



## 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

### シミュレーションを機軸とした新たな力学体系の構築に係る先進学術の研究開発の推進

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20年1月に東京大学生産技術研究所附属研究施設として設置され、平成25年4月と平成30年4月の2度の改組を経て、1)世界をリードする先端シミュレーションソフトウェアの研究開発、2)研究開発成果の社会への普及、3)シミュレーションソフトウェアを開発・利活用できる人材育成のための教育基盤の強化を目的に活動を行ってきました。そして、令和5年4月に、新メンバー5名を加え、総勢16名のメンバーで4期目6年間の活動に入りました。本ニュースレターでは、研究分野の拡大を図った新CISSの概要について、特に新メンバーの研究内容について厚く紹介させていただきます。

第4期CISSでは、上記の設置目的の礎の上に、先進学術の推進基盤となる力学のコアコンピテンスを再構築し、先端シミュレーションソフトウェアの研究開発の基礎となる、分野を超えた学術の連携強化に努めたいと考えています(下図参照)。これまでに開発した先端シミュレーションソフトウェアと獲得したデータのオープンサイエンス化を行い、HPC・データ科学融合のシミュレーションソフトウェアの開発と利活用に長けた人材の育成と教育基盤の強化に取り組み、第3期までの成果を社会に還元する取り組みをさらに進めます。

上記の先端シミュレーションソフトウェアの研究開発は、これまで主にCISSが推進する、多くの文部科学省プロジェクトの中で進めてまいりました。令和2年度から実施してきました文部科学省「『富岳』成果創出加速プログラム」「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」(課題責任者加藤千幸

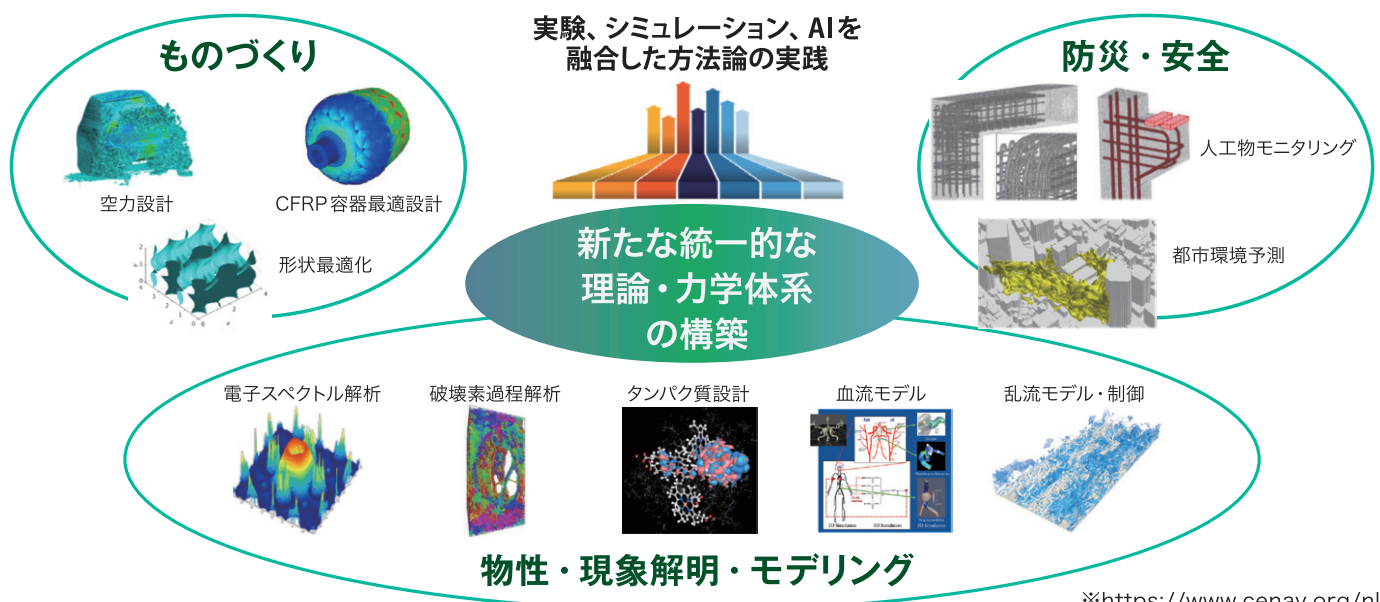
教授)は、令和4年度までで、多くの成果を創出して終了しました。詳細は計算工学ナビ<sup>※</sup>などで紹介されておりますので、そちらを参照いただくと幸いです。

令和5年4月からは、これに引き続いて、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」(課題責任者加藤千幸教授)を、代表実施機関として推進しています。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、研究成果を幅広いものづくり分野に展開に貢献するこのプロジェクトを中心にして、CISSの事業を展開するための拠点を形成し、コミュニティのさらなる拡大を図っていきたくと考えております。

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」にあります。このような先端シミュレーション技術の開発と活用をCISSが実現すべきビジョンと考え、CISSに所属する多彩な研究分野に渡るメンバー間の強力な連携の下で、先進学術に係る研究開発、研究成果の社会還元や人材育成等に取り組んでまいります。

引き続き、CISSの活動に対しご理解とご支援を賜りたく、よろしくお願い申し上げます。

センター長・教授 吉川暢宏



※<https://www.cenav.org/nld/>

# 第4期革新的シミュレーション研究センターの紹介

革新的シミュレーション研究センター(以下、革新センター)では、力学のコアコンピテンスの再構築と飛躍的な強化を図り、持続可能な社会構築の要請に応えることを目的として、以下に示す研究教育活動を行います。これにより、材料開発から廃棄に至るまでを一気通貫でシミュレーションするための最新技術の研究開発を行い、研究資産の凡化と公開によりものづくり分野でのデジタルトランスフォーメーションの促進に貢献します。

## 活動方針

### 1 先進学術の推進

力学のコアコンピテンスの再構築と飛躍的な強化および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の基盤技術を開発します。

- 1) 産業界のニーズを考慮した、HPC・計測データを活用した力学モデルの高度化によるHPC設計技術に係る研究開発と理論・実験・計算を融合したデータ科学による、分野横断型の新たなものづくり方法論の提示
- 2) 大型国プロの推進や産学官コンソーシアム等との連携による、産業競争力の強化に貢献するHPC・データ科学融合のシミュレーション技術の研究開発
- 3) 革新センターを中核とした研究グループによる、ものづくり分野に係るプロジェクトの推進

### 2 研究成果の社会還元

開発した先端的シミュレーションソフトウェアと獲得したデータのオープンサイエンス化と社会普及を実施します。

- 1) 産業界を中心としたユーザーコミュニティとソフトウェアベンダーを巻き込んだ、HPC・データ科学融合のシミュレーションソフトウェアの新たな利活用法の提示
- 2) 革新センターのメンバーの連携による分野横断型の、シンポジウムやセミナーの開催、様々なコンテンツを用いた成果の発信等の、シミュレーションソフトウェアの産業利用促進のための取組みの強化
- 3) ユーザーコミュニティを形成し、自発的なソフトウェアの機能強化を進める、スパコン「富岳」や革新センターに整備された計算機等のスパコンを中心に据えた、産学が連携する環境の強化

### 3 人材育成および課題抽出

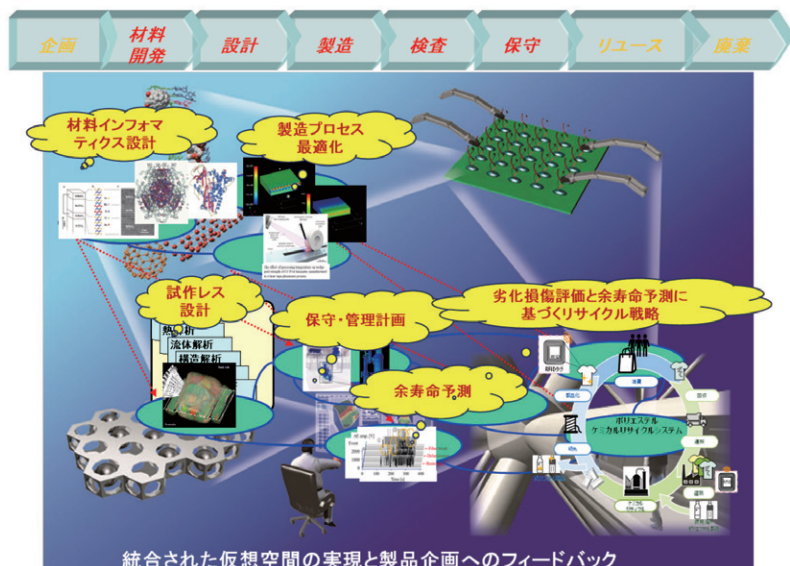
HPC・データ科学融合のシミュレーションソフトウェアを開発・利活用できる人材育成と教育基盤の強化および社会的課題を抽出します。

- 1) 革新センターの特色を活かした、ハンズオンセミナーやサイドバイサイドトレーニングによるリカレント教育の実施
- 2) シミュレーションソフトウェア開発の実務に携わる研究者のキャリアアップの支援
- 3) 社会的課題の抽出できる、産業界を中心としたユーザーコミュニティとの強力な連携体制の構築

## 力学のコアコンピテンスの再構築と飛躍的な強化および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の基盤技術の開発

### 課題解決と価値創造に貢献するシミュレーション技術

素材開発から保守までを統合した仮想空間で一気通貫で検討し課題の解決策を提示  
計測データとの同化による予測の高精度化と人工物の性能と信頼性の向上の実現



## ❖ 構成メンバー 一覧

### 熱・流体物理

教授：加藤千幸 熱流体システム制御工学	教授：長谷川洋介 界面輸送工学	客員教授：小野謙二 大規模計算機工学
教授：半場藤弘 流体物理学	教授：大島まり 数値流体力学	
教授：大岡龍三 都市エネルギー工学	准教授：菊本英紀 複雑系環境制御工学	

### 物質・材料機能

教授：吉川暢宏 マルチスケール固体力学	教授：梅野宜崇 助教：久保 淳 ナノ・マイクロ機械物理学
教授：溝口照康 ナノ物質設計工学	
准教授：栃木栄太 ナノスケール材料強度学	教授：井上純哉 鉄鋼冶金インフォマティクス

### 確率・量子論的計算科学

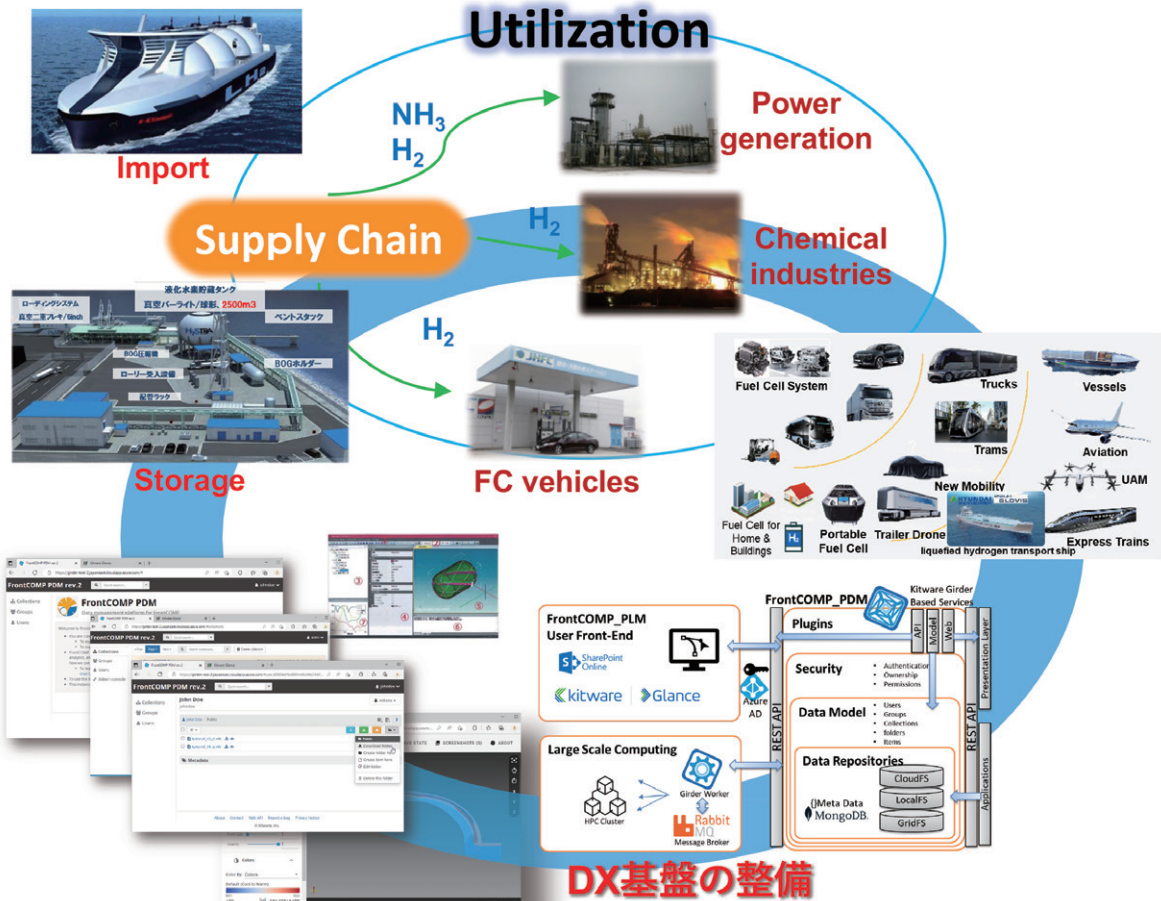
教授：佐藤文俊 計算生体分子科学	准教授：長井宏平 成熟社会インフラ学
	准教授：古川 亮 複雑流体物理学

# 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

先進力学モデルの凡化を促進するデジタルエンジニアリングプラットフォームを活用した水素サプライチェーン構築を基軸とする、グリーンイノベーションを加速するDX基盤の整備とリカレント教育および実証研究への展開基盤の整備を実施しています。

## 水素サプライチェーン構築を基軸としたグリーンイノベーションへの貢献

水素を媒体とするエネルギーサプライチェーンを強化し、エネルギーインフラ機器およびモビリティの信頼性と経済性を両立させ、社会受容性も向上させたうえでグリーンイノベーションの具現化に貢献するため、先進力学シミュレーションソフトウェアを活用したDX基盤を構築します。

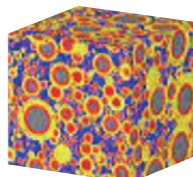
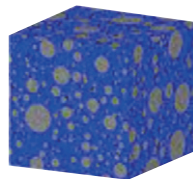
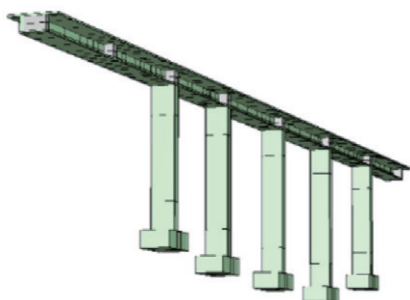


## 高度力学シミュレーションリカレント教育

整備したデジタルエンジニアリング基盤を用いた、工学の広い分野に必要なシミュレーション技術に関する横断的セミナーによる、高度シミュレーションを担う人材のリカレント教育を実施します。

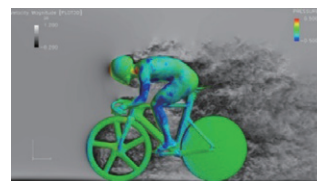
[内容]

- 材料強度・破壊分野 (ハード・ソフトマターの力学)
- 土木・建築分野 (構造物の寿命予測)
- マテリアル分野 (材料物性)
- 熱流体分野 (流れ解析・可視化)

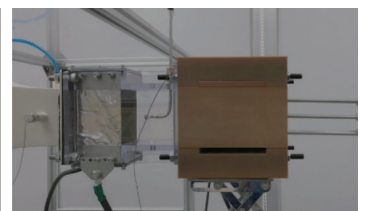
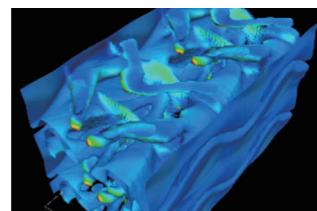


## HPC・データ科学的設計手法の普及

文部科学省プロジェクト等で開発した先端的シミュレーションソフトウェアの産業応用を加速するための、大規模解析と解析結果の分析を柱とする実践コースを実施します。



(提供：豊橋技術科学大学 飯田明由教授)



# 新メンバー研究紹介

井上 純哉  
教授



構造材料の特性は、結晶構造や分子構造だけでなく、結晶粒の大きさや形状、粒界の性質、転位等の欠陥の密度や分布など、様々なスケールの組織因子によって左右されています。そのため、構造材料を理解し、その特性予測するには、材料組織の幾何学的特徴を捉える手法や、支配的となる物理現象の抽出が必要です。

## 材料組織の幾何学的特徴量の抽出 - 効率的なPSP連関の抽出を目指して -

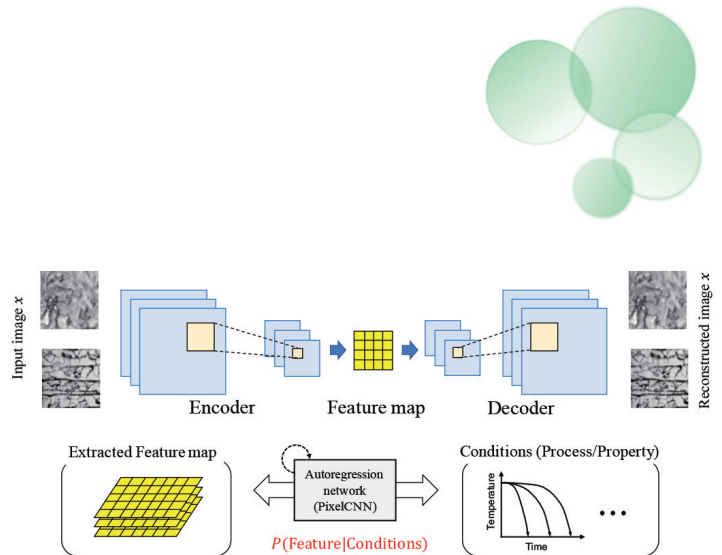
鉄鋼材料の結晶組織は多種多様であり、その形状は非常に複雑です。そのため、その分類や定量評価は長年の経験を積んだ研究者にしかできない、所謂「匠の技」となっています。

本研究では、熟練した技術者が鉄鋼組織を観察し理解する際の思考プロセスを、深層学習モデルを用いてモデル化することで、鉄鋼材料を構成する相の抽出と同時に、プロセスと組織形態、組織形態と特性の連関(PSP連関)を効率的に抽出する枠組みを提供することを可能にしています。

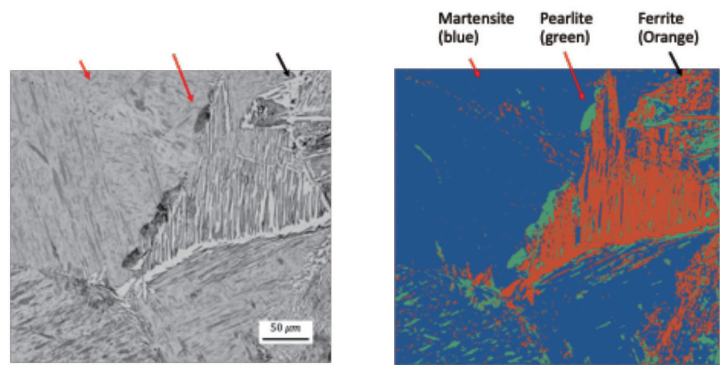
## 計算材料科学と データ駆動科学の融合

構造材料の結晶組織の形成やその力学特性を予測するため、材料内で生じる現象を再現する手法としてPhase-Field法や分子動力学法といった計算材料科学の手法が開発されてきました。しかし、実際の材料では、様々なスケールの現象が複合的・競合的に生じており、単一のモデルで記述することは困難です。そのため、世界的には個々のスケール・現象をボトムアップ式に連結する所謂「ICME (Integrated Computational Materials Engineering)」と呼ばれる手法の開発が試みられています。しかし、すべての現象を忠実に再現することは難しく、特に複雑な合金である鉄鋼材料は、その再現がほぼ不可能な領域となっています。

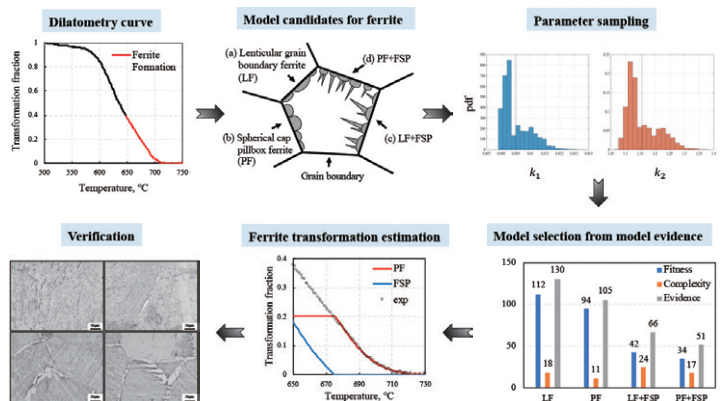
本研究では、計算材料科学の手法にデータ駆動科学の手法を適用することで、実験データを活用することで効率的に現象を支配する物理現象を抽出し、組織や特性を予測することを目指しています。



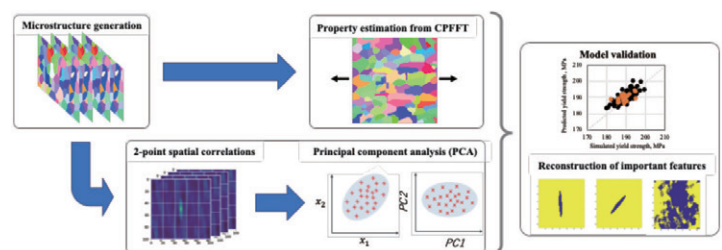
PSP 連関を抽出する深層学習モデルの例



鉄鋼材料の内部構造の一例  
(右) 光学顕微鏡写真 (左) 自動分類結果



REMCMC (Replica Exchange Markov chain Monte Carlo) 法と JMAK (Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov) 法によるフェライトの形態予測

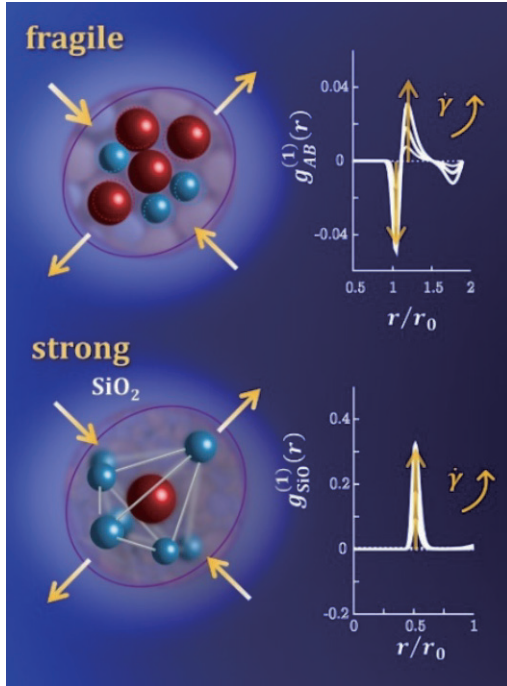


結晶塑性有限要素法とスパース全探索法による DP (Dual Phase) 鋼の特性に対する組織因子の抽出

古川 亮  
准教授



## ■ ガラス形成液体の非ニュートン性は何が決めているか？



フラジャイル液体とストロング液体の変形様式の違い

流れが速くなればなるほど、液体の流動抵抗が弱くなるシアニングは、様々なソフトマター系で観測される普遍的な非ニュートン流動現象です。ガラス形成液体についても例外ではなく、顕著なシアニングを観測しますが、その仕組みはよく理解されていません。

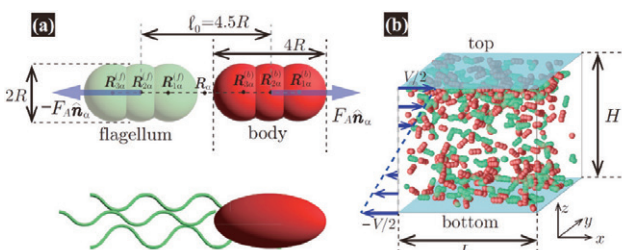
分子動力学シミュレーションを用いた本研究によって、ガラス形成液体では、粒子構造が外部流動によりごくわずかに歪むだけで、粘性が劇的に減少しうるとを説明し、その結果から流れの速さと粘性の関係を定量的に予測する理論式を導きました。さらに、異なる二つのクラス(フラジャイルとストロング)に属するガラス形成液体では、両クラスにおける緩和メカニズムの違いに由来して、レオロジー応答が異なることを明らかにしました。この差異は、シアニングの仕組みの質的な差異として反映されると考えられます(フラジャイルの場合には、有効体積分率の減少として、ストロングの場合には、励起エネルギーの減少として)。導かれた理論予測は実際の分子動力学シミュレーションや実験とよく一致するだけでなく、観測量のみで閉じた表現であるので、現実問題に容易に適用できるという利点があります。

ガラス形成液体に見られるシアニングは、しばしば、シアバンドや破壊といったより複雑な現象へ発展し、系の流動特性や力学特性を劇的に変更することが知られています。そのため、ガラス形成液体が示すシアニングの発生機構を理解することは、ガラス材料の生産・加工といった産業上の応用だけでなく、溶岩流のような大規模スケールで発生する火山現象などを理解する上でも重要です。本研究が、このような、より複雑な非線形現象までを含めた幅広い理解の一助となることを期待しています。

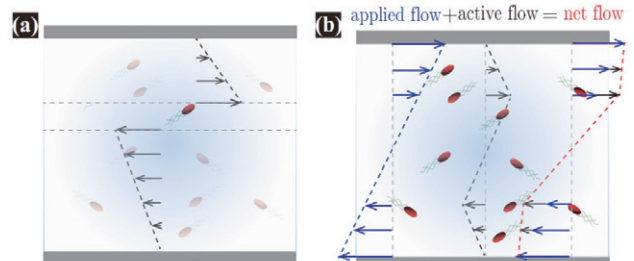
## ■ 流体力学的相互作用が決める微生物系の泳動状態

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します。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多大な関心を集めてきました。大腸菌のような微小な泳動粒子の希薄懸濁液では、低剪断率領域で顕著な粘性低下を示し、しばしば、粘性0の超流動状態に至るという驚くべき現象を観測します。この問題について、様々な理論モデルが提案されましたが、いまだに明快な理解は得られていません。

泳動粒子の自己推進力は、常に周囲の溶媒自由度を強く励起しており、溶媒を介した流体力学的相互作用は、泳動粒子間の動的結合を強く促進していると考えられます。本研究では、この点に着目し、モデル微生物系の流体力学的シミュレーションを行い、系全体の泳動状態が、構成要素間の流体力学的相互作用により自己組織的に決定される、という全く新しいメカニズムを提案しました。今後は、さらに研究を進め、粘性変化の定量的な予測を目指します。このような取り組みは、流体粘性を自在にコントロールするマイクロ(ナノ)マシンの設計に道を開くものでもあると考えます。



モデル微生物系



アクティブ粒子による剪断流の加速(模式図)

栃木 栄太  
准教授



## 結晶格子欠陥の微細構造解析

結晶性材料は転位、双晶、粒界といった種々の欠陥構造(格子欠陥)を内包しており、力学的特性をはじめとする諸特性に様々な影響を与えています。当研究室では、各種透過型電子顕微鏡法(TEM)を主たる実験手法として、格子欠陥の微細構造の解析を進めています。

右図は代表的な構造用セラミックスであるサファイヤ( $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ )の変形双晶組織を解析した例です。図1aはサファイヤ単結晶試料に対しその場ナノインデンテーション実験を行った際に撮影したTEM像で、幅数十nmの双晶組織が形成されていることがわかります。このようにして形成された双晶と母相の界面部分を原子分解能走査型TEM(STEM)にて観察した結果、高さ0.4 nm程度のステップ構造の移動が双晶の成長を担っていることが示唆されました(図1b)。さらに、このステップ構造の移動に伴う原子変位を第一原理分子動力学計算により解析したところ(図1c)、5つの原子からなる原子グループの協調的な変位(シャッフリング)の伝播がサファイヤにおける変形双晶の素過程であることが明らかとなりました。このような原子グループのシャッフリングは化合物結晶の双晶の形成過程に共通した現象であると考えられることから、今後の研究の進展が期待されます。

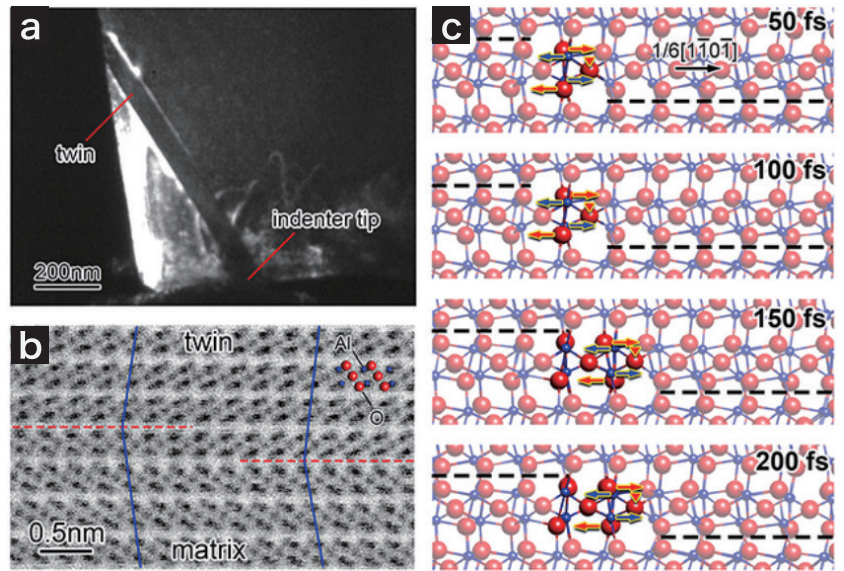


図1 a サファイヤ( $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ )中に形成された変形双晶、  
b 母相/双晶界面のSTEM像、  
c ステップ構造の移動に原子変位の第一原理分子動力学シミュレーション

## 原子分解能その場荷重負荷システムの開発と応用研究

当研究室では、MEMS技術を活用したその場TEM用荷重負荷デバイスおよび制御システムの開発とそれを活用したその場観察研究を進めています。開発したTEM用荷重負荷デバイスを図2aに示します。駆動機構として静電アクチュエータ式を採用しており、TEM内においてサブnm程度の精度で梁を駆動させることができます。図2bは荷重負荷中に撮影した原子分解能走査型TEM像(試料:  $\text{SrTiO}_3$ )です。各輝点は原子位置に対応しています。図2cは本実験像に基づいて解析したひずみ分布です。切欠き底部では応力集中が生じ、強い引張ひずみが生じていることがわかります。このように、本システムを活用することで、結晶性材料の局所的な力学的応答を原子レベルで解析することが可能です。

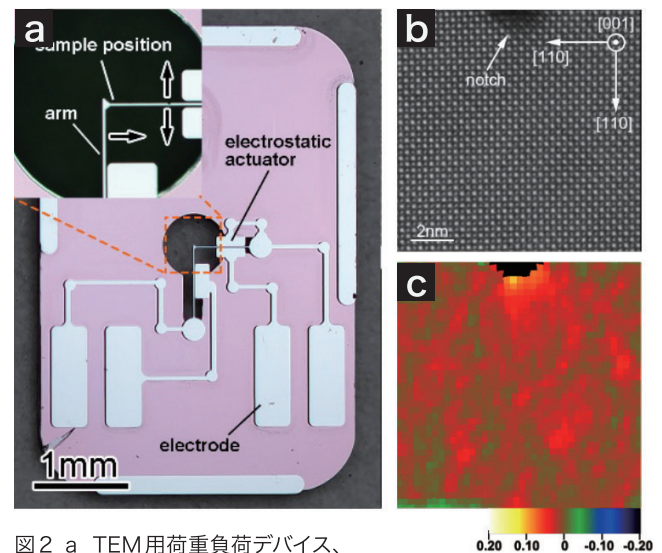


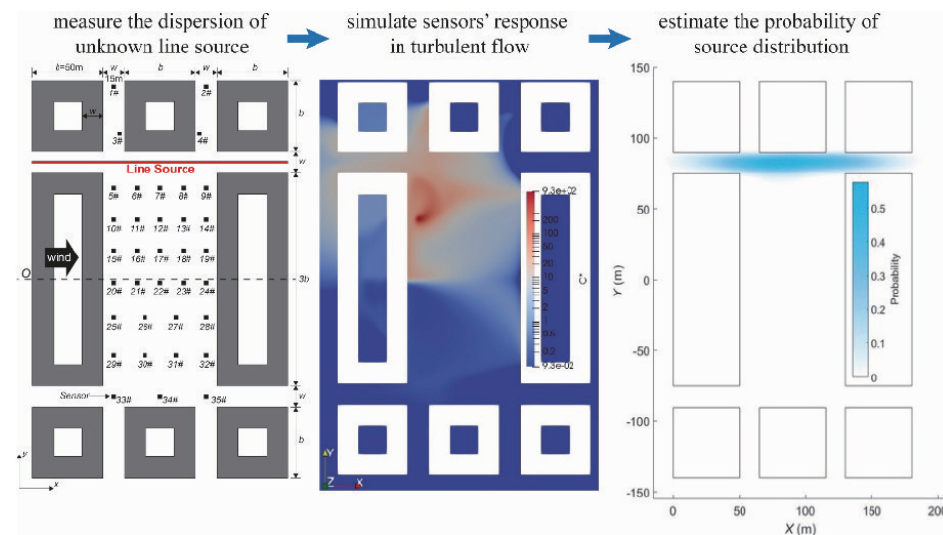
図2 a TEM用荷重負荷デバイス、  
b 荷重負荷時に取得した原子像(試料:  $\text{SrTiO}_3$ )、  
c ひずみマップ( $\epsilon_{xx}$ )



## 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っています。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すが、都市環境の複雑さから必ずしも容易ではありません。

そこで私ども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ます。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ます。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、解が大きく変化してしまいます。したがって、私どもの研究では、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ます。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ります。また、モデルの中の経験的パラメータ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おります。

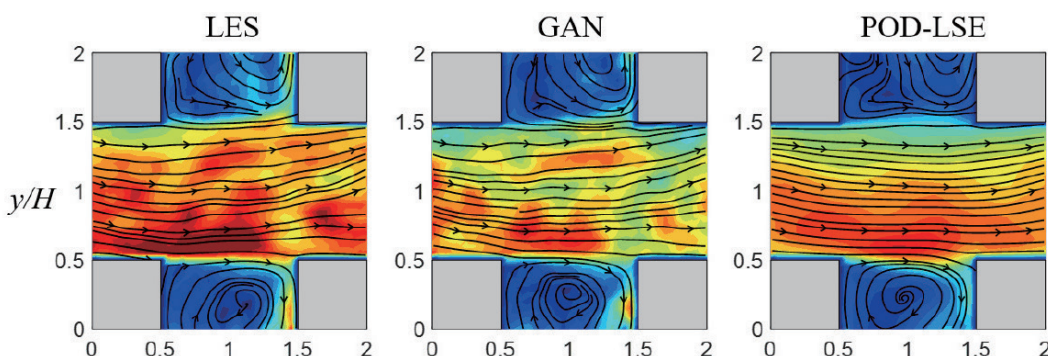
乱流・統計解析を応用した市街地空間における汚染物質発生源同定

## 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します。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す。

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ました。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よりも高いことなどを明らかにしました。

このように、将来的なスマートシティの実現や都市環境の改善に寄与すべく、私どもの研究室では、様々なシミュレーションやセンシングなどのデータフュージョンにより環境情報を詳細化・高精度化する技術を開発しています。



シミュレーションとセンシングデータに基づく市街地瞬時気流の分布推定

## 文部科学省「『富岳』成果創出加速プログラム」 「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」 第3回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウム

文部科学省「富岳」成果創出加速プログラムの一課題である、「『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、本プロジェクト)では、令和5年3月1日に東京大学生産技術研究所 コンベンションホール、および、Webex Webinarsによるハイブリッド形式にて、第3回「富岳」流体予測革新プロジェクトシンポジウム(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)を開催しました。

第3回目となる今回のシンポジウムでは、産業界のユーザーを含む8名の方に、令和4年度に終了する本プロジェクトの最終成果と今後の展開について講演いただきました。これらの講演を踏まえて、シンポジウムの最後に「『富岳』を利用したものづくりと今後の展開」と題したパネルディスカッションを行い、実証研究成果への期待とその実用化に対する課題が議論されました。本プロジェクトで得られた成果の社会実装を加速するために有益な意見交換の場となりました。

当日は民間企業109社からの参加者を含め、246名(含、現地参加24名)の方々にご参加いただき、盛会裡に終了することができました。



加藤千幸教授の講演の様子



パネルディスカッションの様子

### シンポジウム：力学の未来

令和5年3月30日に東京大学生産技術研究所 An棟3階大会議室、および、Webex Webinarsによるハイブリッド形式にて、シンポジウム：力学の未来(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)を開催しました。

このシンポジウムでは、流体、材料強度、建築・土木、マテリアル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について議論しました。各分野での根本的な問題点や未解決課題を共有するとともに、分野横断的に力学シミュレーションの将来への方針を議論することができ、ものづくりシミュレーションの将来展望に高い興味を持たれていることを感じられました。

当日は民間企業103社からの参加者を含め、144名(含、現地参加29名)の方々にご参加いただき、盛会裡に終了することができました。



吉川暢宏教授の趣旨説明の様子



議論の様子



### イベント案内

#### 駒場IIリサーチキャンパス公開

開催日：令和5年6月9日(金)・10日(土) 10:00-17:00  
会場：東京大学生産技術研究所  
(一部オンライン配信を含むハイブリッド開催)

#### 国際フロンティア産業メッセ2023

開催日：令和5年9月7日(木)・8日(金) 10:00-17:00  
会場：神戸国際展示場  
(神戸市・ポートアイランド)



計 算 工 学 ナ ビ

Knowledge Base 解析事例データベース

最先端のシミュレーションソフトウェアによる、さまざまな解析事例を収録

<http://www.cenav.org/>

今すぐチェック!

#### 編集後記

今年度から、当センターは第4期目に入り、さらに、新規の文部科学省のプロジェクト、「富岳」成果創出加速プログラム「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」を推進していくこととなりました。幅広いものづくり分野に展開できるよう、これらの活動で得られた研究成果をお伝えしてまいりますので、引き続きどうぞよろしくお願いいたします。

#### 資料請求お問い合わせ先

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

#### 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