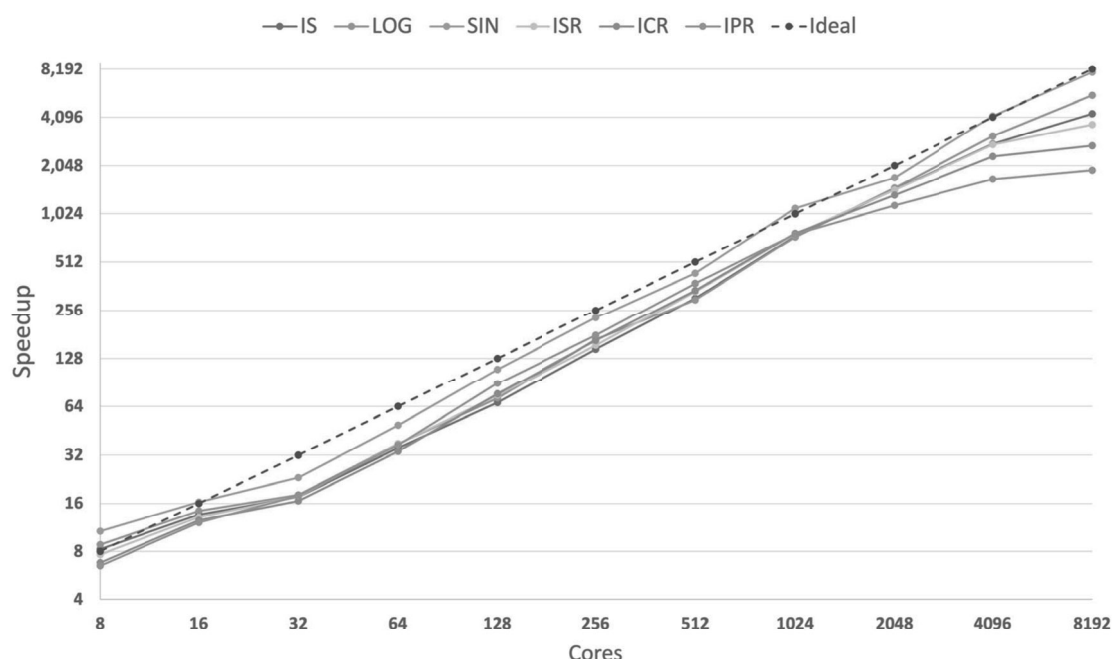


図 九州大学 ITO システムにおけるスケーリングテストの結果

## (1)研究成果一覧

### 欧文論文

- 1) Xiaoqing Liu, Kenji Ono and Ryoma Bise: Mixing Data Augmentation with Preserving Foreground Regions in Medical Image Segmentation, 2023 IEEE 20th International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI), Cartagena, Colombia, April 2023, pp. 1-5. DOI: 10.1109/ISBI53787.2023.10230495
- 2) Shiyao Xie, Akinori Miura and Kenji Ono: Error-bounded Scalable Parallel Tensor Train Decomposition, May 2023, IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops (IPDPSW), St. Petersburg, FL, USA, 2023, pp. 345-353. DOI: 10.1109/IPDPSW59300.2023.00064
- 3) Satoshi Ito, Satoru Miyano and Kenji Ono: Acceleration of BAM I/O on distributed file systems, December 2023, 2023 IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine (BIBM), Istanbul, Turkiye, 2023, pp. 3299-3304. DOI: 10.1109/BIBM58861.2023.10385370
- 4) Satoshi Ito, Kenji Ono, and Satoru Miyano: Large-scale WGS Analysis on the supercomputer Fugaku, March 2024, In Proceedings of the 2024 14th International Conference on Bioscience, Biochemistry and Bioinformatics (ICBBB '24). Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, pp. 14-20. <https://doi.org/10.1145/3640900.3640903>

### 学会講演論文

- 1) Chongke Bi, Fumiyoshi Syoji, Kenji Ono, Jorji Nonaka, Naohisa Sakamoto, Kazunori Mikami, Wenjuan Cui, Honggang Yin: Big Data Driven In-situ Visualization for High Precision Simulation of Air Pollution, May 2023, ISC High Performance 2023.
- 2) Satoshi Ito, Satoru Miyano, Kenji Ono: Fast I/O implementation for large WGS data on distributed file systems, November 2023, GIW ISCB ASIA 2023 Conference.
- 3) 川鍋友宏, 十川直幸, 中尾昌広, 小野謙二: 解析ワークフローツール WHEEL の紹介とスーパーコンピュータ「富岳」Open OnDemand での利用, 2023 年 12 月, 第 247 回システム・アーキテクチャ・第 192 回ハイパフォーマンส์コンピューティング合同研究発表会.
- 4) Ji, Qi, Kenji Ono: Application of GPUs in CFD-based Turbine Wake Simulation, January 2024, The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2024).

## 古川亮研究室 複雑流体物理学

ガラス(アモルファス)からコロイド, 粉体, バクテリア(アクティブマター)まで, 様々なソフトマター・複雑液体系における非線形・非平衡問題を対象としており, 数値シミュレーションと理論を主体に研究を進めている. ガラス(アモルファス)に関しては, シリカのようなストロングガラスから様々なフラジイルガラスの緩和過程, 異常物性・レオロジーの問題について, 分子動力学シミュレーションを用いて研究を行っている. 一方, 粉体, コロイド, バクテリアの懸濁液に関する問題には, 特に溶媒を介した構成要素間の流体力学的相互作用がマクロ物性に及ぼす影響に焦点を当て, 粒子-流体ハイブリッドシミュレーションを用いた研究を行っている.

### (1) ガラス形成物質の非線形レオロジー, 緩和, 異常輸送の研究

ガラスは, 日用品から先端材料まで, 私たちの生活に欠かせない材料である. また, 地球を構成する橄欖石のような主要鉱物も, 広い意味でのガラス物質である. ガラスと一口に言っても, その種類や形態は多岐にわたり, 外部環境や環境変化に応じて, 非ニュートン流動や, シアバンド(変形の局在化)や破壊現象のような不均一化を伴う多様な非線形・非平衡応答を容易に示す. 本研究室では, ガラスが示す非ニュートンレオロジー現象について, 液体的な非線形流動や固体的な破壊現象を, 現象間のクロスオーバーや不安定化という視点から俯瞰的にアプローチし, 研究を進めている. 本年度は, 流動下での体積分率の減少( $\equiv$ 自由体積の増加)を数値実験的に決定し, この体積分率の減少が流動特性に与える影響を評価することで, 変形率と粘性の関係を定量的に予測する理論式を導出することに成功した. また, 実用ガラスとして極めて重要であるにもかかわらず, これまで十分に明らかにされていなかったシリカガラスの動的特性を定量的に理解・予測するための理論的枠組みの完成を目指して, 海外のグループと共同で研究を進めている.

### (2) 粉体懸濁液のレオロジー, コロイド懸濁液の緩和過程における流体力学的相互作用の効果

本研究室では, 粒子-流体ハイブリッドシミュレーション法を駆使することにより, 流体力学的相互作用が重要な影響を及ぼす可能性があるサスペンション系の動的問題についての研究を行っている. この手法を用いることにより, 計算コストを増大させることなく, 粒子間の複雑な相互作用や流体の挙動を詳細に解析することが可能となる. 本年度は, 特に非ブラウン粒子( $\equiv$ 粉体)懸濁液におけるシアシンニング現象と, 濃厚コロイド懸濁液の緩和過程に焦点を当て研究を展開した. 従来, 濃度が高い粒子系においては, 長距離の流体力学的相互作用が遮蔽され, その結果として流体効果は粒子の濃度が上昇するにつれて顕著に弱まると考えられてきた. この考えは, 濃厚懸濁液系におけるシミュレーションで流体を考慮しないで済む主要な根拠として広く受け入れられていた. しかし, 我々の研究では, 高濃度系であっても, 非圧縮性に起因する近接場の流体効果が残存し, 粒子の再配置運動に顕著な影響を与えることを明らかにした. これは, 濃厚懸濁液の挙動をモデル化する上で, 従来見過ごされがちだった近接場の流体効果が重要であることを意味している.

### (3) バクテリア懸濁液の非線形レオロジー

微生物など、自己推進性を有する粒子を溶媒に懸濁させた流体(アクティブ流体)は、その構成要素の能動性に由来して、通常のパッシブなコロイド粒子系とは著しく異なる性質を示す。中でも異常レオロジーは、パッシブ系との決定的差異を際立たせる現象として大きな関心を集めてきた。本研究室では、微生物の泳動メカニズムを反映したミニマルモデルを用いた数値シミュレーションによりこの問題にアプローチしている。本年度は特に、大腸菌様 (pusher) 微生物のマикроレオロジーおよびクラッドモナス様 (puller) 微生物のマクロレオロジーに焦点を当て、直接流体力学シミュレーションを行った。前者の場合には、溶媒の粘性で規定される抵抗係数を大きく下回る異常な抵抗係数を観測する。この現象は、プローブ粒子と微生物間の流体力学的相互作用がプローブの有効駆動力として作用することによるものである。一方、puller型微生物のマクロレオロジー研究では、微生物の自己推進性に起因する異常な粘性上昇を示すが、この現象の背後には、境界壁と微生物間の流体力学的相互作用が主要な役割を果たしていることを明らかにした。これらの結果は、流体粘性や抵抗係数を自在にコントロールするマイクロ(ナノ)マシンの設計に道も有用であると考えられる。

### (1) 研究成果一覧

#### 欧文論文

- 1) Akira Furukawa: Quantification of the volume-fraction reduction of sheared fragile glass-forming liquids and its impact on rheology, June 2023, Phys. Rev. Research, Vol.5, 023181(1-13).

#### 和文論文

- 1) 古川亮: ガラス形成液体のシアシニング現象: 有効体積分率の視点-特集 異常な固体: ガラス・ゲル・粉体, 2023年4月, アンサンブル: 分子シミュレーション研究会会誌, No. 25, Vol. 2, pp.137-142.

#### 国際会議予稿集

- 1) Akira Furukawa: Transverse Viscous Transport in Supercooled Liquids, August 2023, The 9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems (9 IDMRCS), G-TS 3-13.
- 2) Akira Furukawa: What determines non-Newtonian flow behavior in glass-forming liquids?, September 2023, The 7th International Soft Matter Conference (7th ISMC), 4b-B-2.
- 3) Tomoharu Terayama and Akira Furukawa: Interplay between hydrodynamics and particle dynamics in shear-thinning non-Brownian suspensions, September 2023, The 7th International Soft Matter Conference (7th ISMC) 3b-D-4.

#### 学会講演論文

- 1) 野地隼平, 古川亮: 濃厚コロイド懸濁液の緩和過程における流体力学的相互作用の効果, 2023年9月, 日本物理学会第78回年次大会, 18pA101.
- 2) 野地隼平, 古川亮: 濃厚コロイド懸濁液の緩和と流体効果, 2023年10月, 第71回レオロジー討論



会, 2C05.

- 3) 金澤貴広, 古川亮: アクティブサスペンションのマイクロレオロジー, 2023年10月, 第71回レオロジー討論会, 2C08.
- 4) Takahiro Kanazawa, Akira Furukawa: Microrheology of Active Suspensions, 2023年12月, 第11回ソフトマター研究会, P11.
- 5) 野地隼平, 古川亮: 濃厚コロイド懸濁液の緩和過程に与える流体力学的相互作用の影響, 2023年12月, 第11回ソフトマター研究会, P43.
- 6) 野地隼平, 米谷佳晃, 吉森明: 極性溶媒間相互作用のカットオフに対する積分方程式理論, 2023年12月, 第11回ソフトマター研究会, P44.
- 7) 早野陽紀: アクティブサスペンションの異常レオロジー, 2023年12月, 第11回ソフトマター研究会, P47.
- 8) Haruki Hayano, Akira Furukawa: Anomalous rheology of active suspensions, 2024年1月, アクティブマター研究会2024.
- 9) 金澤貴広, 古川亮: アクティブ流体中でのアクティブマイクロレオロジー, 2024年3月, 日本物理学会2024年春季大会, 18aM1-1.
- 10) 早野陽紀, 古川亮: クラミドモナス型マイクロスイマー懸濁液における異常レオロジー, 2024年3月, 日本物理学会2024年春季大会, 18aM1-6.
- 11) 野地隼平, 古川亮: 濃厚コロイド懸濁液の緩和過程における散逸機構の違いが及ぼす影響, 2024年3月, 日本物理学会2024年春季大会, 21aM2-4.
- 12) 野地隼平, 米谷佳晃, 吉森明: 積分方程式理論を用いた極性溶媒間の静電相互作用のカットオフに関する研究, 2024年3月, 日本物理学会2024年春季大会, 19pM2-8.

## (2) 研究プロジェクト

### 科研費による研究

- 1) 特別推進研究(分担)「非平衡ソフトマター・アモルファス物質の物性解明への力学的自己組織化からの挑戦」

## 栃木栄太研究室 ナノスケール材料強度学

金属やセラミックス、半導体に代表される結晶性材料は我々の社会を形作る重要な基盤材料である。それらは使用環境下において力学的負荷に晒されており、しばしば変形や破壊現象が問題となる。結晶性材料の変形・破壊現象の素過程は転位、双晶、亀裂といった欠陥構造（格子欠陥）の形成と伝播であることが知られており、これまで数十年にわたり格子欠陥の微細構造や動的挙動に関する研究が進められてきた。当研究グループでは、電子顕微鏡を主要なツールとして構造用セラミックスや金属材料、半導体材料中に形成される格子欠陥の原子／電子構造の解析研究を実施している。近年では、微小電気機械システム（MEMS）を用いた電子顕微鏡内その場荷重負荷試験システムの開発と応用研究を推進しており、格子欠陥の力学的応答をナノ～原子スケールでの動的挙動に着目した研究を推進している。

### (1) 結晶性材料の微細組織・格子欠陥構造の解析

格子欠陥は原子レベルの構造欠陥であり、その詳細な構造情報を得るためには電子顕微鏡による観察実験が不可欠である。令和5年度は化合物半導体中の転位構造解析、セラミックス粒界における破面構造解析、金属－セラミックス界面の構造解析、ステンレス鋼のひずみ誘起マルテンサイト組織解析などを実施した。

### (2) 電子顕微鏡内その場機械試験システムの開発

電子顕微鏡内その場荷重負荷試験は格子欠陥の力学的応答の観察に極めて有効な実験手段である。従来、マイクロモーターやピエゾアクチュエーターによる荷重負荷機構を搭載した試料ホルダーが用いられてきたが、ホルダーが大型化する傾向や荷重負荷精度の点で実験上の制約が大きかった。本研究グループでは、マイクロメータスケールで高精度の荷重負荷機構を構成できる MEMS 技術に着目し、電子顕微鏡内にて動作可能な荷重負荷デバイスおよびその制御システムの開発を進めている。本年度は集束イオンビーム－走査電子顕微鏡システム（FIB-SEM）内にて荷重負荷が可能なシステムを構築するため、フィードスルーポートおよび通電用治具の設計・開発と制御用電源や観察像の記録システムを含む実験系全体の構築を行った。評価実験の結果、システム全体は良好に動作することを確認した。また、TEM 用の小型 MEMS 荷重負荷デバイス・制御システムの開発を行った。本システムは原子分解能観察を意図しており傾斜機構を組み込んだ電圧印可 MEMS ホルダーを作製した。現在までにシステムの駆動試験および傾斜機構の動作試験を完了しており、高電圧印可システムの実装を進めている。

### (3) その場機械試験による異相界面の力学的挙動の解析

現代の IT 社会を支える各種半導体デバイスは様々な物質の積層構造から構成されており、それら界面の強度設計が重要な研究課題である。本年度は半導体積層材料の界面剥離挙動の評価

のため、シリコン酸化物ベースの積層構造を有する試料の FIB-SEM 内にてその場荷重負荷試験を実施した。実験の結果、界面の剥離現象は生じず非晶質酸化シリコン層のクリープ変形が認められた。過去の研究報告を踏まえると、本現象は電子線照射に誘起されたものと考えられる。このため、電子線照射条件の最適化を図ることでクリープ変形を抑制し、界面剥離現象を観察することを検討している。

## (1)研究成果一覧

### 欧文論文

- 1) Yan Li, Xufei Fang, Eita Tochigi, Yu Oshima, Sena Hoshino, Takazumi Tanaka, Hiroto Oguri, Shigenobu Ogata, Yuichi Ikuhara, Katsuyuki Matsunaga and Atsutomo Nakamura: Shedding new light on the dislocation-mediated plasticity in wurtzite ZnO single crystals by photoindentation, April 2023, Journal of Materials Science & Technology Vol. 156, 206-216. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2023.02.017>
- 2) Yan Li, Hiroto Oguri, Ayaka Matsubara, Eita Tochigi, Xufei Fang, Yu Ogura, Katsuyuki Matsunaga and Atsutomo Nakamura: Strain-rate insensitive photoindentation pop-in behavior in ZnS single crystals at room temperature, October 2023, Journal of the Ceramic Society of Japan Vol. 131, 685-689. <https://doi.org/10.2109/jcersj2.23064>
- 3) Bin Feng, Sena Hoshino, Bin Miao, Jiaké Wei, Yu Ogura, Atsutomo Nakamura, Eita Tochigi, Katsuyuki Matsunaga, Yuichi Ikuhara and Naoya Shibata: Direct observation of intrinsic core structure of a partial dislocation in ZnS, October 2023, Journal of the Ceramic Society of Japan Vol. 131, 659-664. <https://doi.org/10.2109/jcersj2.23065>
- 4) Yu Ogura, Atsutomo Nakamura, Tatsuya Kameyama, Yasuyoshi Kurokawa, Eita Tochigi, Naoya Shibata, Tsukasa Torimoto, Sena Hoshino, Tatsuya Yokoi and Katsuyuki Matsunaga: The effect of room-temperature plastic deformation in darkness on the photoluminescence properties of ZnS, November 2023, Journal of the American Ceramic Society Vol. 107, 2040-2047. <https://doi.org/10.1111/jace.19564>
- 5) Hiroto Oguri, Yan Li, Eita Tochigi, Xufei Fang, Kenichi Tanigaki, Yu Ogura, Katsuyuki Matsunaga and Atsutomo Nakamura: Bringing the photoplastic effect in ZnO to light: A photoindentation study on pyramidal slip, November 2023, Journal of the European Ceramic Society Vol. 44, 1301-1305. <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2023.09.060>
- 6) Takaaki Sato, Vivek Anand Menon, Hiroshi Toshiyoshi and Eita Tochigi: Microfabricated double-tilt apparatus for transmission electron microscope imaging of atomic force microscope probe, February 2024, Review of Scientific Instruments Vol. 95, 23705. <https://doi.org/10.1063/5.0186983>

## 国際会議アブストラクト

- 1) Eita Tochigi, Takaaki Sato, Minjian Cao, Naoya Shibata and Yuichi Ikuhara: Investigation of atomic behavior of crack tips in SrTiO<sub>3</sub> under loading by in situ STEM observations, June 2023, The International Workshop on Advanced and In Situ Microscopies of Functional Nanomaterials and Devices (IAMNano).
- 2) Eita Tochigi: In situ observations of local atomic behavior upon deformation and fracture phenomena in ceramic materials, October 2023, Materials Science and Technology 2023, *Invited*.
- 3) Eita Tochigi: Atomic scale in situ observations of the mechanical response of lattice defects, November 2023, the 11th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, *Invited*.
- 4) Eita Tochigi, Takaaki Sato, Minjian Cao, Naoya Shibata and Yuichi Ikuhara: Observations of local mechanical behavior of crystalline materials by in situ loading experiments in a scanning transmission electron microscope, December 2023, MRM2023 Grand Meeting.

## 学会講演論文

- 1) 柄木栄太, 佐藤隆昭, 曹旻鑒, 柴田直哉, 幾原雄一: SrTiO<sub>3</sub>における切欠きの開口に伴う刃状転位の形成と上昇運動の直接観察, 2023年9月, 日本機械学会 M&M2023, MM0425.
- 2) 曹旻鑒, 柄木栄太, 佐藤隆昭, 柴田直哉, 幾原雄一: 原子分解能 TEM その場機械試験法によるローマ・コットレル転位コア構造変化の直接観察, 2023年9月, 日本機械学会 M&M2023, MM0422.

## (2) 研究プロジェクト

### 科研費による研究

- 1) 基盤研究(S)「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」
- 2) 基盤研究(A)「固体物質の塑性変形挙動に及ぼす光照射効果のメカニズム解明」
- 3) 新学術領域研究「界面機能コア解析」

### 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)「大規模水素供給インフラの構築に関する技術基準策定検討」
- 2) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)「次世代ファインセラミックス製造プロセスの基盤構築・応用開発」

## 長井宏平研究室 成熟社会インフラ学

長井宏平研究室は「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) Eam Sovisoht, Vikas Singh Kuntal, Prakhar Misra, Wataru Takeuchi, Kohei Nagai: Estimation of Year of Construction of Bridges in Cambodia by Analyzing the Landsat Normalized Difference Water Index, April 2023, Infrastructures, Vol.8, Issue 4, 77. <https://doi.org/10.3390/infrastructures8040077>
- 2) Bennie Hamunzala, Koji Matsumoto, Kohei Nagai: Improved Method for Estimating Construction Year of Road Bridges by Analyzing Landsat Normalized Difference Water Index 2, July 2023, Remote Sensing, Vol.15, Issue 14, 3488. <https://doi.org/10.3390/rs15143488>

- 3) Naoki Suzuki, Kohei Nagai: Piling Data-Driven Framework for Optimized Pile Structures Based on Minimizing the Expected Total Cost, September 2023, Applied Sciences, Vol.13, Issue 18, 10216. <https://doi.org/10.3390/app131810216>
- 4) Yi Wang, Sha Xie, Zhao Wang, Xiaoda Li, Fuyuan Gong, Kohei Nagai, Jun Deng, Tamon Ueda, Wenguang Hu: Experimental investigation on electrical response and mechanical performance of cementitious materials at low temperatures, October 2023, Cement and Concrete Composites, Vol.143, 105264. <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2023.105264>
- 5) Suhas S. Joshi, Vikas Singh Kuntal, John E. Bolander, Kohei Nagai: Reproducible estimations of internal corrosion distribution from surface cracks using MPC-RBSM, November 2023, Engineering Fracture Mechanics, Vol.292, 109642. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109642>
- 6) Dheeraj Waghmare, Dawei Ren, Punyawut Jiradilok, Kohei Nagai: Simulation of moisture variations in concrete during prolonged alternate wetting and drying cycles using 3D discrete network model, December 2023, Case Studies in Construction Materials, Vol.19, e02553. <https://doi.org/10.1016/j.cscm.2023.e02553>
- 7) Jie Luo, Kohei Nagai: Investigating equivalency of different element models in discrete mesoscale analysis of ASR-damaged concrete, December 2023, Construction and Building Materials, Vol.408, 133755. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2023.133755>
- 8) Takeru Kanazawa, Kohei Nagai, Koji Matsumoto: Equilibrium-based analysis of diagonal tension failure from a re-entrant corner of an RC half-joint, January 2024, Structures, Vol.59, 105708. <https://doi.org/10.1016/j.istruc.2023.105708>
- 9) Yi Wang, Ridho Surahman, Kohei Nagai: Shear cracking behavior of pre-damaged PVA-aggregate mixed ECC beams: Direct observation using DIC, January 2024, Engineering Fracture Mechanics, Vol. 295, 109757. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2023.109757>
- 10) Naoki Suzuki, Kohei Nagai: Variability in jacking resistance of adjacent steel pipe piles under controlled pile installation, February 2024, Soils and Foundations, Vol.64, Issue 1, 101402. <https://doi.org/10.1016/j.sandf.2023.101402>

## 和文論文

- 1) 深谷壮太, 全邦釘, 長井宏平: 橋梁点検調書の損傷写真と所見を用いた損傷診断 VQA の開発, 2023 年 11 月, AI・データサイエンス論文集, Vol.4, Issue 3, pp.490-500. [https://doi.org/10.11532/jsceiii.4.3\\_490](https://doi.org/10.11532/jsceiii.4.3_490)
- 2) 井林康, 松木遼, 松崎優輝, 長井宏平: 橋梁迂回路計算結果の維持管理優先度への反映のための基礎的検討, 2023 年 11 月, AI・データサイエンス論文集, Vol.4, Issue 3, pp.501-506. [https://doi.org/10.11532/jsceiii.4.3\\_501](https://doi.org/10.11532/jsceiii.4.3_501)

## (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」
- 3) 基盤研究(B)【代表】「高炉セメントコンクリートのひび割れ要件解明と水和物形態に基づく収縮抑制手法の開発」

### 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)

## 菊本英紀研究室 複雑系環境制御工学

安全で快適、スマートな都市・建築空間の創造には、現在および未来の環境把握や予測と、それに基づく設計・制御が必要不可欠である。本研究室では、コンピューティング・デジタル技術を駆使し、主に空気・熱環境を対象として、高度なモニタリングやシミュレーションに基づく環境センシング技術の開発とそれらの環境デザインへの応用に取り組んでいる。より具体的には、以下のような技術の開発を行っている。

### (1) 市街地空間における汚染物質発生源同定手法の開発

現代の高密度な都市において、交通や工場などの様々な汚染源から放出される大量の汚染物質は、健康被害や環境問題の原因となる。これらの汚染源を特定することは、適切な対策を講じるために重要であるが、都市環境の複雑さから必ずしも容易ではない。

そこで我々の研究室では計測データとシミュレーションモデルの融合により、発生源情報を適切に推定し、かつ任意の位置の汚染物質濃度を高い精度で評価できるような解析技術を開発している。特に発生源情報の推定は、計測濃度(結果)からモデルを介して発生源(原因)を求める逆解析と呼ばれるプロセスを経る。そのため、いわゆる不良設定問題となり、データやモデルにわずかな誤差が混入すると、解が大きく変化する。したがって、我々の研究では、ベイズ推定と呼ばれる確率論的フレームワークを活用し、汚染質の発生源や空間中の濃度分布をロバストかつ不確かさ情報を含めて提供できるような手法を開発している。この方法論は汎用性が高く、推定対象を拡張することで、例えば、多様な形状をもつ発生源への対応も可能となる。また、モデルの中の経験的パラメーターも推定対象とすることで、解析対象の実状に合わせたモデルの高精度化なども行っている。

### (2) 都市気流の迅速な高精度分布推定手法の開発

都市気流は乱流としての特徴が強く、時間によって分布が大きく変化する。この気流の正確な予測は、歩行者や構造物の安全、また最近ではドローン、Urban Air Mobility (UAM) などの飛行計画にも重要である。

本研究では、機械学習を用いた手法である Generative Adversarial Network (GAN) を利用し、センサーから得られた気流速度測定値を入力に、立方体建物群モデルにおける瞬間的な気流分布を高い空間解像度で迅速に推定する手法を提案した。真の値としての Large-eddy simulation によるデータや既往手法(POD-LSE)による推定結果との比較から、GAN は瞬間的な気流分布推定が可能であり、再現精度が POD-LSE よりも高いことを明らかにした。

## (1) 研究成果一覧

### 欧文論文

- 1) Hongyuan Jia, Hideki Kikumoto: Backward-Eulerian footprint modelling based on the adjoint equation for atmospheric and urban-terrain dispersion, Boundary-Layer Meteorology, 188, 159–183, April 2023. <https://doi.org/10.1007/s10546-023-00807-z>



- 2) Chaoyi Hu, Hongyuan Jia, Hideki Kikumoto: Estimation of instantaneous airflow distribution in cubic building group model using multi-time-delay LSE-POD, Building and Environment, 243, 110642, September 2023. <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2023.110642>
- 3) Hongyuan Jia, Chaoyi Hu, Hideki Kikumoto: Effects of sensor configuration optimization on airflow estimation in urban environment: A case study with a building group model, Sustainable Cities and Society, 98, 104840, November 2023. <https://doi.org/10.1016/j.scs.2023.104840>
- 4) Chaoyi Hu, Hideki Kikumoto, Bingchao Zhang, Hongyuan Jia: Fast estimation of airflow distribution in an urban model using generative adversarial networks with limited sensing data, Building and Environment, 249, 111120, February 2024. <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2023.111120>

#### 国際会議予稿集

- 1) Chaoyi Hu, Hideki Kikumoto, Bingchao Zhang, Hongyuan Jia: Fast estimation of airflow distribution in the urban model using generative adversarial network and limited sensors, May 2023, IAQVEC 2023, Tokyo, Japan.
- 2) Hongyuan Jia, Rongmao Li, Hideki Kikumoto: Sensor network optimization for source term estimation in an indoor space model, May 2023, IAQVEC 2023, Tokyo, Japan.

#### 学会講演論文

- 1) 賈鴻源, 菊本英紀, 胡超億: センサーネットワークを用いた市街地気流の分布推定に関する研究 (その5) QR分解に基づくセンサー配置最適化による推定精度の改善, 2023年9月, 日本建築学会大会(近畿), 学術講演会梗概集, 40644.
- 2) 胡超億, 菊本英紀, 賈鴻源, 張秉超: センサーネットワークを用いた市街地気流の分布推定に関する研究 (その6) CWGANによる市街地モデル内の気流分布の推定, 2023年9月, 日本建築学会大会(近畿), 学術講演会梗概集, 40645.
- 3) Xiang Wang, Hideki Kikumoto, Chaoyi Hu, Hongyuan Jia, Keisuke Nakao: Study on utilization of local objective analysis data for microclimate prediction (Part 2) Reproduction of long-term high-resolution data in urban areas by POD-LSE method, 2023年9月, 日本建築学会大会(近畿), 学術講演会梗概集, 40648.

## (2) 研究プロジェクト

### 科研費による研究

- 1) 基盤研究(B)「都市大気乱流拡散場におけるフットプリント解析の高度化と応用」

## 革新的シミュレーション研究センター 令和 5 年度 活動報告 Vol. 16

---

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](mailto:office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp)

URL: <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/>

TEL: 03-5452-6661 FAX: 03-5452-6662

