



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 6 年度
活動報告

Vol. 17

はじめに

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。シミュレーション技術の果たすべき役割は、工学における課題解決と価値創成への貢献の観点から、「材料開発に始まり設計と製造を経て実用に供さ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。このビジョンを掲げ、CISSでは様々な取り組みを行っています。

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(研究開発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。CISSでは、令和6年度まで、「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」において、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きました。

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、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)環境を利用する、深層学習などのAIと融合した先端的シミュレーション技術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7年5月30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

長谷川 洋介

革新的シミュレーション研究センター

令和 6 年度 活動報告

Vol. 17

目 次

1. 革新的シミュレーション研究センターの概要	1
2. 構成メンバー	3
3. センターの活動実績	5
(1) 大型プロジェクトの推進	
1) 文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム	
「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	29

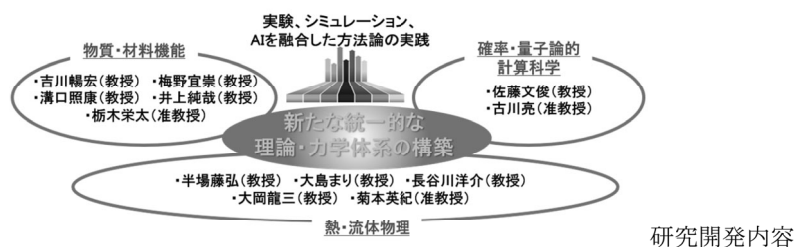
1. 革新的シミュレーション研究センターの概要

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、①世界をリードする先端的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。CISS は、平成 25 年 4 月、平成 30 年 4 月、および、令和 5 年 4 月に、三度の改組を実施し、現在第 4 期の活動を行っています。

CISS では、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」や「富岳」を駆使して得られた先端的な成果の実用化を加速するとともに、AI と HPC を融合した、シミュレーションの新しい方法論とそれを実現するアプリケーションの研究開発を行っています。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的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行いました。その結果、その結果、第 4 期 CISS では、第 3 期までの活動を発展させ、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供さ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シミュレーションし、それぞれの段階で起こりえる課題の解決手段まで提示すること」にあるというビジョンを掲げ、様々な取り組みを行っています。

上記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／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。

以上のように、CISS は 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, 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 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

Fujihiro HAMBA, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 流体物理学

Fluid Physics



大島 まり 教授

Marie OSHIMA, Professor

所属 東京大学大学院情報学環・生産技術研究所

Interfaculty Initiative in Information Studies, The University of Tokyo

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 バイオ・マイクロ流体工学

Bio-Microfluidics



佐藤 文俊 教授

Fumitoshi SATO, Professor

所属 東京大学生産技術研究所

Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

専門分野 計算生体分子科学

Computational Biomolecular Science



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



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



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

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: 長谷川洋介(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 6 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 6 年度は、低解像度格子によって平板境界層を予測、および、実機ファンによるサロゲートモデルの、空力性能・騒音に係る精度検証を実施した。壁乱流予測モデルの開発については、高解像度計算と低解像度計算の違いを判別する判別器の開発、判別器が判別できないような流れを修正する生成器を開発、平板乱流へ適用し、1/64 程度の格子点数で高解像計算と同程度の予測性能を実現した。サロゲートモデルの開発については、流れの情報を低次元化することで特徴量を抽出し、これを入力に加えることによる予測性能の向上の確認、高精度 CFD を実行することなく、未知の設計変数における流れの特徴量を予測するネットワークの開発し、予測された流れの特徴量を用いることにより、高精度 CFD を実行せずに未知の設計変数における高精度に性能予測が可能であることを確認した。

(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 6 年度は、多視点画像データベースを使った可視化サロゲートモデルの開発を実施した。多くの in-situ 可視化システムで採用されている可視化データベース仕様である CINEMA に対応した画像出力機能を開発し、スマート in-situ 可視化基盤より出力される多視点可視化画像のデータベース化を行なった。スマート in-situ 可視化機能のひとつである多視点可視化機能を利用し、指定する可視化パラメータに対して、対話的に任意の視点での可視化映像を生成することが可能な機械学習モデル(可視化サロゲートモデル)を開発し、CINEMA DB 仕様に対応した学習処理システムに加え、学習済み学習モデルを活用した対話的 Web 可視化システムとして、多視点可視化画像データを活用した可視化サロゲートモデルを開発した。開発した可視化サロゲートモデルについては、渦輪形成シミュレーションや自動車空力特性シミュレーションを対象に検証を行い、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 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 6 年度は、壁面挙動の予測モデルによる模型船の推進抵抗予測と精度検証を実施した。判別器について、研究テーマ 1 で開発している壁乱流予測モデルを用いて、壁乱流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と Fully-resolved LES の結果について 99.8 %以上の正答率で判別でき、複数の船型に対し、同一のネットワークパラメータで高精度な判別ができることがわかった。さらには、異なったレイノルズ数の流場に対しても、同一のネットワークパラメータで判別可能なことがわかった。また、壁から十分離れた $y+=100$ の流場情報から壁面挙動の予測ができることがわかった。予測値の時系列は高周波の振動が多い結果となったが、入力値を $y+=100, 200, 300$ の 3 断面に増やすことによって改善された。

(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 億格子規模程度の 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 6 年度は、壁面挙動モデルによる自動車の空力騒音の予測を実施した。CUBE を用いた壁面挙動モデルによる自動車の空力騒音の予測として、A ピラー形状の変更によるバサバサ音低減効果を検討し、バサバサ音が「横風の変動によって発生する A ピラー剥離が持つ高周波音が、主流速度の変動によって振幅変調されて聞こえる変調音」であるとの仮説のもと、A ピラーを改修することで、1 Hz 以下の変調周波数において 1~2 kHz 周辺の変調パワーのピークが抑えられることを明らかにした。FFX を用いた壁面挙動モデルによる自動車の空力騒音の予測として、実車の複雑形状に対する実レイノル

ズ数に対する解析が可能になった。現在、「富岳」の2,400 ノードを利用して、39 億格子点、最小格子サイズ 2 mm の実車のウィンドスロップ(空力共鳴音)の計算を実施し、ほぼ実測と一致する共鳴周波数が得られた。

(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 6 年度は、ヒートポンプ用ファンの最適化を実施した。動翼のスタッキングについては、NACA65 系列をベースとして渦形式を仮定した設計を行い、この動翼形状に対して羽根車単体の流れ解析により高静圧・高効率となる形状の最適化を実施した。マウスリング、羽根車リングなどの翼端部形状やディフューザについては、設計した動翼形状を用いて内部流れ解析により形状最適化を実施した。また、サロゲートモデルの精度向上の知見を得るために、現行プロペラファンで用いられる動翼後縁付近の V 字カット形状が性能や内部流れへ与える影響も明らかにした。

(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 6 年度は、ランクマップの最適化効果の検証、中核アプリケーションの GPGPU の性能向上、および、新規流体解析アルゴリズムの開発を実施した。課題内の代表的なアプリケーション CUBE にランクマップ最適化アルゴリズムを適用し、最適化の効果を評価した。また、FFX を Aurora-TSUBASA 30A (理論演算性能 4.91 TFLOPS, メモリー容量 96 GB, メモリーバンド幅 2.45 TB/s) に移植し、VE 単体実効性能 17.01 %を達成した。さらに、東北大 Aoba-s を利用し、最大 2,048 VE の並列性能のベンチマーク計算と最適化を実施し、並列化効率を 17 %向上させ、61.8 %を達成した。また、加速演算器が主体となる次世代の計算機ハードウェアの動向に鑑み、FFX のコアカーネルの低 B/F 化を検討した。

(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「ターボ機械および船舶分野における次世代計算技術の実用化推進分科会」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 6 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、第 5 回「富岳」高性能シミュレーション技術交流会、第 8 回 HPCI ものづくり統合ワークショップや第 2 回 HPC 産業応用拡大プロジェクトシンポジウムを開催するなどし、公開した。

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・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。

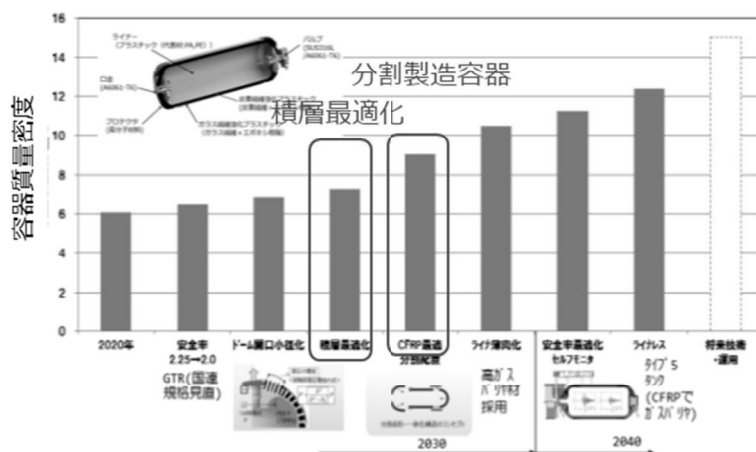
一方、FCV 用 TYPE4 容器低価格化の最有力手段と目されている、ロードマップの CFRP 使用量削減シナリオにもある「CFRP 部の分割製造容器」に関しては、ロボットによるテーププレースメント工法やチョップド繊維による成形工法などを用いることができるため、「機械学習を用いた高圧水素容器最適設計プロジェクト(2021-2022)」で前提としてきたフィラメントワインディング工法による一体構造容器と比較して CFRP 積層自由度が各段に増大する。よって、分割製造容器の CFRP 使用量最小となる最適容器をこれまでの開発経験値から導き出すことは非常に困難であり、積層パターンがさらに増大しても最適

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 高圧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]

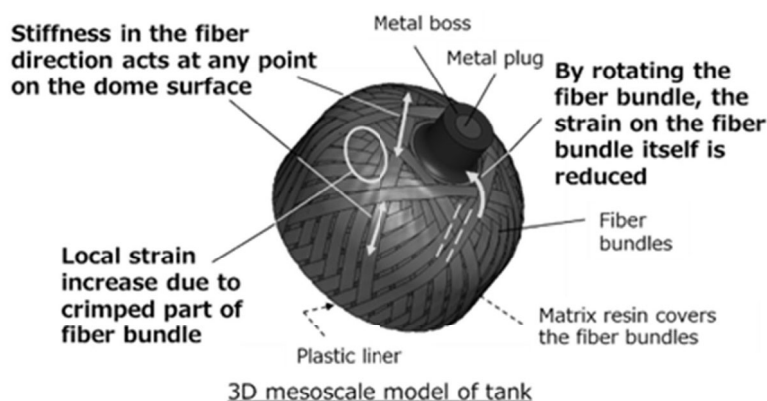
①「メゾスケールパラメータの定式化」

高圧水素容器の内圧によるCFRP層の複雑なひずみ場や高精度な強度予測を行うため、CFRPを繊維束とマトリクス樹脂を区別し実容器と同様の繊維束配向をモデル化した容器 3 次元メゾスケールモデルによる解析評価が行われてきた。一方、容器軸対称モデルは、CFRP を繊維とマトリクス樹脂を均質

化して直交異方性を有する連続体として計算する。そこで、容器軸対称モデルを高精度化する方策として、軸対称モデルでは表現できず簡略化されているメゾスケール構造パラメータによる構成則を、容器軸対称モデルのマクロ構成則に追加導入することにした。

メゾスケール構造がマクロ構成則に影響を与えと考えられる要因の仮説を 3 つ設定した。構成則の 1 つ目は、「ドーム面はほぼ半球殻構造であることからドーム面上のどの位置にも繊維方向の剛性が働く」、2 つ目は「容器が内圧によって軸方向に伸びる際に、ドーム部にある繊維束がマトリクス樹脂内で回転移動することによって CFRP 全体のひずみに対し繊維束自体のひずみが減少する」、3 つ目は「繊維束が交差して上下層が入れ替わるクリンプ部で局所ひずみが増大する」とした。

つまり、ドーム部のクリンプが無い部位は構成則 1+2、ドーム部のクリンプが有る部位は構成則 1+2+3 を導入すれば解析精度が向上すると考えた。



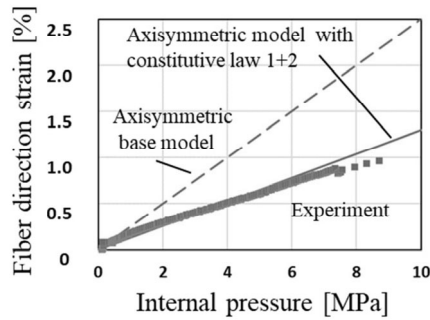
軸対称モデルに導入するメゾスケールパラメータ

②「構成式の検証」

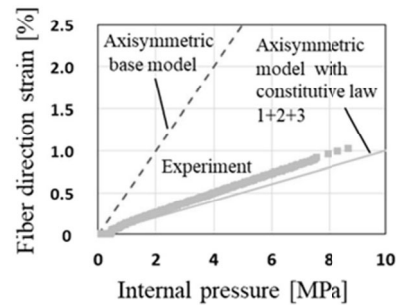
Type 4 小型容器を試作してひずみ測定実験を行い、解析結果と比較評価を行った。

中国工業株式会社製の LP ガス用量産樹脂ライナー(φ298×805)にフープ層と±11°ヘリカル層の 2 層をフィラメントワインディング工法で積層し、熱硬化させて試作を行った。ドーム中央にクリンプ部を有する積層となり、1 層の厚さは 0.45～0.50 mm、繊維体積含有率 50 %とした。試作に使用した材料物性を Table 2 に示す。最表面にひずみゲージを貼り付け、水圧による内圧負荷によりひずみ計測を行った。9 MPa でドーム面から破裂した。

クリンプ部が無いボス近傍、およびクリンプ部を有するドーム中央における繊維方向ひずみについて、実験結果と軸対称モデル解析結果との比較を下図に示す。横軸が内圧、縦軸が繊維方向ひずみである。■が実験値で円周上の 3 か所の平均値、破線が軸対称ベースモデルの解析値、実線が構成則を組み込んだ軸対称モデル高精度化の解析値である。実験値と 2 倍以上の乖離があったベースの解析値が、高精度化により大幅に実験値に近づき、特に低圧側で一致することが確認できた。



(a) ボス近傍

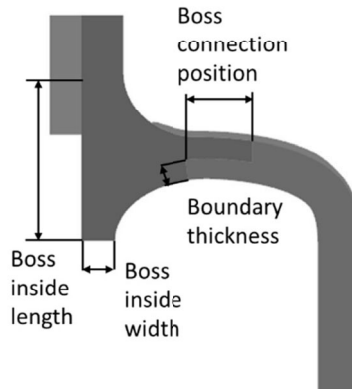


(b) ドームクリンプ部

炭素繊維方向ひずみの実験値と軸対称モデルによる評価値の比較

③「機械学習による最適設計」

「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。容器の設計変数には先行研究の設計変数に加えて、下図に示すように、ボス接続位置、ボス内側高さ、ボス内側厚み、ボス・ライナー境界の厚みを含めた。

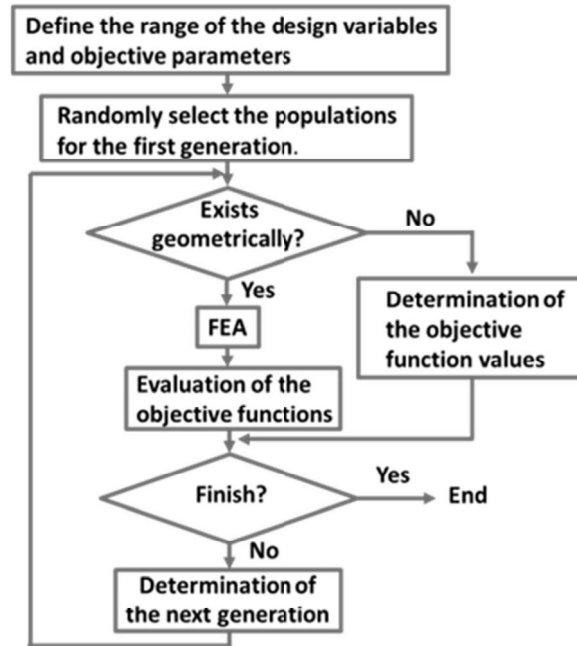


設計パラメータ

容器最適設計の最小化する目的関数には、「CFRP 質量/内容積」、「アルミボス部相当応力の最大値」、「樹脂ライナー相当応力の最大値」、「CFRP 積層の繊維方向垂直ひずみの最大値」、「容器の総質量/内容積」の 5 つを用いた。アルミボス部や樹脂ライナーの相当応力の最大値、CFRP 積層の繊維方向垂直ひずみの最大値は本来制約関数である。これら制約を同時に満たした設計解(実行可能解)の分布が未知のため、制約関数を目的関数として最小化を行い、実行可能解の探索も行った。探索した実行可能解のうち、CFRP 質量/内容積が最小の解を最適解とした。

最適解探索は下図に示したアルゴリズムで行われる。最適化のソルバーに遺伝的アルゴリズムの一種である RNSGA-3 を用いた。RNSGA-3 では目的関数の参照点を与えることができ、この参照点付近の解とパレートフロント解を重点的に探索する。アルミボス部や樹脂ライナーの相当応力の最大値、

CFRP 積層の繊維方向ひずみの最大値の制約上限を参照点として与えることで、制約上限値近傍を探索した。また、本手法では設計変数がすべて独立と仮定して設定されているが、実際には幾何的に従属であるため、形状が成立しない設計変数の組み合わせ(個体)が存在する。このような個体は、目的関数値に十分大きな値をもたせることで、次世代の個体への影響が小さくなるようにした。

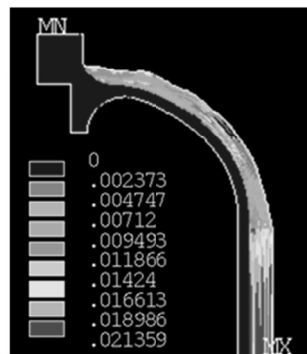


最適設計フローチャート

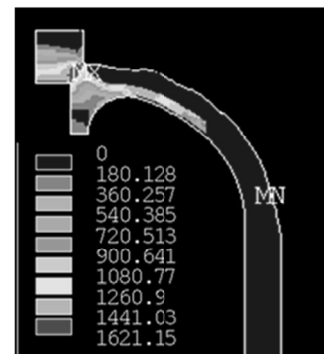
強度制約として、CFRP 積層の繊維方向垂直ひずみの最大値が 2.1 %以下、アルミボス部相当応力の最大値が 1,656 [MPa]以下を満たした CFRP 質量/内容積が最小の解を最適解とした。最適解は 7,500 回の探索中 7,144 回目で得られた。積層構成と容器形状、CFRP 積層の繊維方向垂直ひずみ分布、アルミボス部の相当応力分布を下図に示す。容器長とライナー内径の比を考慮して、シリンダー部は一部のみ図示した。CFRP フープ層が積層内側に集中し、シリンダー部での内圧を支える一方で、ヘリカル層が積層外側に集中した。



(a) 積層構成と容器形状



(b) 繊維方向ひずみ分布



(c) アルミボス部応力分布

最適解探索結果

本研究により開発した手法を既存の燃料電池自動車用高圧水素タンクの再設計に適用し、既存の容器と比しての軽量化および破裂圧力の変化を検証する予定である。

(2) 他研究機関との連携

国立研究開発法人理化学研究所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実施した。

(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人数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 6 年度現在 16 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、今年度から小川秀人非常勤講師が加わった。

科目名: 実践的シミュレーションソフトウェア開発演習

担当教員: 佐藤文俊, 小川秀人(非常勤講師), 高橋英男, 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.
- ・ 小川秀人, “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.26, No.5, 2024 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:

(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 2 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, 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を狙いとし, そして, 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 7 年 3 月 13 日(木)10:00-17:00

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

主 催: 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター

後 援: 東京大学生産技術研究所, (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: 215 名(オンサイト参加 39 名)

資料作成: 予稿集 161 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

栗原潔

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

10:05-10:20 全体概要

長谷川洋介

東京大学生産技術研究所 教授

I. 基盤技術の研究開発

- 10:20-10:55 (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
長谷川洋介 東京大学生産技術研究所 教授
鈴木琢也 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 企画委員長
(株式会社竹中工務店技術研究所)
- 10:55-11:30 (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
中島慶悟 鹿島建設株式会社技術研究所都市防災グループ 主任研究員

II. 基盤技術を活用した実証研究

- 11:30-12:00 (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
加藤季広 日本電気株式会社デジタルプラットフォームビジネスユニットインフラ・テクノロジーサービス事業部門 HPC 統括部 プロフェッショナル
(司会:長谷川洋介 東京大学生産技術研究所 教授)
- 13:00-13:35 (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部长代理
三宅竜二 一般財団法人日本海事協会技術研究所 専門研究員
- 13:35-14:10 (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
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
田島厚志 神戸大学大学院システム情報学研究科
- 14:10-14:45 (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
塚本和寛 株式会社日立製作所研究開発グループグリーンインフライノベーションセンタ熱流体ソリューション研究部 主任研究員

III. 招待講演

- 14:45-15:15 「富岳 NEXT」プロジェクトの始動:次世代計算基盤の構築に向けて
近藤正章 理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー
(司会:鈴木康方 日本大学理工学部 教授)

IV. パネルディスカッション

- 15:25-16:55 「ポスト『富岳』時代のものづくりシミュレーション」
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 近藤正章 理化学研究所計算科学研究センター チームリーダー

鈴木琢也	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 企画委員長 (株式会社竹中工務店技術研究所)
中島慶悟	鹿島建設株式会社技術研究所都市防災グループ 主任研究員
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
塚本和寛	株式会社日立製作所研究開発グループグリーンインフライノベーションセンタ熱流体ソリューション研究部 主任研究員

16:55-17:00 閉会の挨拶

長谷川洋介 東京大学生産技術研究所 教授/研究開発課題責任者

第 40 回生研 TSFD シンポジウム

「乱流シミュレーションと流れの設計—乱流研究の新展開—」

乱流数値シミュレーション研究者の意見交換の場として、様々な研究分野からご参加を得てきた「生研 TSFD (Turbulence Simulation and Flow Design) シンポジウム」(旧「生研 NST シンポジウム」)は本年度で 40 回目となり、「乱流シミュレーションと流れの設計—乱流研究の新展開—」というテーマに関する 13 件の講演を行った。

開催日: 令和 7 年 3 月 4 日(火) 9:25-17:40

場 所: 生産技術研究所 S 棟 1 階プレゼンテーションルーム
(対面を主としたハイブリッド開催)

主 催: 東京大学生産技術研究所 TSFD グループ

○プログラム

9:25-9:30 開会の挨拶 半場藤弘(東京大学)

セッション 1 司会: 菊本英紀(東京大学)

9:30-10:05 乱流 Rayleigh 流れにおける乱流熱フラックスの逆勾配拡散
中村元紀, 半場藤弘(東京大学)

10:05-10:40 物理情報に基づくニューラルネットワークを用いた単体建物モデル周辺平均気流解析の効率化
胡超億, 王逸辰, 菊本英紀(東京大学)

10:40-11:15 台風時の都市境界層構造に関するアンサンブル LES 解析
川口真晴, 田村哲郎(横浜国立大学)

11:15-11:50 静止系および回転系振動格子乱流の DNS データから得られた POD モードの比較
鷺見竜雅, 山田格, 森西洋平(名古屋工業大学)

セッション 2 司会: 北澤大輔(東京大学)

13:20-13:55 GOY シェルモデルと TSDIA 理論を組み合わせた乱流 LES モデルの提案
蛇嶋華(福岡大学), 稲毛真一(石巻専修大学)

13:55-14:20 4次元超解像データ同化(4D-SRDA)による3次元準地衡流れの予測

野津有礼, 安田勇輝, 大西領(東京科学大学)

14:20-14:45 乱流雲が有する本質的不確実性の数値解明

岩島昌也, 大西領(東京科学大学)

14:45-15:10 フラクタル樹木に働く抗力の数値解明

常盤匠, 大西領(東京科学大学)

セッション 3 司会:長谷川洋介(東京大学)

15:30-15:55 局所スケール間平衡仮説に基づいた情報を保存するSGSモデル

橋本丈瑠, 荒木亮, 塚原隆裕(東京理科大学)

15:55-16:20 LESのための壁モデル構築におけるGANの応用とその予測性能の評価

遠藤匠, 劉竺辰, 劉明, 弓削田悠介, 伊藤宗嵩(東京大学), 加藤千幸(東京大学, 日本大学), 長谷川洋介(東京大学)

16:20-16:45 敵対的生成ネットワークと直接数値計算を用いた三次元リブレット形状の抵抗低減率予測

石井満, 仁村友洋, 村田章, 岩本薫(東京農工大学)

16:45-17:10 進行波によるバックステップ乱流の剥離制御

森田淳一, 守裕也, 王萌蕾, 宮寄武(電気通信大学)

17:10-17:35 Machine Learning-Based State Estimation and Data Augmentation for a Plane Impinging Jet

岩澤瑠夏, 深淵康二(慶應義塾大学), 水上泰良, 服部博文(名古屋工業大学)

17:35-17:40 閉会の挨拶 長谷川洋介(東京大学)

b) ワークショップ

第8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8回は、これまで「富岳」を利用して得た成果を概観し、現状のHPC、およびHPCにより得られるデータへの機械学習の応用について議論し、さらに、最新のハードウェアの動向や利用環境を概観し、それを踏まえて、ポスト「富岳」時代に向けた、国のプロジェクトで開発してきたアプリケーションの研究開発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6年12月3日(火)10:00-17:00

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

共催: 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機体開発 DX に向けた実証研究」プロジェクト

東京大学大学院新領域創成科学研究科 NEDO 先導研究プログラム「新技術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/浮体洋上風力発電の HPC と AI 連携活用型解析技術の基盤研究」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: 133 名 (オンサイト参加者 34 名含む)

資料作成: 国のプロジェクトの最新状況 セッション予稿集 43 頁,

「富岳」等の利用成果 セッション予稿集 58 頁,

HPC の技術動向とポスト「富岳」時代の展望 セッション予稿集 72 頁

○プログラム

10:00-10:05 (5 分) 開会の挨拶

長谷川洋介 東京大学生産技術研究所 教授

A. 国のプロジェクトの最新状況

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

10:05-10:30 (30 分) NEDO・浮体式洋上風力 HPC プロジェクトの概要

吉村忍 東京大学大学院新領域創成科学研究科産学協創推進室 副
室長・特任教授

10:30-11:00 (30 分) 圧縮性流体解析統合基盤アプリ FVHC-ACE: 高忠実な圧縮性流体解析から
大規模複雑データ解析まで

河合宗司 東北大学大学院工学研究科 教授

11:00-11:30 (30 分) Society 5.0 時代のスマートデザインプロジェクトの成果事例について

坪倉誠 神戸大学大学院システム情報学研究科/理化学研究所計算科
学研究センター 教授/チームリーダー

11:30-12:00 (30 分) 「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」
のご紹介

長谷川洋介 東京大学生産技術研究所 教授

シミュレーションによる自動車サンルーフ開時の空力騒音発生機構の解析

宮澤真史 株式会社本田技術研究所先進技術研究所次世代電動車研究
領域 アシスタントチーフエンジニア

12:00-13:00 昼食休憩

B. 「富岳」等の利用成果

(司会 長谷川洋介 東京大学生産技術研究所 教授)

13:00-13:25 (25 分) 「富岳」を活用した水まわり住宅設備機器開発のための混相流シミュレーション
佐々木一真 TOTO 株式会社技術統括部 CAE 技術グループ 主任技師

13:25-13:50 (25 分) 圧縮性 Wall-resolved LES による遠心式ターボ機械の性能予測
塚本和寛 株式会社日立製作所研究開発グループグリーンインフラソリューションセンタ熱流体ソリューション研究部 主任研究員

13:50-14:15 (25 分) 流体解析・設計の代替モデリング
下山幸治 九州大学大学院工学研究院 教授

14:15-14:40 (25 分) 機械学習を用いた自動車空力性能を予測するためのシロゲートモデル開発
赤坂啓 日産自動車株式会社カスタマーパフォーマンス&車両性能技術開発本部統合 CAE 部空気流・熱 CAE 技術開発グループ アシスタントマネージャー

14:40-15:05 (25 分) “人と AI との協奏”によるタイヤ開発の展望と課題
小石正隆 横浜ゴム株式会社 AI 研究室 アドバイザリーフェロー・研究室長

15:05-15:15 コーヒーブレイク

C. HPC の技術動向とポスト「富岳」時代の展望

(司会 河合宗司 東北大学大学院工学研究科 教授)

15:15-15:45 (30 分) 「ポスト富岳」FS の状況とアプリケーション開発の準備について
朴泰祐 筑波大学計算科学研究センター 教授

15:45-16:15 (30 分) 次世代計算基盤における利用環境の高度化に向けて
埴敏博 東京大学情報基盤センター 教授

16:15-16:35 (20 分) ポスト「富岳」を見据えた通信アルゴリズムの最適化と GPGPU 等への移植状況
加藤千幸 日本大学理工学部 上席研究員

16:35-16:55 (20 分) ポスト「富岳」を見据えた次世代アプリケーションの検討
高木亮治 国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所 准教授

16:55-17:00 (5 分) 閉会の挨拶
河合宗司 東北大学大学院工学研究科 教授

ワークショップー工学における量子コンピューティングへの期待ー

量子コンピューティングは、近年現実的なものとなっており、AI と並びシミュレーション技術の飛躍的向上の起爆剤となることが期待されている。量子化学分野等では、先行してアプリケーションソフトウェアが整備されているが、他の工学分野への展開のためには、新たな計算アルゴリズムの開発が必要になっている。

そこで、革新的シミュレーション研究センターでは、量子コンピューティングの現状に対する認識を

深め工学における展開の可能性を検討する、ワークショップー工学における量子コンピューティングへの期待を開催した。このワークショップでは、2030 年代には本格稼働することが予測される量子コンピュータを用いた量子コンピューティングの恩恵を広汎な工学分野に敷衍し、力学などの既往の学術体系を変革する新たなシミュレーションの方法論について展望した。

開催日： 令和 6 年 11 月 25 日(月)14:00-17:00

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： 38 名 (オンサイト参加 9 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)

14:00-14:05 趣旨説明

佐藤文俊 東京大学生産技術研究所 教授

14:05-14:55 超伝導量子回路の性能向上と集積システムへ

野口篤史 東京大学大学院総合文化研究科 准教授

14:55-15:45 第一量子化に基づく量子化学シミュレーション

戸丸辰也 株式会社日立製作所中央研究所基礎研究センタ

15:55-16:45 科学の自動化と Quantum CAE

門脇正史 国立研究開発法人産業技術総合研究所量子・AI 融合技術
ビジネス開発グローバル研究センター 特定フェロー/(株)デ
ンソー AI 研究部

16:45-17:00 総合討論

ワークショップ:力学の再構築

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た、全 4 回のワークショップシリーズを開催しました。2024 年度は、2023 年度に引き続いて、機械学習技術の期待と限界を議論する、そして、量子コンピューティング技術を展望するワークショップシリーズを開催し、力学などの既往の学術体系を変革する新たなシミュレーションの方法論について議論した。

第1回ワークショップ:力学の再構築(材料インフォマティクス分野)

開催日: 令和6年12月11日(水)15:00-17:00

場 所: 東京大学生産技術研究所 大セミナー室(Dw601), 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: 38名(オンサイト参加9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)

15:00-15:05 趣旨説明

溝口照康 東京大学生産技術研究所 教授

15:05-15:55 機械学習とテンソルネットワーク

藤堂眞治 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻物理学科 教授

16:05-16:55 自律駆動型材料研究を支援するソフトウェアの開発と実応用

田村亮 国立研究開発法人物質材料研究機構 マテリアル基盤研究センター 材料設計分野 データ駆動型アルゴリズムチーム チームリーダー

16:55-17:00 閉会の挨拶

第2回ワークショップ:力学の再構築(材料強度分野)

開催日: 令和7年1月16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: 53名(オンサイト参加11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)

15:00-15:05 趣旨説明

梅野宜崇 東京大学生産技術研究所 教授

15:05-15:55 ソフトマターの多階層シミュレーション:背景, 手法, そして応用例

古川亮 東京大学生産技術研究所 准教授

16:05-16:55 結晶性材料における力学応答の原子レベル観察とシミュレーションへの期待

栃木栄太 東京大学生産技術研究所 准教授

16:55-17:00 閉会の挨拶

第3回ワークショップ:力学の再構築(流体力学分野)

開催日: 令和7年3月5日(水)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: 121 名 (オンサイト参加 13 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)

15:00-15:05 趣旨説明

長谷川洋介 東京大学生産技術研究所 教授

15:05-15:55 量子アニーラを用いた移流拡散方程式求解の試み

深潟康二 慶応義塾大学理工学部 教授

16:05-16:55 Q-CAFE (quantum-computer aided fluid engineering) への誘い

久谷雄一 九州大学工学部航空宇宙工学科 准教授

16:55-17:00 閉会の挨拶

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 79 回 LES 研究会

開催日: 令和 6 年 5 月 14 日 (火) 14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「画像データから駆動される流れシミュレーション」

大島伸行 北海道大学

第 80 回 LES 研究会

開催日: 令和 6 年 7 月 12 日 (金) 14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「粗格子 LES へ向けた教師なし機械学習による SGS モデリング」

前島颯樹 東北大学

第 81 回 LES 研究会

開催日: 令和 6 年 9 月 3 日 (火) 14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「進行波状壁面変形を施したチャネル乱流における SGS モデルの評価および抵抗低減効果の検証」

難波江佑介 東京理科大学

第 82 回 LES 研究会

開催日: 令和 6 年 11 月 8 日(金)14:00-15:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「鉄道車両の床下の蛇行流れと最後尾車両の変動空気力に関する LES」

阿部巧 鉄道総合技術研究所

第 83 回 LES 研究会

開催日: 令和 7 年 1 月 14 日(火)15:00-16:30

場 所: Zoom によるオンライン会議

「Automatic development of turbulence control by machine learning and optimal control theory」

弓削田悠介 東京大学生産技術研究所

d) セミナー・講習会

第 19 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 17 回目の基礎編の利用講習会を開催した。

開催日: 令和 6 年 8 月 30 日(金)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: 8 名

FFX 講習会-Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)を用いたハンズオン

開催日: 令和 6 年 11 月 27 日(水)13:00~17:30, (ログイン等のサポート希望者:10:00~)

場 所: 東京大学生産技術研究所 中セミナー室 3(As 棟 3 階 As303・304)

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, 一般財団法人高度情報科学技術研究機構

参加者数: 9 名

Quantum Computing 講習会 -IBM Qiskit を用いたハンズオン

開催日: 令和 7 年 2 月 14 日(金)14:00~17:05

場 所: 東京大学生産技術研究所 佐藤文俊研究室

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

参加者数: 3 名

e) 共催・後援・その他

スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー2024

開催日: 令和 6 年 9 月 26 日(木)13:00~18:00

場 所: 神戸クリスタルタワー3 階 神戸クリスタルホール
主 催: 公益財団法人計算科学振興財団, 神戸商工会議所

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2024

開催日: 令和 6 年 12 月 2 日(月) 10:30~16:00
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 MANA, 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 17 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 6 年 12 月 20 日(金) 13:00~17:30
場 所: TKP 新橋カンファレンスセンター・ホール 14G, 並びに, Webinar 併用によるハイブリッド開催
主 催: スーパーコンピューティング技術産業応用協議会

第 8 回 CAE ワークショップ~CAE が創る快適な未来~

開催日: 令和 7 年 3 月 7 日(金) 13:00~17:20
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

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 2024

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 6 年 9 月 5 日(木)~6 日(金)
場 所: 神戸国際展示場 1 号館

第 11 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 6 年 10 月 24 日(木)・25 日(金)
場 所: 現地会場(THE GRAND HALL)およびオンライン(Zoom Webinars(ライブ配信), Slack (ポスター展示))によるハイブリッド開催

SC24

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 6 年 11 月 18 日(月)~21 日(木)

場 所: 米国ジョージア州アトランタ

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 6 年度は Vol. 39, Vol. 40 を発行した。

(1) Vol. 39

発 行 日: 令和 6 年 6 月

発行部数: 600 部

内容: 1 面 巻頭言「将来のスーパーコンピュータに対応したシミュレーション技術の開発を目指して」
2-3 面 開催報告: 第 1 回 HPC 産業応用拡大プロジェクトシンポジウム
4-5 面 センター所属メンバー研究紹介
6 面 活動報告: ワークショップ: 力学の未来

(2) Vol. 40

発 行 日: 令和 7 年 1 月

発行部数: 600 部

内容: 1 面 巻頭言「ポスト『富岳』時代のシミュレーション技術について議論—HPC および量子コンピューティングをテーマにワークショップを開催—」
2 面 開催報告: ワークショップ—工学における量子コンピューティングへの期待—
ワークショップ: 力学の再構築 (材料インフォマティクス分野)
3 面 開催報告: 第 8 回 HPC ものづくり統合ワークショップ
4-5 面 センター所属メンバー研究紹介
6 面 活動報告: 国際フロンティア産業メッセ 2024
国際会議 SC24
FFX 講習会—Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) を用いたハンズオン—

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

デジタルトランスフォーメーション(DX)による製造技術の革新に期待が高まっているが、製造現場での現物主義と人的資産崇拜の潮流が大きく変化することではなく、シミュレーション技術を活用した設計の革新には程遠い状況である。炭素繊維強化プラスチック(Carbon Fiber Reinforced Plastic, CFRP)製品開発の現場はその最たるもので、試作と試験を繰り返しながら、強度発現機構を見極めることなく経験的に設計諸元を定める行為が未だに横行している。その現状を打開し、炭素繊維強化プラスチックの強度発現機構を明らかにしたうえで設計の方法論を構築する、マルチスケールシミュレーション技術を開発している。特にフィラメントワインディング製法で製造される燃料タンクの開発に焦点を絞り、以下の研究開発を実施している。

(1) CFRP 製高圧水素燃料容器の開発

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である水素の活用を牽引する燃料電池自動車においては、高圧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 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。その解決策として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。設計に必須のマクロスケールモデル化への展開を行い、機械学習の枠組みで最適設計ソフトウェアを開発し、実容器の試作を通じてその有効性を検証した。

(2) 宇宙輸送機用 CFRP 製極低温推進薬タンクの開発

液化水素燃料充填時の熱衝撃による CFRP の損傷とマイクロクラックの貫通挙動を評価するためのマルチスケールシミュレーション手法を開発している。直径 5 m クラスの大型タンクの製造方法として、ドーム部と直胴部を個別に Automated Tape Laying などのファイバステアリング技術を用いて成形し、接合により一体化することを想定し、CFRP 材料の異方性を活用して接合部での漏洩を防止する最適設計と製造プロセスの最適化を実現するためのシミュレーション技術を開発している。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Yukihito Akita & Nobuhiro Yoshikawa: Fatigue life prediction for off-axis unidirectional carbon fiber reinforced thermoplastic specimens, considering the high hydrostatic pressure condition of the resin, September 2024, Advanced Composite Materials. <https://doi.org/10.1080/09243046.2024.2399920>

和文論文

- 1) 半谷禎彦, 鈴木巽, 天谷賢児, 吉川暢宏: 発泡アルミニウムへの繰り返し金型押込みによる波形

形状付与，2024年7月，塑性と加工，Vol. 65，No. 762，pp. 95-99．
<https://doi.org/10.9773/sosei.65.95>

- 2) 山本雄太，半谷禎彦，田中宏行，後藤悠，岡田賢二，鈴木孝明，吉川暢宏：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アップセット加圧の効果，2025年1月，軽金属，第75巻，1号，pp. 14-19. <https://doi.org/10.2464/jilm.75.14>

学会講演論文

- 1) 小泉草太，半谷禎彦，吉川暢宏：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熱圧着による作製時における接合温度の検討，2024年5月，軽金属学会第146回春期大会講演概要，pp. 153-154.
- 2) 坂口裕樹，半谷禎彦，岡田賢二，藤井英俊，吉川暢宏：X線CT画像を用いた機械学習によるポーラス化したA1050アルミニウムとSS400鋼接合体の分離強度予測，2024年5月，軽金属学会第146回春期大会講演概要，pp. 217-218.
- 3) 長竹真吾，半谷禎彦，吉川暢宏：突合せ接合したA1050/A6061アルミニウム合金プリカーサの加熱発泡直後のローラー成形，2024年5月，軽金属学会第146回春期大会講演概要，pp. 309-310.
- 4) 兼子結斗，半谷禎彦，吉川暢宏，ADC12ポーラスアルミニウムの連続発泡とプレス加工による形状付与，2024年5月，軽金属学会第146回春期大会講演概要，pp. 311-312.
- 5) 石貝拓磨，半谷禎彦，吉川暢宏，藤井英俊：A4045アルミニウムとSS400鋼の突合せ接合体のポーラス化による分離の検討，2024年5月，軽金属学会第146回春期大会講演概要，pp. 317-318.
- 6) 富田雄，半谷禎彦，吉川暢宏，水素化チタンとアルミナの焼結体を用いた摩擦攪拌法によるポーラスアルミニウム作製の効率化，2024年5月，軽金属学会第146回春期大会講演概要，pp. 369-370.
- 7) 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：ADC12ポーラスアルミニウムの多段階ローラー成形による形状付与，2024年5月，日本鋳造工学会第183回全国講演大会論文集，p. 29.
- 8) 石貝拓磨，半谷禎彦，小山真司，藤井英俊，吉川暢宏：A4045アルミニウム合金/SS400鋼摩擦攪拌接合体のポーラス化を利用した易分離，2024年9月，軽金属学会関東支部第10回若手研究者ポスター発表会 概要集，No. 2.
- 9) 坂口裕樹，長竹真吾，半谷禎彦，田中勇樹，岡田賢二，吉川暢宏：ローラー成形したA1050ポーラスアルミニウムのX線CT画像を用いた機械学習によるプラトー応力の予測，2024年9月，軽金属学会関東支部 第10回若手研究者ポスター発表会 概要集，No. 3.
- 10) 仲原大河，半谷禎彦，鈴木良祐，西田進一，森貞好昭，藤井英俊，吉川暢宏：双ロール鋳造によって作製した発泡剤シートを用いたA1050/C1100P接合体のポーラス化による易分離，2024年10月，日本鋳造工学会第184回全国講演大会 講演概要集，p. 96.
- 11) 山本凌雅，半谷禎彦，鈴木良祐，西田進一，森貞好昭，藤井英俊，吉川暢宏：双ロール鋳造で作製された発泡剤シートによるA1050/SS400接合体の発泡分離，2024年10月，日本鋳造工学会第184回全国講演大会 講演概要集，p. 97.
- 12) 山本雄太，半谷禎彦，小倉卓哉，森貞好昭，藤井英俊，吉川暢宏：ADC12ポーラスアルミニウムと

樹脂の摩擦圧接およびアップセット加圧時の樹脂含浸挙動のX線透過観察, 2024年10月, 日本
鑄造工学会第184回全国講演大会 講演概要集, p. 132.

- 13) 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/熱可塑性樹脂からなるサンドイッチ材の作製, 2024年10月, 日本鑄造工学会第184回全国講演大会 講演概要集, p. 133.
- 14) 兼子結斗, 半谷禎彦, 吉川暢宏: 3連続発泡とプレス加工によるADC12ポーラスアルミニウムの成形, 2024年10月, 日本鑄造工学会第184回全国講演大会 講演概要集, p. 134.
- 15) 岡田卓馬, 竹本真一郎, 吉川暢宏: 燃料電池自動車用高圧水素タンクの最適設計に関する研究, 2024年10月, [No. 24-67] 日本機械学会 第15回最適化シンポジウム2024(OPTIS2024) 予稿集, p. 19.
- 16) 鳥羽郁矢, 半谷禎彦, 藤井英俊, 吉川暢宏: A1050アルミニウム/SS400鋼摩擦攪拌接合体のポーラス化を利用した易分離化における接合速度の影響, 2024年11月, 軽金属学会第147回秋期大会講演概要, pp. 163-164.
- 17) 坂口裕樹, 長竹真吾, 半谷禎彦, 田中勇樹, 岡田賢二, 吉川暢宏: ローラー成形したA1050ポーラスアルミニウムのX線CT画像を用いた機械学習による圧縮強度予測, 2024年11月, 軽金属学会第147回秋期大会講演概要, pp. 437-438.
- 18) 石貝拓磨, 半谷禎彦, 小山真司, 藤井英俊, 吉川暢宏: A4045アルミニウム合金/SS400鋼摩擦攪拌接合体のポーラス化を利用した易分離における気孔率の影響, 2024年11月, 軽金属学会第147回秋期大会講演概要, pp. 455-456.
- 19) Eiichiro Mori, Tetsuya Matsuda, Naoki Morita, Masahiro Hojo, and Nobuhiro Yoshikawa: Interlaminar fatigue life prediction method for CFRP based on two-scale analysis and application to fan blade dovetails of jet engines, November 2024, Extended abstract of the 14th Asia Pacific Conference on Fracture Strength, A306.
- 20) Yukihiro Akita and Nobuhiro Yoshikawa: Fatigue life prediction for CFRTP specimens based on plastic strain energy of the resin component, November 2024, Extended abstract of the 14th Asia Pacific Conference on Fracture Strength, C104.
- 21) Ryotaro Mizuta, Eiichiro Mori, Tetsuya Matsuda, Masanori Hojo and Nobuhiro Yoshikawa: Two-scale thermal residual stress analysis for dovetails of CFRP fan blades, November 2024, Extended abstract of the 14th Asia Pacific Conference on Fracture on Strength, C110.
- 22) Eiichiro Mori, Tetsuya Matsuda, Chiharu Tsujikawa, Naoki Morita, Gai Kubo, Masahiro Hojo, Toshihiko Hosaka, Shinya Fukushima & Nobuhiro Yoshikawa: Two-Scale Tensile Analysis of Dovetail Joints for CFRP Fan Blades Considering Material Nonlinearity of Resins, January 2025, Proceedings of the IUTAM Symposium on Nonlinear Dynamics for Design of Mechanical Systems Across Different Length/Time Scales, pp. 281-292. https://doi.org/10.1007/978-3-031-72794-8_21
- 23) 竹本真一郎, 岡田卓馬, 吉川暢宏: 高圧水素容器の最適設計探索のための軸対称モデル高精度化, 2025年3月, 第16回日本複合材料会議(ICCM-16)講演論文集, 3A-01.
- 24) 岡田卓馬, 竹本真一郎, 吉川暢宏: 高圧水素複合容器の形状最適設計に関する研究, 2025年3

月, 第16回日本複合材料会議(JCCM-16)講演論文集, 3A-02.

総説・解説

- 1) 吉川暢宏:イノベーションと大規模事故, 2024 年 9 月, 生産研究, Vol. 76, No. 3, pp. 249-252.
- 2) 木村光男, 川畑友弥, 吉川暢宏, 本郷進:水素サプライチェーンを支える大型液化水素貯槽, 2024 年 10 月, ボイラ研究, 第 447 号, pp. 4-13.

(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) 「ATL 成形による極低温対応配管開発および金属製継手接着の技術開発」
- 3) 「メゾスケール解析とツースケール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クライテリアの検討」
- 4) 「高圧水素タンク向け CFRP 補強構造の研究」
- 5) 「材料異方性を活用した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構造の最適化に関する研究」
- 6) 「高圧水素パイプラインの安全性評価」

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

梅野宜崇研究室では、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・フィラ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) ポリマー疲労強度の粗視化分子動力学解析

ポリマー材料は構造材料としても広く用いられるようになってきており、その機械的特性発現および劣化メカニズムの解明が求められている。疲労は構造材料の破壊の多くを占める破壊形態であるが、ポリマーの疲労損傷のメカニズムについて分子レベルの知見がほとんどない。そこで、我々は粗視化分子動力学解析を用いて、繰返し負荷を受けるポリカーボネートの劣化メカニズムについて検討を行った。分子鎖の絡み合い度が大きいほど、繰返し負荷による分子構造の変化が顕著であり、それにより残留強度が著しく低下することが明らかとなった。また、分子鎖の回転半径が大きいほど、繰返し負荷による強度低下が抑えられることも分かった。このような知見は、疲労強度特性を改善するための分子構造設計を効率よく行うために極めて有用であると考えられる。

(2) 境界潤滑状態の粗視化分子動力学解析

摩擦によるエネルギー損失は、工業製品が稼働する際の総エネルギー損失のうちかなりの部分を占めるため、摩擦低減は喫緊の課題である。固体接触と流体潤滑の混在する境界潤滑状態のメカニズムは特に複雑とされており、その解明が求められている。我々は粗視化分子動力学解析により、ナノ結晶化を施した金属表面における潤滑油膜の挙動を調べた。油膜形成と剥離には垂直応力に応じて一定の時間を要すること、油膜剥離が断続的に起こる Stick-Slip 状態と、油膜剥離が起らずポリマーブラシ間でせん断が生じる Shear-Flow 状態が共存するような垂直応力範囲が存在すること、表面粗さを有する場合には油膜剥離が抑制され摩擦特性が向上する可能性があること、など境界潤滑状態に関する重要な知見が得られた。

(3) ナノ・マイクロ疲労現象の解明のための演繹-帰納統合マルチスケール解析

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解析が必要である。我々は、演繹的方法(ボトムアップ)と帰納的方法(トップダウン)による階層間接続を統合したマルチスケールモデルを提案している。本年度は、転位の自己組織化を支配する主要因の一つである転位拡散係数を演繹的に導出する方法として、複数のランダムウォークモデルを提案した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Byungwoon Kim, Chihiro Yasui, Masataka Abe, Hiroyuki Shima, Yoshitaka Umeno, and Takashi Sumigawa: Characteristic fatigue damage near the $\Sigma 3(111)$ coherent twin boundary in micron-sized copper specimen, *Materials Science and Engineering: A*, April 2024, Vol. 899, 146470.
- 2) Tatchaphon Leelaprachakul, Atsushi Kubo and Yoshitaka Umeno: Degradation of molecular structure and residual strength of polycarbonate under cyclic loading: Insights from coarse-grained molecular dynamics simulation, April 2024, *Computational Materials Science*, Vol. 240, 113028.
- 3) Atsushi Kubo, Emi Kawai, Takashi Sumigawa, Hiroyuki Shima and Yoshitaka Umeno: Dislocation random walk under cyclic deformation, *Physical Review E*, June 2024, Vol. 109, 065001.
- 4) Shizhe Deng, Atsushi Kubo, Yoshikazu Todaka, Yoshinori Shiihara, Masatoshi Mitsuhashi and Yoshitaka Umeno: Coarse-grained molecular dynamics simulations of nanoscale roughness effects on oil film delamination, *Tribology Letters*, June 2024, Vol. 72, 73.
- 5) Shizhe Deng, Atsushi Kubo, Yoshikazu Todaka, Yoshinori Shiihara, Masatoshi Mitsuhashi and Yoshitaka Umeno: Oil film formation and delamination process on nanostructured surfaces in boundary lubrication: a coarse-grained molecular dynamics study, July 2024, *Journal of Tribology*, Vol. 146, 072101.
- 6) Takashi Sumigawa, Nobutaka Kawakatsu, Akihiro Tobise, Kota Sugisaka, Yoshimasa Takahashi, Shigeo Arai, Masataka Abe, Hiroyuki Shima and Yoshitaka Umeno: Dislocation structures in micron-sized Ni single crystals produced via tension-compression cyclic loading, *Acta Materialia*, July. 2024, Vol. 277, 120208.

国際会議アブストラクト

- 1) Yoshitaka Umeno and Emi Kawai: Deduction-induction integrated multiscale simulation: dislocation pattern formation in fatigue, WCCM2024/PANACM2024 16th World Congress on Computational Mechanics and 4th Pan American Congress on Computational Mechanics, 2024.07.21-26, Vancouver, Canada.
- 2) Yoshitaka Umeno, Atsushi Kubo and Emi Kawai: Inductive and deductive scale-bridging in hierarchical multiscale models for dislocation pattern formation in metal fatigue, ICCES2024 The International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences, 2024.08.03-06, Singapore.
- 3) Yoshitaka Umeno, Emi Kawai, Tatchaphon Leelaprachakul and Ryoei Tsunoda: Coarse-grained molecular dynamics study of polycarbonate: effect of molecular structure on mechanical properties, MMM-11 2024 The 11th International Conference on Multiscale Materials Modeling, 2024.09.22-27, Prague, Czech Republic.
- 4) Emi Kawai, Chen Chen, Atsushi Kubo and Yoshitaka Umeno: Molecular dynamics simulation of

nanowire under cyclic loading: Effect of stacking fault energy, APCFS2024 Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength, 2024.11.25-29, Shimane, Japan.

- 5) Ryo Tanimura, Emi Kawai, Koichi Masuya, Chikako Takatoh, Akira Fukunaga and Yoshitaka Umeno: Reactive molecular dynamics simulation of chemical mechanical planarization: Comparison between silica and ceria abrasives, APCFS2024 Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength, 2024.11.25-29, Shimane, Japan.
- 6) Yoshitaka Umeno, Hiroyuki Shima, Emi Kawai, Atsushi Kubo and Takashi Sumigawa: Theoretical approaches to describe dislocation behavior in nano-micro fatigue, APCFS2024 Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength, 2024.11.25-29, Shimane, Japan.

学会講演論文

- 1) 河合江美, 陳晨, 久保淳, 梅野宜崇: 積層欠陥エネルギーが異なるナノワイヤーの疲労挙動に対する分子動力学解析, 2024年5月24日, 第9回マルチスケール材料力学シンポジウム, 出島メッセ, 講演論文集USB.
- 2) 増谷浩一, 高東智佳子, 福永明, 谷村瞭, 河合江美, 梅野宜崇: CMPにおける砥粒の分子動力学シミュレーション: セリア砥粒とシリカ砥粒の比較, 2024年9月4日～6日, 2024年度精密工学会秋季大会学術講演会, 岡山大学 津島キャンパス, 講演論文集USB.
- 3) 角田遼英, 河合江美, 山口健志, 池田智一, 大橋東洋, 及川雅隆, 坂庭慶昭, 梅野宜崇: 粗視化分子動力学解析によるCu₂O/エポキシ樹脂界面強度評価, 2024年10月18日～20日, 第37回計算力学講演会, トークネットホール仙台, 講演論文集USB.
- 4) 谷村瞭, 河合江美, 増谷浩一, 高東 智佳子, 福永明, 梅野宜崇: 化学機械研磨の反応分子動力学解析: シリカ砥粒とセリア砥粒の比較, 2024年10月18日～20日, 第37回計算力学講演会, トークネットホール仙台, 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) 挑戦的研究(萌芽) (代表)「ベイズ機械学習による無撞着マルチスケール解析法の構築と構造用ポリマー分子構造設計」
- 3) 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」
- 4) 基盤研究(B) (分担)「積雪期の交通安全を脅かす「そろばん道路」の発生機序解明と予知システムの開発」

民間等との共同研究

- 1) 「複合材料の付着特性シミュレーション」

2) 「研磨シミュレーション技術の構築」

受託研究

① 公的資金

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

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ー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) Motonori Nakamura, Fujihiro Hamba: Countergradient diffusion of turbulent heat flux in turbulent Rayleigh flow, January 2025, Physcal Review Fluids, Vol. 10, 014604.

国際会議予稿集

- 1) Fujihiro Hamba: Non-local eddy diffusivity model for turbulent scalar flux, June 2024, Proceedings of 13th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, P8.
- 2) Nobumitsu Yokoi: Non-equilibrium turbulence effects in dynamos and convection, November 2024, Proceedings of International Conference of Flow Dynamics (ICFD 2024), OS15-15.
- 3) Tingting Fang, Zhuchen Liu, Fujihiro Hamba, Yosuke Hasegawa: Non-local contributions of eddy viscosity and eddy diffusivity to the dissimilarity between turbulent momentum and heat transfer in a turbulent channel flow, December 2024, Proceedings of the 3rd Pacific Rim Thermal Engineering Conference, PRTEC-24220.
- 4) Nobumitsu Yokoi: Cross-interaction response effects in turbulent dynamos, December 2024, Proceedings of American Geophysical Union Meeting (AGU 2024), NG43B-2310.
- 5) Fujihiro Hamba: Analysis and modeling of non-local eddy diffusivity in turbulent flows, January 2025, Books of Abstracts Fractional Calculus Seminar Series, SISSA, International School of Advanced Studies, Trieste, Italy, p.7.
- 6) Nobumitsu Yokoi: Astrophysical and geophysical turbulence modelling based on a multiple-scale and response-function formulation, March 2025, Proceedings of Institute of Space-Earth Environmental Research Symposium (ISEE Symposium 2025), 3-5-4.

学会講演論文

- 1) Fang Tingting, Liu Zhuchen, 半場藤弘, 長谷川洋介: 非局所型渦拡散表現から見る乱流運動量輸送とスカラー輸送の非相似性について, 2024 年 5 月, 第 61 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, F124.
- 2) 半場藤弘: チャネル乱流における非局所渦拡散率, 2024 年 9 月, 日本物理学会第 79 回年次大会講演概要集, 18pE311-4.

(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」

大島まり研究室 バイオ・マイクロ流体力学

大島まり研究室は、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) 医用画像に基づく血管三次元形状モデリングと脳動脈中心線の統計形状解析

1D-0D 全身循環解析と 3D 局所血流解析を組み合わせたマルチスケール・フィジックスシミュレーションに資することを目的とし、医用画像に基づく患者個別の血管三次元形状モデリングおよび可視化システムの開発を行っている。再構築された血管モデルは、血行動態解析や術前評価に利用可能な解析精度と可視化性能を有しており、時系列画像に基づく血管構造の経時変化やステント留置後の血管形状の変形なども定量的に評価可能である。さらに、脳動脈系においては、血管中心線を抽出し、主成分分析 (PCA) による統計形状解析を実施することで、中心線の変形パターンを低次元空間において記述した。また、各中心線に対して曲率 (curvature) および捩率 (torsion) といった幾何パラメータを算出し、形状の幾何学的特徴を定量的に評価した。これらの統計的情報と幾何パラメータを融合することで、脳動脈形状の構造的変動を多面的に記述し得る解析基盤を構築している。加えて、大規模な医用画像データセットを効率的に処理するため、深層学習を用いた血管領域の自動セグメンテーション手法を導入しており、血管モデリングの高精度化と処理時間の短縮を両立させている。

(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、末梢側副血行路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) Chen Y., Kobayashi M., Yuhn C., & Oshima M.: "Development of a 3D vascular network visualization platform for one-dimensional hemodynamic simulation", *Bioengineering*, 11(4), 313. (2024).

国際会議予稿集

- 1) Feng J., Kobayashi M., Oshima M.: "Investigating of Smoothing Method for Surface Roughness on Wall Shear Stress in Blood Flow Simulation", 8th International Conference on Computational and Mathematical Biomedical Engineering (CMBE24) (2024).
- 2) To Chi Hang, Shigeki Yamada, Marie Oshima: "Quantitative Patient-Specific Analysis of Peripheral Collateral Flow Through Optimisation of Leptomenigeal Anastomosis Configuration", 8th International Conference on Computational and Mathematical Biomedical Engineering (CMBE24) (2024).
- 3) Takuya Tajima, Marie Oshima, Katsuyuki Hoshina, Yutaka Miura, Nobuhiko Mukai: "Analysis of Drug Behavior in Abdominal Aortic Aneurysm by Considering Random Force and Pulsation", IWAIT2024.

国際会議アブストラクト

- 1) Zhao H., Yu D., Oshima M., Lee Y.: "A Numerical Study on the Suppression of Vortex Shredding around a Cylindrical Structure Using Active and Passive Control Approaches", The 26th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2024) (2024)
- 2) Shigeki Yamada, Hirotaka Ito, Hironori Matsumasa, Satoshi Ii, Tomohiro Otani, Motoki Tanikawa, Chifumi Iseki, Yoshiyuki Watanabe, Shigeo Wada, Marie Oshima, Mitsuhiro Mase: "Automatic Quantitative Identification of Disproportionately Enlarged Subarachnoid-Space Hydrocephalus in iNPH Using Deep Learning Models", 33rd Joint Annual Meeting International Society for Magnetic Resonance in Medicine (ISMRM)-ESMRMB & ISMRT, 2024.5.7, Singapore.
- 3) Shigeki Yamada, Hirotaka Ito, Chifumi Iseki, Tomohiro Otani, Satoshi Ii, Yoshiyuki Watanabe, Shigeo Wada, Marie Oshima, Mitsuhiro Mase: "Exploring Next-Generation Hydrocephalus Imaging: Modeling Cerebrospinal Fluid Dynamics and Artificial Intelligence", Symposium Hydrocephalus 2024 Annual Meeting, The 16th Meeting of the Hydrocephalus Society, 2024.9.14, Nagoya.
- 4) Yan Chen, Masaharu Kobayashi, Yang Bai, Marie Oshima: "Geometry and Pattern Analysis of Cerebral Major Arteries in a Large-Scale Japanese MRA Study," 20th Interdisciplinary Cerebrovascular Symposium 2024 (ICS2024) (2024).

学会講演論文

- 1) 山田茂樹, 伊藤広貴, 松政宏典, 伊井仁志, 大谷智仁, 谷川元紀, 伊関千書, 渡邊嘉之, 和田成生, 大島まり, 間瀬光人: 「脳区域解析・脳脊髄液腔解析アプリによる病的脳萎縮とハキム病 (iNPH) の自動検出」, 第 33 回日本脳ドック学会総会, (2024).

- 2) 山田茂樹, 大谷智仁, 前田修作, 伊藤広貴, 岡田耕, 伊関千書, 谷川元紀, 渡邊嘉之, 伊井仁志, 和田成生, 大島まり, 間瀬光人:「シンポジウム・流れの MR 医学:4D Flow MRI による水頭症の脳脊髄液の流れ場」, 第 52 回日本磁気共鳴医学会大会, (2024).
- 3) 山田茂樹, 大谷智仁, 伊井仁志, 伊藤広貴, 岡田耕, 伊関千書, 谷川元紀, 渡邊嘉之, 和田成生, 大島まり, 間瀬光人:「シンポジウム・加齢による脳体積減少とハキム病における脳脊髄液の動態観測」, 第 67 回日本脳循環代謝学会学術集会, (2024).
- 4) 山田茂樹, 伊関千書, 伊藤広貴, 大谷智仁, 谷川元紀, 伊井仁志, 渡邊嘉之, 和田成生, 大島まり, 間瀬光人:「学術教育講演:脳循環代謝と認知症:脳の水の役割」, 第 43 回日本認知症学会学術集会, (2024).
- 5) 上菌開人, 陳琰, 大島まり:「脳主幹動脈の形状と血行動態に関する数値解析的検討」, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, (2024).
- 6) 祇園真志, 陳琰, 大島まり:「数値解析による血管形状の二次流れに与える影響の検証」, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, (2024).
- 7) 山田茂樹, 河野浩人, 伊藤広貴, 大谷智仁, 伊井仁志, 伊関千書, 谷川元紀, 和田成生, 大島まり, 吉田和道, 渡邊嘉之, 間瀬光人:「脳循環血液流量の加齢性変化における性差」, STROKE2024 第 49 回日本脳卒中学会学術集会, (2024).
- 8) 山田茂樹, 大谷智仁, 伊井仁志, 伊藤広貴, 伊関千書, 谷川元紀, 渡邊嘉之, 和田成生, 大島まり, 間瀬光人:「全頭蓋内環境の脳脊髄液動態モデル」, 第 25 回日本正常圧水頭症学会, (2024).

総説・解説

- 1) 大島まり:「予測医療のための医用画像×マルチスケール・シミュレーション×AI」, CISS News, Vol. 40, (2024).

(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、主にタンパク質などの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、そしてこのような電子構造の特徴が物性に大きな差異を与えてい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、毎年度性能や機能をアップデートしている。今年度は、単精度計算による精度検証の研究、およびリスタート機能を中心に SCF 計算のコードの整備を行った。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。今年度はリスタート機能を中心に再整備した。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主成分解析法の開発

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、主成分解析法を分子軌道に適用する方法を提案し、タンパク質の大規模正準分子軌道に適用した。

(5) セルラーゼ炭水化物結合モジュールの電子構造に関する研究

Trichoderma reesei のセルロース分解酵素(セルラーゼ)にある炭水化物結合モジュール(CBM)はセルロースを認識し吸着する機能を持つ。CBM にはマンノース(Man)が結合可能で、O-マンノシル化される場所は Thr1, Ser3, Ser14 の 3 か所であり、それぞれ CBM の吸着性が変化する。本研究では、CBM 及び Man が結合した CBM に対し、電子状態がどのように変化するかを明らかにした。

(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株式会社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「第1量子化法に基づく化学反応シミュレータ」を研究開発し、公開した。来年度も継続する。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Hideo Takahashi, Tatsuya Tomaru, Toshiyuki Hirano, Saisei Tahara, Fumitoshi Sato: Chemical reaction simulator on quantum computers by first quantization (II) - Basic treatment: Implementation, 2024, J. Chem. Theory Comput., 20, 9290-9320.
- 2) Tatsuya Tomaru, Hideo Takahashi, Toshiyuki Hirano, Saisei Tahara, Fumitoshi Sato: Chemical reaction simulator on quantum computers by first quantization — Basic treatment: Theoretical, 2024, AIP Advances, 14, 125306: 1-24.
- 3) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Principal component analysis of energies derived from canonical molecular orbital calculations of proteins, 2025, AIP Conference Proceedings, 3269, 020005:1-4.

国際会議アブストラクト

- 1) Toshiyuki Hirano, Fumitoshi Sato: Acceleration and evaluation of accuracy by single-precision operation in the third-generation density functional calculations method, Sep. 26, 2024, ICCMSE2024, Greece, virtual.

学会講演論文

- 1) 平野敏行, 佐藤文俊: 第三世代密度汎関数計算法の計算性能向上に関する研究, 2024 年 9 月 18 日, 第 18 回分子科学討論会, 京都.
- 2) 甲野宏明, 平野敏行, 田原才静, 佐藤文俊: セルラーゼ炭水化物結合モジュールの電子構造に関する研究, 2024 年 9 月 18 日, 第 18 回分子科学討論会, 京都.
- 3) 高橋英男, 戸丸辰也, 平野敏行, 田原才静, 佐藤文俊: 第一量子化に基づく量子コンピュータ上の最小要素 *ab initio* シミュレータの開発, 2024 年 9 月 20 日, 第 18 回分子科学討論会, 京都.

総説・解説・紀要

- 1) 鄭浩傑, 平野敏行, 田原才静, 佐藤文俊: 正準分子軌道法による IGF-1 受容体に結合したインスリン及びアナログの電子構造の研究, 2024 年, 生産研究, 76 巻 2 号, 139-146.
- 2) 植弘雄斗, 平野敏行, 田原才静, 佐藤文俊: アミロイド線維を形成する異常型およびその正常型ヒトプリオンの電子構造の研究, 2024 年, 生産研究, 76 巻 2 号, 147-152.

(2)研究プロジェクト

民間等との共同研究

- 1) 「量子コンピューティングによる量子化学計算のアルゴリズムとコードの研究開発」

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、およ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。

2024 年度は、機械学習と最適制御理論を組み合わせることにより、新しい乱流制御アルゴリズムの構築の探索を行なった。具体的には、ベイズ最適化により最適制御で用いるコスト関数の形を最適化することにより、従来提案されたコスト関数に対して、より高い制御効果が得られる可能性を示した。

(2) 観測データと数値シミュレーションの融合による熱流動場の最尤推定

乱流中に何らかの物質が放出されると、濃度プルームは乱流運動によって大きく変形、分断される。従って、放出源の下流に濃度センサを配置し、濃度を計測すると極めて間欠的なシグナルが得られる。このような複雑なシグナルに基づく物質放出源の特定は、重要、かつ挑戦的な課題である。

2023 年度から引き続き、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。また、高解像度シミュレーションにより得られた膨大な流れ場、および濃度場情報を学習することにより、未知の流れ場や濃度場を推定するアルゴリズムを提案し、その推定性能を実証した。

(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 年度から引き続き、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。また、液膜塗布における基板の引き抜き速度や引き抜きモードを自動的に最適化することにより、実験的に最適な引き抜き速度を求めるシステムを構築し、その有効性を検証した。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Kaneko, K., Hasegawa, Y., Hayakawa and T., Suzuki, H.: “Numerical investigation of the induction of chaotic micromixing using the vibration switching”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 135, Issue 15, 154702 (2024). doi: 10.1063/5.0192387
- 2) Liu, M., Matsubara, K. and Hasegawa, Y.: “Adjoint-based shape optimization for radiative transfer in porous structure for volumetric solar receiver”, *Applied Thermal Engineering*, Vol. 246, 122899 (2024). doi: 10.1016/j.applthermaleng.2024.122899
- 3) Liu, M. and Hasegawa, Y.: “Adjoint-based shape optimization for compressible flow based on volume penalization method”, *Engineering with Computers*, Sept. 30th (2024). doi: 10.1007/s00366-024-02058-z
- 4) Liu, M. and Hasegawa, Y.: “Inverse design optimization of the spatial distribution of emissivity for radiative transfer problems based on adjoint method”, *Solar Energy Materials & Solar Cells*, Vol. 277, 113085 (2024). doi: 10.1016/j.solmat.2024.113085
- 5) Kaneko, K., Tsugane, M., Sato, T., Hayakawa, T., Hasegawa and Y., Suzuki, H.: “Vibration Induced Flow Facilitating Immunoagglutination for Rapid Detection and Quantification of Nanoparticles”, *Sensors and Actuators B*, Volume 430, 1 May 2025, 137312. doi: 10.1016/j.snb.2025.137312

国際会議アブストラクト

- 1) Yugeta, Y. and Hasegawa, Y.: "Development of feedback control law for wall turbulence by combining optimal control theory and Bayesian optimization", Thirteenth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP13), Montreal, Canada, June 25-28, 2024.
- 2) Yugeta, Y. and Hasegawa, Y.: "Automatic exploration of cost function for suboptimal control of turbulent flow by machine learning", European Drag Reduction and Flow Control Meeting (EDRFCM 2024), Turin, Italy, September 10-13, 2024.
- 3) Tomizawa, S., Kumar, V., Nakajima, H., Li, Z. and Hasegawa, Y.: "Direct comparison between dissipative particle dynamics simulation of blood flow and live imaging in zebrafish vasculature", APS DFD Meeting 2024, Salt Lake City, USA, November 24-26, 2024.
- 4) Yang, L., and Hasegawa, Y.: "Reconstruction of the scalar source based on limited noisy measurements by Wasserstein generative adversarial networks priors", Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC) 2024, Honolulu, USA, December 15-19, 2024.
- 5) Fang, T., Liu, Z., Hamba, F. and Hasegawa, Y.: "Non-local contributions of eddy viscosity and eddy diffusivity to the dissimilarity between turbulent momentum and heat transfer in a turbulent channel flow", Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC) 2024, Honolulu, USA, December 15-19, 2024.
- 6) Guan, F., Liu, M. and Hasegawa, Y.: "Dissimilar heat transfer enhancement in a flow between parallel porous plates with an upstream disturbance at low reynolds numbers", Pacific Rim Thermal

Engineering Conference (PRTEC) 2024, Honolulu, USA, December 15-19, 2024.

- 7) Liu, M. and Hasegawa, Y.: "Shape optimization for compressible flows based on volume penalization method and adjoint method", Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC) 2024, Honolulu, USA, December 15-19, 2024.
- 8) Chen, D. and Hasegawa, Y.: "Topology optimization for enhancing conjugate heat transfer in pin fin heat exchanger", Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC) 2024, Honolulu, USA, December 15-19, 2024.
- 9) Osawa, T., Onishi, R., Dominik, H., Xu, H., Liu, Z., Tsukahara, T. and Hasegawa, Y.: "Scalar Source Estimation based on Concentration Measurements by a Mobile Robot in Wind Tunnel Experiment", Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC) 2024, Honolulu, USA, December 15-19, 2024.

学会講演論文

- 1) Fengbo Guan, Ming Liu, Xu Han, Yosuke Hasegawa: Dissimilar heat transfer enhancement by a travelling wave-like disturbance induced between parallel porous plates with an upstream obstacle, 第 61 回日本伝熱シンポジウム, 神戸, 2024 年 5 月 29 日-31 日.
- 2) Di Chen, Prashant Kumar, Yosuke Hasegawa: Topology optimization for conjugate heat transfer in laminar flow: The effects of the thermal conductivity ratio of solid and fluid, 第 61 回日本伝熱シンポジウム, 神戸, 2024 年 5 月 29 日-31 日.
- 3) Ming Liu, Yosuke Hasegawa: Optimization of the spatial distribution of the emissivity to enhance the thermal absorption efficiency of porous structures for volumetric solar, 第 61 回日本伝熱シンポジウム, 神戸, 2024 年 5 月 29 日-31 日.
- 4) Tingting Fang, Zhuchen Liu, Fujihiro Hamba, Yosuke Hasegawa: 非局在性渦拡散表現からみる乱流運動量輸送とスカラー輸送の非相似性について, 第 61 回日本伝熱シンポジウム, 神戸, 2024 年 5 月 29 日-31 日.
- 5) 富澤駿, Vivek Kumar, 中嶋洋行, Zhen Li, 長谷川洋介: ライブイメージングを活用した散逸粒子動力学によるゼブラフィッシュ体内血行動態解析, 第 9 回血管生物医学会若手研究会, 文京区, 2024 年 6 月 14 日-15 日.
- 6) Yaroslav Revera, Linghui Yang, Yosuke Hasegawa: Prediction of 2D airflow in different geometries by using Generative Adversarial Networks, 日本流体力学会 年会 2024, 仙台, 2024 年 9 月 25 日-27 日.
- 7) 富澤駿, Vivek Kumar, 中嶋洋行, Zhen Li, 長谷川洋介: ライブイメージングを活用した散逸粒子動力学法によるゼブラフィッシュの分岐血管における血行力学解析, 日本流体力学会 年会 2024, 仙台, 2024 年 9 月 25 日-27 日.
- 8) 弓削田悠介, 長谷川洋介: 機械学習による乱流最適制御のコスト関数自動探索, 日本流体力学会 年会 2024, 仙台, 2024 年 9 月 25 日-27 日.
- 9) Yang Linghui, 高林一貴, 長谷川洋介: 複雑流れにおけるスカラー源探索のための最適センサ配置, 日本流体力学会 年会 2024, 仙台, 2024 年 9 月 25 日-27 日.

- 10) 陳迪, 長谷川洋介:ピンフィンヒートシンクにおける共役熱伝達向上のトポロジー最適化, 日本流体力学会 年会 2024, 仙台, 2024 年 9 月 25 日-27 日.
- 11) 野口雄司, Wang Hanzhi, 大澤崇行, Prakash Ravi, 永田直勝, 遠藤睦也, 吉田晃, 長谷川洋介:3D プリント造形品表面におけるディップコーティング成膜シミュレーションとその検証, 日本流体力学会 年会 2024, 仙台, 2024 年 9 月 25 日-27 日.
- 12) 張本宇辰, 肖遥, 長谷川洋介:壁面温度に基づく 2 次元円柱周りの流れの推定, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, 東京, 2024 年 12 月 11 日-13 日.
- 13) 上藤諒, 亀谷幸憲, 長谷川洋介, 山出吉伸, 飯田明由, 加藤千幸:流れの特性を考慮した深層学習に基づくサロゲートモデルを用いたボックスファンの性能予測, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, 東京, 2024 年 12 月 11 日-13 日.
- 14) Ming Liu, Zhuchen Liu, Chisachi Kato, Yosuke Hasegawa:Discriminator for identifying an under-resolved flow field and its applications to a novel turbulence model for a wall-bounded flow, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, 東京, 2024 年 12 月 11 日-13 日.
- 15) 遠藤匠, 劉竺辰, 劉明, 加藤千幸, 長谷川洋介:敵対的生成ネットワークを用いたラージエディシミュレーションにおける壁モデルの構築, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, 東京, 2024 年 12 月 11 日-13 日.

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 特別研究員奨励費(代表)「炭酸ガス燃料化のための太陽集熱器トポロジー最適化」
- 2) 基盤研究(B)(代表)「乱流伝熱面トポロジー最適化とその実証実験」
- 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)(分担)「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」
- 5) 基盤研究(B)(分担)「血管-上皮相互作用による酸素交換場形成の共通原理の解析」

民間等との共同研究

- 1) 「乱流制御による流体輸送配管損失の低減に関する共同研究」
- 2) 「熱交換器の伝熱面形状最適化に関する共同研究」
- 3) 「複雑伝熱面を有する熱交換器の実験評価に関する共同研究」
- 4) 「流体機器内部の抵抗低減に関する共同研究」
- 5) 「金属積層造形に係るプロセス最適化に関する共同研究」
- 6) 「トポロジー最適化を活用したファン及びインペラ最適化に関する共同研究」
- 7) 「輸送機械の抵抗低減に関する共同研究」
- 8) 「電気自動車充電スタンドの充電装置の冷却に関する共同研究」

受託研究

①公的資金

- 1) (国研) 科学技術振興機構 (JST) 研究成果最適展開支援プログラム (A-STEP) 「非相似伝熱促進機構を適用した航空機用エンジン高温部品の開発」
- 2) 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、エネルギー材料、有機無機ハイブリッド材料などの先進材料を研究対象としてきた。令和6年度においては以下の研究を行った。

(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6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。以上の研究を通し、層間化合物の安定性を予測可能な原理を明らかにした。さらに、9,000種類以上の層間化合物に関するバンド構造、電子構造、結晶構造などをデータベース化し公開した。

(2) スペクトルと機械学習を利用した新規材料解析手法の開発

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。

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てきた。これまでに有機分子で同手法を実証してきたが、令和6年度においては固体にも利用可能であることを明らかにし、さらに実験スペクトルでも同様な手法が利用可能であることを明らかにした。

また、記述子として分子の構造などを用いるのではなく、分子を記述する文字列(SMILES)を利用する新規な手法を提案した。同手法を用いることで安定な分子構造を得ることなく、スペクトルを予測することが可能となった。また、機械学習をもちいて方位依存性を予測可能なモデルの構築も達成した。

(3) 有機無機界面の電子構造解析

材料中で界面は重要な役割を果たしている。特に近年では、無機結晶と有機化合物がつくる界面が、接着やハイブリッド材料中で重要であり、多くの研究が行われている。一方で、その様な有機無機界面の解析は容易ではない。

令和6年度においては、実験グループと共同研究を行い、有機無機界面における界面接着強度とその電子構造、さらに分子構造との相関性を調べた。その結果、実験スペクトルで得られたわずかなス

ペクトル変化が、界面の端面修飾が変わったことにより生じ、その結果、力学特性が大きく変化するメカニズムが導かれた。

(4) 化学結合解析手法 (COOP diagram) のコード開発と実装

物質の中で化学結合は重要な役割を果たしている。また、DFT 計算など電子構造を計算する手法は広く普及している。一方で、それら普及している DFT 計算コードの多くでは、化学結合の詳細を理解することが困難な場合が多い。特に、固体物理の分野では平面波が広く用いられ、そこから局在した軌道に起因する化学結合の情報を導くことは容易ではない。

そこで、令和 6 年度においては、数値基底関数を用いる DFT 計算コード、FHI-aims において、詳細な化学結合解析が可能な共有結合ダイアグラム (Crystal overlap population diagram) を計算するための解析コードを開発した。同手法はすでに公開され、FHI-aims の最新版に実装されている。FHI-aims は開発が継続的に行われており、我々が開発した COOP コードが標準的な化学結合解析手法として普及することが期待される。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) K. Shibata and T. Mizoguchi: “A message passing neural network for predicting dipole moment dependent core electron excitation spectra”, *Digital Discovery*, 3 (2024), 649-653.
- 2) I. Takahara, K. Shibata, and T. Mizoguchi: “Crystal orbital overlap population based on all-electron ab initio simulation with numeric atom-centered orbitals and its application to chemical-bonding analysis in Li-intercalated layered materials”, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering (MSMSE)*, 32 (2024), 055028-1-20.
- 3) I. Takahara, F. Uesugi, K. Kimoto, K. Shibata, and T. Mizoguchi: “Toward the Atomic-Level Analysis of Ground-State Electronic Structures of Solid Materials via Prediction from Core-Loss Spectra: A Computational Study in Si”, *The Journal of Physical Chemistry C*, 128 (2024), 13500-13507.
- 4) P.-Y. Chen, K. Shibata, K. Hagita, T. Miyata, and T. Mizoguchi: “Predicting ELNES/XANES spectra by Machine Learning with Atomic Coordinate-independent Descriptor and Further application to ground state electronic structure”, *Micron*, 187 (2024) 103723-1-7.
- 5) N. Kawaguchi, K. Shibata, and T. Mizoguchi: “Band structure database of layered intercalation compounds with various intercalant atoms and layered hosts”, *Scientific Data*, 11 (2024) 1244-1-10.

和文論文

- 1) 柴田基洋, 溝口照康: 「ELNESの理論計算と機械学習」, 顕微鏡, Vol. 59, No. 2, 74-81.

国際会議アブストラクト

- 1) Teruyasu Mizoguchi: “From modelling to generation: EELS and Materials Development”, Italy, 3 Sep. 2024.
- 2) Teruyasu Mizoguchi: “Unlocking the Potential of EELS and XAFS with Machine Learning”, Big Data

and Machine Learning in Microscopy MLM24, Kanazawa, Ishikawa, 17 Sep. 2024.

- 3) Teruyasu Mizoguchi: “Generative AI for Microscopy”, EM-summit 2024, Tsukuba, 22 Oct. 2024.
- 4) Teruyasu Mizoguchi: “Machine learning for EELS/XAFS and materials generation”, Matsue, Shimane, ALC 2024, Nov. 2024.

学会講演論文

- 1) 溝口照康:機械学習と第一原理計算による物質の構造解析と探索, CAMMフォーラムビジョンセンター浜松町, 東京, 14 June 2024.
- 2) 溝口照康:機械学習と計測・計算技術の融合による物質解析と探索, 三菱ケミカル講演会, 横浜, 21 June 2024.
- 3) 溝口照康:物質のシミュレーションおよび計測における生成AI・機械学習の活用, Qunasysセミナー, Online, 25 Sep. 2024.

(2)研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 基盤研究(S)分担者「局所的イオンダイナミクスに基づく高イオン伝導体の創出」

民間等との共同研究

- 1) 国内素材メーカー「マテリアルズインフォマティクスに関する研究」
- 2) 国内素材メーカー「エネルギー材料開発に関する研究」

受託研究

①公的資金

- 1) (国研)科学技術振興機構(JST)CREST 主たる共同研究者「原子分解能観察によるソフト/ハード界面の接着・破壊機構の解明」
- 2) (国研)科学技術振興機構(JST)GTeX グループリーダー「軽量・小型・大容量を特徴とするリチウム空気電池の開発」
- 3) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO) 燃料電池・水素技術開発プロジェクト

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を開発する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. ここではヤ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) J. A. Guevara, K. Sekido, J. Inoue: "Digital holographic microscope for high spatial and temporal resolution in situ observation of dynamic phenomena of metals", Applied Optics, 63 (2024) pp. 5356-5367.

- 2) L. Qiao, J. Inoue: "Excellent high temperature mechanical properties of Fe₂Ni₂CrAl_x (x= 0.9 to 1.3) multi-principal elements alloys", Materials Science and Engineering: A, 912 (2024) 146978.
- 3) S. Noguchi, J. Inoue: "Bayesian inverse inference of material properties from microstructure images", Computational Materials Science, 245 (2024) 113306.
- 4) M. Zhang, K. Hibi, J. Inoue: "Highly accurate and efficient potential for bcc iron assisted by artificial neural networks", Physical Review B, 110 (2024) 054110.
- 5) S. Gong, M. Zhang, J. Inoue: "In-situ electron channeling contrast imaging of local deformation behavior of lath martensite in low-carbon-steel", Acta Materialia, 280 (2024) 120337.
- 6) L. Qiao, J. Zhu, J. Inoue: "Machine learning assisted design of Fe-Ni-Cr-Al based multi-principal elements alloys with ultra-high microhardness and unexpected wear resistance", Journal of Materials Research and Technology, 33 (2024) 8222-8231.

国際会議予稿集

- 1) Shuang Gong, Junya Inoue: In-situ Electron Channeling Contrast Imaging of Local Deformation Behavior of Lath Martensite in Low-Carbon-Steel, September 2024, MSE 2024.
- 2) Shuang Gong, Junya Inoue: Multi-Scale Analysis of Lath Boundary Sliding during Plastic Deformation of Lath Martensite In Low-Carbon-Steel, October 2024, MS&T24.
- 3) Junya Inoue and Satoshi Noguchi: Deep Generative Model for Reproducing Microstructure of Low-Carbon Steel During Continuous Cooling, October 2024, MS&T24.
- 4) Meng Zhang, Shuang Gong, and Junya Inoue: Atomic Simulations Investigate the Substructure Boundary Sliding in Lath Martensite Steel by Using an Accurate Artificial Neural Networks Assistant Potential, October 2024, MS&T24.

学会講演論文

- 1) 井上純哉, 野口聖史: 深層生成モデルを用いた双方向型PSP関連モデル, 2024年10月, 日本金属学会2024年秋期(第174回)講演大会.
- 2) 龔爽, 井上純哉: マルチスケール変形解析によるラスマルテンサイトの特異な変形機構の解明, 2024年10月, 日本金属学会2024年秋期(第174回)講演大会.
- 3) 中神利華, 野口聖史, 井上純哉: 深層生成モデルを用いた双方向型PSP関連推定モデルの開発, 2024年10月, 日本金属学会2024年秋期(第174回)講演大会.
- 4) 劉暢, 井上純哉: 物理正則ニューラルネットワークを用いたマルチフェーズフィールドモデルのデータ同化, 2024年10月, 日本金属学会2024年秋期(第174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ボジネス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 CO₂ 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) Ken Takahashi, Ryoza Ooka, Atsuyoshi Kurosaki: Seasonal threshold to reduce false positives for prediction-based outlier detection in building energy data, 1 May 2024, Journal of Building Engineering, Volume 84, 108539.
- 2) Chao Lin, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Cédric Flageul, Youngseob Kim, Yang Zhang, Karine Sartelet: Impact of solid road barriers on reactive pollutant dispersion in an idealized urban canyon: A large-eddy simulation coupled with chemistry, 4 June 2024, Urban Climate, Volume 55, 101989.
- 3) Chao Lin, Ryoza Ooka, Hideki Kikumoto, Youngseob Kim, Yang Zhang, Cédric Flageul, Karine Sartelet: Impact of gas dry deposition parameterization on secondary particle formation in an urban canyon, 4 June 2024, Atmospheric Environment, Volume 333, 120633.
- 4) Jia Tian, Ryoza Ooka: Evaluation of solar energy potential for residential buildings in urban environments based on a parametric approach, 1 July 2024, Sustainable Cities and Society, Volume 106, 105350.
- 5) Xiang Wang, Chaoyi Hu, Hideki Kikumoto, Hongyuan Jia, Keisuke Nakao, Ryoza Ooka: Data extension of high-resolution wind speed database by fusing meteorological observation and local objective analysis data with POD-LSE, September 2024, Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics Volume 252, 105812.

国際会議予稿集

- 1) Ken Takahashi, Hiroyuki Ichikawa Ryoza Ooka: Explainable AI framework for Model Predictive Control in Energy Management Systems, June 2024, ASHRAE Annual Conference 2024.
- 2) Jia Tian, Ryoza Ooka: Effect of urban morphology on solar energy potential for buildings based on deep learning algorithms, August 2024, IBPC 2024.

国際会議アブストラクト

- 1) Ken Takahashi, Hiroyuki Ichikawa, Shintaro Ikeda, Ryoza Ooka: Interpretable Reinforcement Learning Control for Battery Storage in Grid-Interactive Communities, June 2024, Enerstock 2024.
- 2) Koki Miyano, Ken Takahashi, Shintaro Ikeda, Ryoza Ooka: Study on Interpretability of Energy Optimization Control using XAI, September 2024, ASim 2024.

学会講演論文

- 1) Jia Tian, Ryoza Ooka :Effect of urban morphology on solar energy potential for buildings in urban environments, 2024年9月, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 2) 宮野航綺, 高橋健, 市川裕幸, 大岡龍三: AIによるエネルギー最適化制御の説明性に関する研

究(その1)単体建物におけるエネルギー最適化制御の検討, 2024年9月, 日本建築学会大会学術講演梗概集.

- 3) 高橋健, 宮野航綺, 市川裕幸, 池田伸太郎, 大岡龍三: AIによるエネルギー最適化制御の説明性に関する研究(その2) XAIによるAIの意思決定の解釈, 2024年9月, 日本建築学会大会学術講演梗概集.
- 4) Jia Tian, Ryozo Ooka: Effect of urban morphology on solar energy potential for buildings based on deep learning algorithms, 2024年9月, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.
- 5) 高橋健, 市川裕幸, 池田伸太郎, 大岡龍三: エネルギー管理システムにおけるモデル予測制御の説明可能なAI, 2024年9月, 空気調和・衛生工学会大会学術講演論文集.

(2) 研究プロジェクト

科研費による研究

- 1) 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」
- 2) 基盤研究(A)「デジタル情報—AI—IoT を結合した汎用エネルギーシステムプラットフォームの構築」

民間との共同研究

- 1) 鹿島建設株式会社「再エネ熱対応ヒートポンプシステムにおける制御高度化技術の開発」

受託研究

① 公的資金

- 1) (国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)「デジタルツインを活用した再エネ熱面的利用システムの見える化ツール／導入効果評価シミュレーター／最適運用エミュレーターの開発」

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ヤ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) ガラス形成物質の緩和ダイナミクスの研究

ガラスは日用品から先端材料まで, 我々の生活に欠かせない材料であり, また, 地球を構成する主要鉱物(橄欖石など)も広義のガラス物質に含まれる. 本年度は, 特にガラス物質の緩和現象に着目し, フランス国立土木学校のアナエル・ルメートル教授と共同研究を展開してきた. 主な成果は以下の通りである.

- (i) シリカガラスは実用ガラスの基盤として極めて重要であるにもかかわらず, これまでその緩和メカニズムが十分に解明されてこなかった. トポロジカルな欠陥の再定義とその運動の定量的同定により, シリカ型(ストロング)ガラスの構造緩和の物理的実態を明らかにする取り組みを進めている.
- (ii) 動的不均一性はフラジヤイル型ガラス形成液体に普遍的に現れ, ガラス転移の本質に関わる現象として, 過去数十年にわたり多くの研究が行われてきたが, 現在でも十分に理解されていない. 十分なサイズかつ過冷却度の高い典型的モデル系の固有状態の系統解析により, 動的不均一性の物理的実体を明確にするとともに, それに基づく統一的描像の確立に向けた取り組みを進めている.

なお, (i)および(ii)ともに, 現段階では成果の一部を公表に向けて準備中である.

(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

粒子-流体ハイブリッドシミュレーション法を用いて, 流体力学的相互作用が重要な影響を及ぼす可能性のあるサスペンション系の動的問題について研究を行っている. この手法は, 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挙動の詳細解析を可能とするため, 近年大きな発展を遂げている. 本年度も, 前年度に引き続き, 非ブラウン粒子(≡粉体)懸濁液のレオロジーと, 濃厚コロイド懸濁液における流体力学的相互作用の効果に焦点を当てた研究を展開した. 特に, 前者では, 通常为非圧縮溶媒と仮想的な圧縮溶媒を用いた比較シミュレーションにより, 非圧縮性が懸濁液のマクロ物性に及ぼす影響を明らかにし, 後者では, 前年度に示した近接場流体効果をさらに各種モデル系に拡張して検討した.

(3) バクテリア懸濁液の非線形レオロジー

自己推進性を有する微生物などの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起因して, 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ため, “アクティブマ

ター”分野として大きな関心を集めている。本年度は、特にクラミドモナス様(puller 型)微生物の異常レオロジー、有限サイズ効果、および表面相互作用に焦点を当て、直接流体力学シミュレーションにより研究を展開した。また、閉じ込め効果については、東京大学の実験グループと共同で、スイマー間の流体力学的相互作用による衝突過程のモデル化について、機械学習を援用して取り組んでいる。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Takahiro Kanazawa and Akira Furukawa: Microrheology of active suspensions, June 2024, Soft Matter, Vol. 20, 5527-5537.
- 2) Tomoharu Terayama and Akira Furukawa: Heterogeneous solvent dissipation coupled with particle rearrangement in shear-thinning non-Brownian suspensions, July 2024, Soft Matter, Vol. 20, 6714-6722.
- 3) Junpei Noji and Akira Furukawa: Impact of Hydrodynamic Interactions on Structural Relaxations in Dense Colloidal Suspensions: Helping the Cage Breakage, February 2025, Journal of the Physical Society of Japan, Vol 94, 023801-1-5.

国際会議予稿集

- 1) Haruki Hayano and Akira Furukawa: Higgs Centre Workshop, The Physics of Self-Organising Active Matter, July 2024.
- 2) Haruki Hayano and Akira Furukawa: Distinct Rheological Behavior between Pusher and Puller Suspensions, The 8th International Soft Matter Conference, July 2024.
- 3) H. Hayano and A. Furukawa: Revealing the Mechanism of Anomalous Rheology in Microswimmer Suspensions, International Active Matter Workshop, January 2025.
- 4) Akira Furukawa: Shear-thinning in Supercooled Liquids, IIS UTokyo SYMPOSIUM No.122 – Soft and Liquid Matter Physics: Past, Present and Future, March 2025.
- 5) Haruki Hayano and Akira Furukawa: Revealing the Mechanism of Anomalous Rheology in Microswimmer Suspensions, IIS UTokyo SYMPOSIUM No.122 – Soft and Liquid Matter Physics: Past, Present and Future, March 2025.
- 6) Junpei Noji and Akira Furukawa: Influence of Hydrodynamic Interactions on Relaxation Dynamics of Dense Colloidal Suspensions, IIS UTokyo SYMPOSIUM No.122 – Soft and Liquid Matter Physics: Past, Present and Future, March 2025.

学会講演論文

- 1) 野地隼平, 古川亮: 濃厚コロイド懸濁液のダイナミクスにおける変位場相関から見た流体効果, 2024年9月, 日本物理学会 第79回年次大会.
- 2) 早野陽紀, 古川亮: puller型マイクロスイマー分散系における異常レオロジー, 2024年9月, 日本物理学会 第79回年次大会.

- 3) 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10月, レオロジー討論会.
- 4) 早野陽紀, 古川亮:puller型マイクロスイマー分散系における異常レオロジー, 2024年10月, レオロジー討論会.
- 5) 古川亮:過冷却液体におけるストークス=アインシュタイン則の破れ, 2024年10月, レオロジー討論会.
- 6) 古川亮:過冷却液体におけるStokes-Einstein則の破れ, 2024年10月, 東京大学物性研短期研究会 ガラスに関連する分野の最先端研究(東大物性研).
- 7) 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近接場流体力学的相互作用, 2024年10月, 東京大学物性研短期研究会(東大物性研).
- 8) 早野陽紀, 古川亮:マイクロスイマー懸濁液の異常レオロジー効果に関するシミュレーション研究, 2024年11月, 第1回ソフトマター若手研究会(東大物性研).
- 9) 早野陽紀, 古川亮:マイクロスイマー懸濁液の異常レオロジー効果に関するシミュレーション研究, 2024年12月, 第38回分子シミュレーション討論会(姫路).
- 10) 寺山智春, 古川亮:非ブラウン懸濁液のthinningにおける溶媒散逸と粒子運動, 2024年12月, 第12回ソフトマター研究会(大阪大学).
- 11) 野地隼平, 古川亮:濃厚コロイド懸濁液の緩和における流体力学的相互作用:変位場相関の解析, 2024年12月, 第12回ソフトマター研究会(大阪大学).
- 12) 早野陽紀, 古川亮:直接流体シミュレーションによるマイクロスイマー懸濁液の異常レオロジー研究, 2024年12月, 第12回ソフトマター研究会(大阪大学).
- 13) 古川亮:ソフトマターの多階層シミュレーション:背景, 手法, そして応用例, 2025年1月, ワークショップ:力学の再構築.
- 14) 寺山智春, 古川亮:圧縮性・非圧縮性モデル溶媒における非ブラウン粒子懸濁液の比較シミュレーションによる非圧縮性効果の研究, 2025年3月, 日本物理学会 2025年春季大会(オンライン).

(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」

受託研究

- 1) (公財)池谷科学振興財団 単年度研究助成「ガラス材料における非線形レオロジー現象の俯瞰的理解」
- 2) (公財)日本板硝子材料工学助成会 研究助成「シリカ型ガラス形成液体の緩和メカニズムの解明」

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や理論計算による検証が不可欠である。令和 6 年度は化合物半導体中の転位構造・積層欠陥構造の解析、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破面構造解析、Ni 合金中の析出物の構造解析などを実施した。特に 4H-SiC の積層欠陥構造解析において、原子分解能観察とハイブリッド汎関数法による理論計算を組み合わせた手法を採用し、詳細な原子構造と電子状態を評価した。

(2) 電子顕微鏡内その場機械試験システムの開発

本研究グループでは、微小電気機械システム(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。本年度は電極数を増やした MEMS デバイスを作製し、その動作試験を実施した。電極の接触圧や MEMS デバイス上の試料形状の最適化を図り、本実験システムが原子分解能透過型電子顕微鏡内において安定的に荷重負荷実験が実施可能であることが実証された。本 MEMS デバイスをベースに加熱機構や電圧印可機構を実装し、高温や電圧印可下での荷重負荷試験の実現を目指した研究開発を進めている。

(3) その場機械試験による金属－セラミックス界面の剥離実験

金属－セラミックス界面は耐熱コーティングや電子デバイス電極などに用いられており、使用中の剥離現象による機能喪失がしばしば問題となっている。本研究では、金属－セラミックス界面の剥離プロセスの解明のため、Cu-Al₂O₃ をモデル界面として透過型電子顕微鏡内で荷重負荷試験を実施することにより界面剥離挙動の直接観察実験を実施した。実験の結果、剥離に伴い Cu 層内もしくは Cu-Al₂O₃ 界面に亀裂が生じることが明らかとなり、その挙動は剥離速度と相関性を有することが示唆された。今後は、破面の原子構造解析やより高分解能でのその場過重負荷試験を実施し、剥離プロセスの原子レベルにて明らかにすることを計画している。

(1) 研究成果一覧

欧文論文

- 1) Yuta Aoki, Hiroshi Masuda, Eita Tochigi, Hidehiro Yoshida: Overcoming the intrinsic brittleness of high-strength Al_2O_3 - GdAlO_3 ceramics through refined eutectic microstructure, October 2024, Nature Communications Vol. 15, 8700. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-53026-6>.
- 2) Mingen Sou, Shun Kondo, Takaaki Sato, Eita Tochigi, Naoya Shibata, Yuichi Ikuhara: Atomic-scale observations of dislocation junction formation and decomposition processes in gold, December 2024, Scripta Materialia Vol. 258, 116505. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2024.116505>.

国際会議アブストラクト

- 1) Eita Tochigi: Atomic scale observations of notch tips under tensile stress, September 2024, TimeMan 2024, Antwerpen, Belgium.
- 2) Eita Tochigi, Takaaki Sato, Minjian Sou, Naoya Shibata, Yuichi Ikuhara: Atomic scale characterization of deformation and fracture phenomena using a MEMS-based in situ STEM loading system, October 2024, ECI: Nanomechanical Testing in Materials Research and Development IX, Sicily, Italy.
- 3) Eita Tochigi, Takaaki Sato, Minjian Sou, Naoya Shibata, Yuichi Ikuhara: Methodology of atomic resolution in situ straining testing and application studies, November 2024, APCFS 2024, Matsue, Japan.

(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(C)「2D マテリアルの転送機構の微視的機構を解明する in-situ TEM 観察」

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」

菊本英紀研究室 複雑系環境制御工学

都市や建築空間の快適性・安全性・持続可能性を高めるためには、環境の変化を正確に把握し、それに基づいて適切な設計や制御を行うことが重要である。本研究室では、空気・熱・風環境を主な対象として、解析技術の開発とその応用を通じて、環境設計や制御の最適化を目指している。現在取り組んでいる主な研究テーマは以下のとおりである。a) 空気・熱・風環境のシミュレーションおよびセンシング技術の開発、b) 機械学習やデータサイエンスに基づく環境シミュレーションとセンシングの融合、c) 都市気候解析を基にした持続可能な都市・建築の設計支援、d) 快適性とエネルギー効率を両立する革新的な環境制御や建物外皮の開発、e) アーバンエアモビリティ(ドローン)の安全利用に向けた風環境予測・制御。これらのテーマに関して、特に本年度については、以下のような成果を得た。

(1) 複数室住宅における自然換気への風向の影響評価

風向は建築物内の自然換気性能に大きな影響を与えるが、その影響を多室空間で定量的に評価した研究は少ない。本研究では、実験住宅を用いた 29 日間にわたる現地測定および数値流体解析を通じて、16 方位の風向が 2 室の換気回数 (ACH) に与える影響を評価した。その結果、風向によって ACH は最大 2.6 倍の差が生じることが分かった。また、隣室を加えることで ACH が平均 83 % 向上することが確認され、その効果は風向に依存することも明らかにした。本成果は、多開口・多室構成建物における効率的な自然換気設計に貢献する。

(2) 都市高解像度風速データベースの長期拡張手法の開発

都市域における風環境の長期的・高解像度な評価には、観測と数値解析の両立が不可欠であるが、それぞれに時間・空間解像度の制約がある。本研究では、気象庁の高解像度局地客観解析 (LA) データと、長期の AMeDAS 観測データを融合するため、Proper Orthogonal Decomposition (POD) と Linear Stochastic Estimation (LSE) を組み合わせたデータ融合手法を開発した。LA データの POD 分解と AMeDAS との時系列関係から得られたモデルにより、東京湾周辺都市域における 10 分間隔・高空間分解能の風速データベースを長期にわたって再構成することに成功した。ドップラーライダーによる独立観測との比較により、提案手法の高い精度と拡張性が実証された。

(3) LES による単体建物周辺のピーク風速評価と不確かさ分析

歩行者の安全性確保の観点から、建物周辺に生じる最大瞬間風速 (ピーク風速) の正確な評価は重要であるが、従来手法では経験係数に依存せざるを得なかった。本研究では、都市境界層中に置かれた単体建物モデルを対象に、Large-Eddy Simulation (LES) を用いて歩行者高さにおけるピーク風速や関連統計量 (ガストファクター、ピークファクターなど) を直接的に評価した。実スケールとの相似性を考慮した統計処理により、各統計量の空間分布と不確かさを明らかにし、平均風速とピーク指標の関係も定量化した。これにより、風環境評価における LES の活用と信頼性向上に資する知見を得た。

(1)研究成果一覧

欧文論文

- 1) Hong Hu, Hideki Kikumoto, Ryoza Ooka: Effect of wind direction on natural ventilation in a multiple-room house via field measurements and numerical simulations, *Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics*, 248, 105718, 2024.5. doi: 10.1016/j.jweia.2024.105718.
- 2) Xiang Wang, Chaoyi Hu, Hideki Kikumoto, Hongyuan Jia, Keisuke Nakao, Ryoza Ooka: Data extension of high-resolution wind speed database by fusing meteorological observation and local objective analysis data with POD-LSE, *Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics*, 252, 105812, 2024.9. doi: 10.1016/j.jweia.2024.105812.
- 3) Xiang Wang, Hongyuan Jia, Keisuke Nakao, Dun Zhu, Chaoyi Hu, Hideki Kikumoto: Decadal assessment of local climate utilizing meteorological analysis and observation data: Thermal environment changes in the Tokyo area, *Sustainable Cities and Society*, 120, 106138, 2025.2. doi: 10.1016/j.scs.2025.106138.

和文論文

- 1) 菊本英紀, 大風翼, 池谷直樹, 富永禎秀: Large-Eddy Simulationを用いた単体建物モデル周辺歩行者高さにおけるピーク風速統計量の評価と不確かさ分析, *日本建築学会環境系論文集*, 第90巻第827号, 35-44, 2025.1. doi: 10.3130/aije.90.35.

国際会議予稿集

- 1) Hideki Kikumoto, Hongyuan Jia, Jo-Hendrik Thysen, Twan van Hooff: Ventilation flow reconstruction in a simplified airplane cabin model using measured mean velocities and physics-informed neural networks, *RoomVent 2024*, Stockholm, Sweden, 2024.4.
- 2) Hideki Kikumoto, Yichen Wang, Bingchao Zhang, Hongyuan Jia: Enhanced wind velocity and pressure measurement around buildings using physics-informed neural networks: A case study with a two-dimensional urban street canyon, *IBPC 2024*, Toronto, Canada, 2024.7.
- 3) Hong Hu, Hideki Kikumoto: Natural ventilation direction control in buildings with fluid diode plates: A field measurement study, *IBPC 2024*, Toronto, Canada, 2024.7.

学会講演論文

- 1) Xiang Wang, Keisuke Nakao, Hongyuan Jia, Hideki Kikumoto: Study on utilization of local objective analysis data for microclimate prediction (Part 3) High-resolution analysis of long-term thermal environmental changes in Tokyo Bay region, *日本建築学会大会(関東)*, 学術講演会梗概集, 40905, 2024.8.
- 2) 胡超億, 賈鴻源, 菊本英紀: 物理情報に基づくニューラルネットワークを用いた建物周辺気流解析の効率化(その1)2次元単体建物モデル周辺の多風向平均気流の推定, *日本建築学会大会(関東)*, 学術講演会梗概集, 40585, 2024.8.
- 3) 王逸辰, 賈鴻源, 菊本英紀: 物理情報に基づくニューラルネットワークを用いた環境計測の高度化

に関する研究(その1)2次元都市キャニオンの流れ場の高解像度推定, 日本建築学会大会(関東), 学術講演会梗概集, 40584, 2024.8.

- 4) 岩渕まひろ, 林超, 菊本英紀:防風フェンスの開口配置が後流に与える影響に関する数値的検討, 日本建築学会大会(関東), 学術講演会梗概集, 40583, 2024.8.
- 5) 菊本英紀, 賈鴻源:逆解析による室内空気汚染モニタリングのためのセンサー配置最適化に関する研究(第1報)随伴濃度を用いた単一センサーに関する最適化手法の提案, 空気調和・衛生工学会大会(佐賀), 学術講演論文集, G-31, 2024.9.
- 6) 賈鴻源, 菊本英紀:逆解析による室内空気汚染モニタリングのためのセンサー配置最適化に関する研究(第2報)2次元室内モデルを用いた最適化手法の有効性検証, 空気調和・衛生工学会大会(佐賀), 学術講演論文集, G-32, 2024.9.
- 7) 胡紅, 菊本英紀:建物模型に設置したFluid Diode Plateの自然換気制御性能に関するCFD解析, 空気調和・衛生工学会大会(佐賀), 学術講演論文集, G-7, 2024.9.
- 8) 王逸辰, 胡超億, 賈鴻源, 菊本英紀:物理情報に基づくニューラルネットワークを用いた2次元都市キャニオンの平均風速・風圧分布の高解像度推定, 風工学シンポジウム講演梗概集, 第28巻, pp. 108-115, 2024.12.
- 9) 岩渕まひろ, 林超, 菊本英紀:防風フェンスの様々な開口パターンが後流に及ぼす影響に関する検討, 風工学シンポジウム講演梗概集, 第28巻, pp. 59-64, 2024.12.
- 10) Xiang Wang, Hongyuan Jia, Chaoyi Hu, Keisuke Nakao, Hideki Kikumoto: Prediction of upper-level wind velocity by fusing local objective analysis data and near-surface meteorological observations, 風工学シンポジウム講演梗概集, 第28巻, pp. 34-43, 2024.12.

(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」
- 2) 挑戦的研究(萌芽)「物理制約機械学習モデルに基づく環境空気流動の超解像センシング」

革新的シミュレーション研究センター 令和 6 年度 活動報告 Vol. 17

この資料の転載、引用などをご遠慮ください。
本資料に関するお問い合わせは下記へお願いします。

編集・発行 東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター

〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1

E-mail: office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp

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

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

