

COMPUTATIONAL MECHANICS

計算力学部門ニューズレター No. 67

June, 2022

目次

- 第 100 期部門長の紹介・第 99 期部門長退任の挨拶
 - ・第100期部門長の紹介 豊橋技術科学大学 飯田 明由 2
 - ・部門長退任にあたって 慶応義塾大学 高野 直樹 2
- 部門賞
 - ・2021年度計算力学部門贈賞報告 東京大学 高木 周 4
 - 佐賀大学 只野 裕一
 - ・功績賞を受賞して 名古屋大学 松本 敏郎 8
 - ・業績賞を受賞して 名古屋大学 荒井 政大 9
 - ・業績賞を受賞して 東京農工大学 岩本 薫 10
 - ・業績賞を受賞して 東北大学 野々村 拓 12
- 特集：EXAスケールコンピューティング「京」から「富岳」へ
 - ・特集にあたって 北海道大学 大島 伸行 13
 - ・京、ポスト京の材料科学、そして富岳へ 北海道大学 /JST 毛利 哲夫 14
 - ・材料組織予測シミュレーションの変革 — マルチスケールからクロススケールへ 京都工芸繊維大学 高木 知弘 17
 - ・燃焼解析ソフト HINOCA の今までと今後 宇宙航空研究開発機構 南部 太介 21
 - 溝渕 泰寛
 - ・「富岳」で目指す Society5.0 時代のスマートデザイン 神戸大学 坪倉 誠 23
 - ・富岳を利用した Lattice Boltzmann Method による超大規模流体解析 みずほりサーチ&テクノロジーズ株式会社 山出 吉伸 26
 - 豊橋技術科学大学 飯田 明由
 - 東京大学 加藤 千幸
 - 株式会社本田技術研究所 宮澤 真史
- 部門からのお知らせ
 - ・American Society of Mechanical Engineers(ASME) 活動紹介 早稲田大学 滝沢 研二 29
 - ・第 34 回計算力学講演会 (CMD2021) 優秀講演表彰 慶応義塾大学 高野 直樹 30
 - ・2022 年度年次大会部門企画について 福井大学 桑水流 理 31
 - ・第 35 回計算力学講演会 (CMD2022) 開催案内 鹿児島大学 池田 徹 33
 - ・部門連携による講習会シリーズ「機械材料・材料加工のシミュレーションと計測」 慶応義塾大学 高野 直樹 34

第100期部門長の紹介・第99期部門長退任の挨拶



第100期部門長の紹介

第100期部門長
飯田 明由
豊橋技術科学大学



部門長退任にあたって

第99期部門長
高野 直樹
慶應義塾大学理工学部機械工学科

第99期（2021年度）計算力学部門長の退任にあたり、御挨拶および御礼を申し上げます。まず、この1年間の部門の運営に関しまして、副部門長の飯田明由先生（豊橋技術科学大学）、部門幹事の伊井仁志先生（東京都立大学）、部門副幹事の石原大輔先生（九州工業大学）をはじめ、広報委員会の倉橋貴彦先生（長岡技術科学大学）と篠崎明様（みずほリサーチ&テクノロジーズ）、部門間交流担当委員会の平野徹様（ダイキン情報システム）、新学術誌編修担当委員会の池田徹先生（鹿児島大学）、表彰委員会の高木周先生（前部門長、東京大学）および只野裕一先生（前部門幹事、佐賀大学）とすべての運営委員の方々の多大なるご協力ご助力のおかげで、部門活動を縮小衰退させることなく任期を終えることができました。日本機械学会事務局の近藤愛美様にも数えきれないほどの援助をしていただきました。心より御礼申し上げます。

第99期の行事の中で、最も嬉しいことは、やはり第34回計算力学講演会（CMD2021）を開催できたことです。2021年9月21日～23日の3日間、北海道大学大学院工学研究院ならびに北海道大学情報基盤センターの後援のもと、実行委員長の大島伸行先生、幹事の寺島洋史先生はじめ、実行委員会の皆様のご尽力のおかげで、発表件数273件、参加者数475名という素晴らしい講演会を開催できました。この475名という参加者数は、コロナ前のCMD2019の参加者数よりわずかですが多く、懇親会や企業展示が無いオンライン開催であっても、多数の方にご参加いただけたことを何より嬉しく思っています。

今年から、学会本部の方針に従い、講演会当日は予稿集を発行・配布し、事後に希望者の講演原稿182編を収録した講演論文集を発行いたしましたので、実行委員会の方々には余分なご苦勞をおかけしました。講演論文集は会員価格4,000円で販売中ですので、CMD2021にご参加いただけなかった方は、是非学会事務局までお問合せください。

まだまだオミクロン株の影響が強く残り、学会部門活動も

先行きの予測が難しい状況ですが、第35回計算力学講演会（CMD2022）は、鹿児島大学がホスト校となり、2022年11月16日～18日の3日間、オンライン開催をいたします。当初は、9月下旬に現地開催を目指して企画準備を進めていましたが、9月は年次大会に始まり、他部門の講演会も目白押しという状況でした。これは、費用をおさえて現地開催するには大学での開催がベストである一方、授業期間中の開催は教室確保が不可能であるため、どうしても9月下旬に集中する状況となっています。一方、オンライン開催であれば会場確保が不要（運営事務用の部屋のみ）であるため、2月の部門総務委員会にて協議し、思い切ってオンライン開催とすることを決定し、上記の通りの日程に変更しました。こうした事情をご理解いただき、引き続きのご協力ご支援をお願い申し上げます。

学会全体の動きの中で、2016年に策定された”新生「日本機械学会」の10年ビジョン”の実現に向けて、新部門制検討委員会が設置され、部門評価の方法を変更し、同時に交付金や事務支援も変更案が出され、2021年度から試行されています。もう1年の試行期間を経て、2022年度末には総括が行われ、2023年度より本実施というスケジュールが組まれています。

評価項目の中で目を引くのは、部門間交流が必須となっている点です。計算力学部門では、前部門長の高木先生のご尽力のおかげで、熱工学部門および流体工学部門と合同で講習会「機械学習×熱工学・流体工学の最先端」がスタートしました。また、2021年度より、機械材料・材料加工部門と合同で講習会「機械材料・材料加工のシミュレーションと計測」をスタートさせることができました。これらの新しい試みは、計算力学部門登録員の皆様にも有益なものになっていると思います。

他の評価項目の中で、国際連携に関しては、これまで続けてきた日韓合同シンポジウムが再開できておらず、コロナ禍の影響が及んでいるのは否めません。第100期には、日韓連携行事に加え、最適化シンポジウムOPTISの再開も待ち遠しいところです。

経理面では、上記の通りの交付金や事務支援に関連する決算報告について、これまでは部門単独の年度収支のみを気にしていましたが、事務支援に必要な共通経費を含めた本部との連結による収支に基づき部門評価を行う方向へと大きく動いています。当部門の共通経費配賦額は約240万円です。第99期の部門決算見込では、約600万円の収入、約470万円の支出を見込んでおり、交付金183,000円を収入に含めた部門単独の年度収支という従来の考え方では黒字決済ですが、共通経費を含めると約100万円の赤字の見込みです。それでも、第99期予算書では、部門単独で約30万円の黒字なれど、本部連結の収支では約180万円の赤字となっていましたので、半分弱は黒字の方向へ荒波の中で漕ぐことができたと思います。部門運営で、本部連結の収支を黒字にすることは容易ではないのは計算力学部門だけではありません。

せんが、この場をお借りして現状をお伝えしたいと思います。

この1年間で嬉しかった話題に戻りますが、部門の一般表彰に加えて、学会賞をはじめとする各種表彰に計算力学部門から積極的に推薦できました。2022年度の各賞の公募の際にも、是非とも多数の他薦、自薦をいただきたく、どうぞよろしくお願い申し上げます。

次年度の運営は、新部門長である飯田明由先生（豊橋技術科学大学）および新副部門長に選出された萩原世也先生（佐賀大学）に引き継ぎます。私も皆さんと同じ一人の部門登録員となり、今後も部門の発展に尽力する所存です。是非、引き続きのご支援ご協力をお願い申し上げます。CMD2023が現地で開催され、懇親会で皆様と歓談できる日が訪れることを楽しみにしております。

部門賞



2021年度計算力学部門贈賞報告

2021年度計算力学部門表彰委員会
 委員長 高木 周 東京大学(左)
 2021年度計算力学部門表彰委員会
 副委員長 只野 裕一 佐賀大学(右)

計算力学部門では、1990年度より部門賞として、功績賞と業績賞の2つの賞を設けています。功績賞は、学術、技術、教育、学会活動、出版、国際交流などで計算力学の発展と進歩に幅広く顕著な貢献のあった個人に贈られます。業績賞は、計算力学の分野で顕著な研究または技術開発の業績を挙げた個人に贈られます。歴代受賞者の一覧は部門ホームページ<https://www.jsme.or.jp/cmd/>に掲載されています。

2021年度(第99期)は、6月初旬に部門登録会員に向けたインフォメーションメールと部門ホームページにて「部門賞候補ご推薦のお願い」を周知し、6月29日を期日として候補者の募集を行いました。推薦のあった候補者について選考委員および表彰委員会にて慎重厳正な審査を行い、功績賞1名、業績賞3名、合計4名の受賞者を以下のように決定しました。

功績賞 松本 敏郎 氏(名古屋大学)
 業績賞 荒井 政大 氏(名古屋大学)
 業績賞 岩本 薫 氏(東京農工大学)
 業績賞 野々村 拓 氏(東北大学)

オンライン開催となった第34回計算力学講演会において表彰式が執り行われ、各氏には表彰と記念品が郵送にて贈呈されました。同表彰式では、新型コロナウイルス感染症のために表彰式が中止となった2020年度(第98期)部門賞の表彰式も併せて執り行われました。本報レター読者の皆様にも、ご受賞4氏のご業績をご紹介します。その栄誉を広くご周知させていただきましますとともに、改めて各氏へのお祝いを申し上げます。

松本敏郎氏は、境界要素法の理論と応用および関係するテーマについて、多数の業績をあげてきました。当初は境界要素法の非線形問題への拡張や境界要素法を用いた形状感度解析法の研究を盛んに行っていた。その後、形状最適化への応用の過程で、トポロジー最適化問題、特に波動伝搬や周期構造に関連したトポロジー最適化における境界要素法の有用性に着目した研究を行い、それらに関して多くの研究成果を発表しております。また、流体を用いた動吸振器のトポロジー最適化に関連した興味から、格子ボルツマン法を用いた流れ場形状のトポロジー最適化法の研究も行っています。

松本氏はまず、境界要素法で用いられる境界積分方程式が設計対象の材料定数や外力等の境界条件値、形状などの設計変数を含んでいることから、それを設計変数で直接微分することにより感度係数に関する境界積分方程式を導出し、熱伝導・弾性・音響問題に応用しました。その際、境界積分方程式の特異積分

の処理についても検討し、正則化された境界積分方程式を用いた射出成形金型の形状設計感度解析法、異材接合界面き裂の応力拡大係数のインタラクション・エネルギー解放率による計算法を開発しました。また、境界要素法が開領域を厳密に扱うことができるという利点を生かして、音響問題の設計感度解析法を初めて開発しました。

次に、形状最適化をさらに発展させたトポロジー最適化に境界要素法を適用しています。境界要素法は形状のモデリングが容易であり、開領域の厳密な取り扱いが可能であることから、特に波動伝播問題におけるトポロジー最適化に境界要素法を用いた研究を行いました。トポロジー最適化で境界要素法の特徴を活かすために、最適化の過程で逐次変化する形状に応じて境界メッシュを生成する方法を研究しており、従来から用いられていたレベルセット関数を利用し、レベルセット関数の変化率が目的関数のトポロジー導関数に比例するように時間発展させるときに、レベルセット関数のゼロ等値面から境界メッシュを逐次生成する方法を開発しました。松本氏はそれをまずRobin境界条件を課す熱伝導問題に適用し、さらに電磁波動問題、音響問題、音場と弾性場の連成振動問題に拡張しています。これらの問題の取り扱いに際しては、それぞれの場に対する目的関数のトポロジー導関数の理論的な表現を求めています。電磁波動問題ではクローキング問題を取り上げ、クローキングに必要な最適な誘電体分布形状のトポロジー最適化に取り組み、単一の誘電体分布パターンで任意形状の物体のクローキングが可能な誘電体の分布を求める方法を開発しました。また音響問題では、騒音低減を目的とする散乱体の構造を三次元的に求めることに成功しています。散乱体には減衰を考慮した材料物性値も考え、音場と弾性体の連成問題としてトポロジー最適化法を発展させています。波動現象では、特定の形状の散乱体からなる単位構造を周期的に配置することにより、通常材料では実現できない波動伝播特性を実現できることがわかっていますが、これに対して松本氏は、所望の波動伝播特性を持つように単位構造中の材料分布を決定するトポロジー最適化法を開発しました。その結果、特定の周波数に対して波を遮断する構造、波の伝播方向を制御できるダイオード構造、弾性波の縦波・横波を相互に変換できる構造を得るなど数々の成果を上げています。またこれら一連の研究では、境界要素法の解析を多数回繰り返す必要があることから境界要素法自体の高速化にも取り組んでいます。

松本氏はまた、弾性体の制振デバイスのトポロジー最適化の過程で流体を用いた動吸振構造のトポロジー最適化にも関心をもち、流れ場形状のトポロジー最適化に取り組んできました。流れ問題では、最適化の計算過程で流れ場形状が逐次変化する

るため、流れ問題の解析を多数回繰り返す必要があります。そこで、この問題にレベルセット法と陽解法である格子ボルツマン法を用いる方法の開発に取り組みました。レベルセット法で用いる感度の計算には、離散化前のボルツマン方程式から導出する方法を考案し、圧力損失最小化問題などさまざまな最適化問題で流れ場形状のトポロジー最適化を効率的に行うことに成功しています。一方、連続場のボルツマン方程式では目的関数のトポロジー導関数を直接用いることが出来ないため、従来行っていたようなトポロジー導関数に基づくレベルセット法を開発することが出来ませんでした。そこで最近Navier-Stokes方程式に対する弱形式を制約条件として目的関数のトポロジー導関数を求め、その過程で得られる新しい随伴問題を解析に用いるトポロジー最適化法の開発に取り組んでいます。

松本氏のこれらの研究成果は、機械学会の英文ジャーナルを含む主要な学術誌に掲載され、特に機械学会からは、上記の音響問題、流れ問題、クローキング問題のトポロジー最適化に関する論文に対して、それぞれ2016、2017、2018年に機械学会賞(論文)が授与されています。松本氏はこのように、計算力学の主要な数値解析法の一つである境界要素法と、関連する問題の解析法の発展に大きな寄与をし、多くの専門書や翻訳書の出版も行ってきました。また学会活動としては、日本機械学会計算力学部門において運営委員、研究会の運営、計算力学部門講演会におけるオーガナイズド・セッションの企画、計算力学技術者資格認定事業関係の委員を長年に亘って務め、計算力学部門の活動に大きく貢献しておられます。特に2016年には第29回計算力学講演会実行委員長を務めて部門講演会を大きな成功に導き、また2018年以降は副部門長、部門長、部門表彰委員長を務めるなど、計算力学部門にも大きく貢献されています。機械学会以外にも日本計算数理学会の理事・会長としてその運営に携わるとともに、計算力学・境界要素法に関連した多数の国際会議の組織委員、境界要素法の主要英文誌Engineering Analysis with Boundary Elementsの編集委員を務め、計算力学分野において卓越した貢献をされています。

1988年 信州大学工学部生産システム工学科 助手

1989年 信州大学工学部生産システム工学科 助教授

1998年 信州大学工学部機械システム学科 助教授

2004年 名古屋大学大学院工学研究科機械理工学専攻 教授

2017年 名古屋大学大学院工学研究科機械システム工学専攻 教授

荒井政大氏は、境界要素法の基礎理論と応用に関する広範囲のテーマにおいて、多数の業績を挙げてきました。特に、境界積分方程式の正則化に基づく高精度解析、異材界面き裂の特異応力場に関する高精度解析、動弾性問題における境界条件・動的圧力分布の逆解析同定、超音波非破壊検査における高精度数値解析などをテーマとした一連の研究において、多くの独創的かつ有用な研究実績を残しています。

境界要素法では、重み付き残差法に基づく境界積分方程式の導出に際して単位集中力や集中モーメントの基本解を重み関数として用いますが、このことに起因して境界積分方程式の積分核が特異性を有します。特に場の勾配に関する境界積分方程式に含まれる超特異積分はその処理が難しく、これまでも解析的

積分を行う方法や、有限部分積分を使って超特異積分を有限値として評価する手法などさまざまな手法が提案されてきました。それに対して荒井氏は、剛体変位条件を自然に拡張した「剛体回転条件」を適用することを着想し、それにより弾性板の曲げ問題に関する境界積分方程式を極めて高い精度で評価できることを示しました。さらにはこの考え方をポテンシャル問題(一様フラックス条件)、弾性問題(一様応力条件)に拡張することによって、フラックスに関する境界積分方程式、応力・ひずみに関する積分方程式に含まれる超特異性を効果的に軽減する正則化手法に発展させました。本業績に対しては、2000年に日本機械学会より奨励賞(研究)が授与されています。

解析精度において境界要素法が非常に高い優位性をもつ破壊力学分野の解析、特に異材界面き裂問題への境界要素法の適用にも取り組んでいます。異材界面き裂の問題では、き裂の先端で弾性応力場に特異性が生じるだけでなく、振動特異性の発生という極めて特異な現象を示しますが、境界要素法を適用することで高精度の解を求める手法を開発するとともに、複合材料中の層間剥離の進展に関する破壊靱性値の評価に際して、多くの有用な知見を得ています。特に炭素繊維強化プラスチック(CFRP)の成形時に発生する残留応力の影響を考慮した境界要素法による解析を行うことで、層間破壊靱性値の評価においてマトリクスの粘弾性的性質を考慮することが極めて重要となることを明らかにしました。これらの一連の研究に関しては、第18回計算力学講演会において計算力学部門より優秀講演賞が授与されています。

先述の正則化された境界積分方程式を用いて、弾性板曲げ問題における境界条件の逆解析的同定法について一連の定式化も提案しています。さらにこれを外力の同定法に拡張し、弾性平板に作用する静的分布圧力の同定、さらには動的圧力の同定へと発展させました。構造物に作用する外力の逆解析的同定法についてはさまざまな研究がなされていますが、時間的に変動する衝撃分布圧力の同定法を示したものとしては、世界的に先導的な研究といえます。

また、超音波非破壊検査手法における数値解析に対して境界要素法を適用し、多くの有用な研究成果を残しています。共鳴超音波スペクトロスコピー法においては、弾性固体の共振周波数解析に対して極めて高い精度が要求されますが、境界要素法を適用することによりこの問題を解決し、異方性を有する固体材料の弾性定数同定や粘弾性的性質を有する複合材料の粘弾性パラメータの評価において多くの有用な手法を開発しました。さらに、パルスレーザースポレーション法によるコーティング膜の密着強度測定や薄膜/基材間の層間破壊靱性値評価に対して、境界要素法を適用することで高精度に強度・破壊靱性値が評価できることを示しました。

学会活動においては、計算力学部門において運営委員、広報委員など各種委員や技術委員会、研究会の運営、計算力学技術者資格認定事業委員会の講師を務めるなど、本部門活動にも大きく貢献され、日本機械学会においては出版センター副センター長、同センター長、論文誌カテゴリエディター、経営企画委員会委員など多数の委員を務めています。他学会でも多数の理事、委員として学会の運営に携わり、多くの国際会議の組織委員を務めています。

1992年 株式会社三菱総合研究所
 1993年 東京工業大学工学部機械科学科 助手
 2000年 信州大学工学部機械システム工学科 助教授
 2008年 信州大学工学部機械システム工学科 教授
 2014年 名古屋大学工学研究科航空宇宙工学専攻 教授
 2018年 名古屋大学ナショナルコンポジットセンター センター長

岩本薫氏は、100年以上の乱流研究の歴史の中で永く未解明であった高レイノルズ数乱流場において、壁面や境界面近くでの乱流輸送が摩擦や熱伝達の支配要素となることを簡明な理論を用いて世界で初めて明らかにし、高度な乱流制御の構築への有力な手がかりを示しました。

工業上の多くの機器の特性を決定する上で共通して重要となる壁面摩擦係数や熱伝達係数は、従来では高レイノルズ数乱流場における実験データに基づく経験式しか提案されていませんでしたが、岩本氏は乱流応力や熱流束の輸送機構に関する恒等式を新たに導出して、一般的な制御指針を示しました。さらに、スーパーコンピュータを用いた世界最大レイノルズ数の直接数値シミュレーションを駆使したデータベースの構築によって、高レイノルズ数乱流場における乱流制御効果を定量的かつ高精度に示しています。具体的には、独自の正規直交分解法を考案し、従来曖昧であった「乱流構造」に定量的な定義を与え、それに基づく詳細な解析法を見出しています。また、壁面の極近傍の「乱流構造」を標的にすれば乱流制御のレイノルズ数依存性は小さく留まり、実用的な高レイノルズ数乱流場においても同制御が有効であることを明らかにしました。この研究テーマに対しては、平成26年度文部科学大臣表彰科学技術分野・若手科学者賞および平成24年度日本流体力学会・論文賞を授与されています。

また、乱流のレイノルズ数依存性に関する研究を、関連する広範囲なテーマに展開しています。特筆すべき点は、高レイノルズ数乱流場における乱流制御効果の解明という基礎科学的問題の範囲に留まらず、環境問題の解決に直接関連する実用的な工学問題の解決に関しても研究を展開していることです。乱流制御の実用化を推進するためには、その効果を実験的に確認する必要があると考え、短期間のうちに実験を行い直接数値シミュレーションの結果を裏付けています。また、高レイノルズ数乱流場で有効な乱流制御手法の効果を数値解析だけでなく実験的にも短期間のうちに立証を可能としたのは、実用化に有望であった制御手法を研究の初期段階から選択した先見性に依るものといえます。

その後の発展として、高レイノルズ数乱流場でも制御効果を有するバイオメティクスに基づく複数の乱流制御手法を提案しています。例えば、サメ肌にヒントを得て新規の3次元表面微細形状を提案し、世界で初めて大規模直接数値シミュレーションと2平面ステレオ粒子画像流速測定法を用いた室内実験を併用して、本形状を最適化しました。他にも、イルカ表皮を模擬した進行波状微振動壁面や管路振動による伝熱増進、カジキ等の分泌物を模擬した抵抗低減ポリマーを有する新規の船底塗料、血流の脈動原理を応用した独自の脈動制御等が挙げられます。

岩本氏はこれらの生物模倣を基にした高レイノルズ数乱流制御分野における世界的な第一人者であり、これらの研究に対し

ては、平成27年度日本計算力学連合Young Investigator Award, および平成30年度日本機械学会流体工学部門・フロンティア表彰を授与されています。

学会活動においては、計算力学部門において幹事、副幹事、表彰委員会副幹事、運営員などを務め、本部門活動にも大きく貢献され、日本機械学会においては出版センター委員、日本機械学会論文集・計算力学カテゴリAssociate Editor, 計算力学技術者認定事業委員会の委員、熱流体力学分野小委員会幹事、同小委員会2級WG幹事などを務めています。

2005年 東京理科大学理工学部機械工学科 助手
 2007年 東京農工大学大学院工学府機械システム工学専攻 特任准教授
 2011年 東京農工大学大学院工学府機械システム工学専攻 准教授
 2018年 東京農工大学大学院工学府機械システム工学専攻 教授

野々村拓氏は、ロケットエンジンからの排気噴流から発生する音響波など、高マッハ数の衝撃波を含む複雑流れから発生する空力音響波のシミュレーションを行うことを目的に、曲線座標系での解析や多成分気体の解析などの実用計算に向けた高精度法の開発を行ってきました。このような流れでは、計算に利用する格子のステンシルをサブステンシルにわけ、それらの重みを衝撃波のような不連続で適切に変化させることで、振動なく解く高精度の重み付きスキームが用いられます。また高精度の有限体積法や有限要素法では、高精度を保つために多次元補間を導入する必要がありますが、高精度差分法では、方向毎の演算で済むため、高精度にした際に計算コストを大きく下げることができます。そこで、重み付き差分法の内「重み付きコンパクト差分法 (Weighted Compact Nonlinear Scheme; WCNS)」を選択し、従来の高精度スキームである差分Weighted Essentially Nonoscillatory法 (差分WENO法) で問題が生じていた「曲線座標系での解析」および「多成分気体の解析」で生ずる誤差を打ち消す手法を提案し、衝撃波を含む流れの曲線座標での解析や多成分気体を含む高速流からの高精度解析を可能にしました。加えてWCNS法を整理し、高精度化・堅牢化を行っており、さらに、これらの一連の研究で得られた知見を利用して従来の高精度スキームである差分WENO法と同様の誤差を打ち消す別の手法も提案しています。

流体の保存量の保存と同時に曲線座標系において流体の自明な解の一つである一様流を保持することが、圧縮性流体解析ソルバーの精度の観点から求められます。圧縮性の高解像度差分法の一つである差分WENO法では一様流保持ができませんでしたが、WCNSでは数値流束の定義の違いから、保存系のメトリックを適切に評価することで一様流保持ができることを示しています。これにより高精度差分法の曲線座標系の解析を可能としました。

圧縮性多成分気体の解析では、比熱比が異なる気体を解く際に速度、圧力一定で異なる気体が混じりあう界面において速度および圧力の虚偽振動が生じます。界面の解析においては、保存変数や保存変数に対する流束を補間するのではなく、密度、

速度、圧力などの基本変数を補間し、かつ質量分率などを非保存で解く準保存系で解析することで虚偽振動を防ぐことができます。差分WENO法では定式化上振動を防ぐことができませんが、WCNSの特性を利用すると基本変数の補間が実現でき、これを利用して虚偽振動のない多成分圧縮性流体の解析が可能となりました。

WCNSの高解像度化のため5-9次精度までの高次精度化を行うとともに、通常のWCNSでは厳しい条件での問題で解析が破綻する問題を解決する定式化も提案されています。これにより、非常に厳しい条件の高速流から発生する音響波の解析などを複数実施しています。この数値解析の手法は、NASA-Ames研究所やStanford大学のCTRグループなど世

界的に利用されています。

野々村氏が開発したWCNS法での誤差が生じないメカニズムの理解を通じて、従来の保存量の流束を補完する差分WENO法においても、中心差分部分と数値粘性部分を分けて考え、それぞれからエラーが出ないように中心差分部分と数値粘性部分を適切に差分化することで、曲線座標時の一様流および多成分気体の界面から発生する誤差を消すことにも成功しています。

2008年 日本学術振興会特別研究員PD

2009年 宇宙航空研究開発機構 プロジェクト研究員

2011年 宇宙航空研究開発機構 助教

2016年 東北大学大学院工学研究科宇宙航空工学専攻 准教授



功績賞を受賞して

松本 敏郎
名古屋大学大学院工学研究科機械システム工学専攻

この度は、計算力学部門功績賞をいただき誠に光栄に存じます。これまで、ご指導・ご支援を賜りました多くの皆様に心より御礼申し上げます。

同年代の方は同じような経験をお持ちかと存じますが、私が計算力学の真実事のようなことを初めて体験したのは、大学1年生のときにCASIOのFX-602Pという電卓を購入したときでした。この電卓には22個の数値を保存できるメモリと512ステップの操作を記憶できるメモリがあり、メモリの数値によって別のステップにジャンプするための命令がありましたので、この電卓を使って物理で勉強したばかりの減衰振動の微分方程式をルンゲ・クッタ法で解くプログラムを作成し、数値計算の面白さを感じました。本格的に数値計算を経験したのは、大学院の修士課程からで、プログラムのソースコードを削孔したカードを専用のハードケースに入れて大型計算機センターに通ったり、音響カプラを使いTSS端末を操作して汎用機で計算を行っていたことが懐かしく思い出されます。大学院では、結城良治先生の下で傾斜き裂や屈折き裂の応力拡大係数を境界要素法で計算する課題を与えられました。有限要素法で用いられる2次のアイソパラメトリック要素やき裂の特異要素を境界要素法に実装するのがかなり難しかったことを記憶しております。境界要素法では境界上で変位と表面力を未知量や既知量として考えることになり、変位は連続でなければならないのですが、表面力は要素間で不連続であることが許されるからです。なんとかそれを解決したものの、き裂を含む大量の入力データの作成や計算結果をグラフにするのも大変な作業となることが予想されたので、まず数式処理やgnuplotのような汎用のグラフ作成ソフトを作ってから課題の計算にとりかかり、すべての作業を一瞬で処理できたことが楽しい思い出として蘇ってきます。

博士課程修了後は、信州大学の田中正隆先生に呼んでいただきました。田中先生は当時、境界要素法研究会の代表として国内外の多くの研究者の方々と巻き込んだ活動をなさっており、そのお手伝いを通じて工学から理学に至る多くの研究者の方々と知り合う機会を得ました。研究会の活動は、フォーラム、シンポジウム、国際会議、そして機械学会の部門講演会など多岐にわたっていました。境界要素法の何をやるかを強制されることはなかったのですが、しばらくは非均質な材料に対する境界要素法に関して、領域積分を境界積分として処理する方法などに取り組みました。また、形状最適化問題においては最適形状を得る過程で形状の修正と要素分割の繰り返しが必要となることから、境界要素法の有用性があると考え、開領域が対象となる場合がある音響問題の形状感度解析や形状最適化に境界要素法を適用しました。その合間には異方性弾性体や圧電材料の振動に関係した形状感度解析で、境界要素法が必要とする基本解の導出が難しくても面白いので時間を潰していました。しかしながら今では、このような異方性を含む問題を容易に扱うことができる有限要素法のすばらしさも実感しています。信州大学に在職中は、SouthamptonのC.A. Brebbia教授、Pisa

大学のM. Guiggiani教授、エコール・ポリテクニクのH.D. Bui教授の研究室に滞在するチャンスもいただきました。おかげで、境界要素法の学術誌Engineering Analysis with Boundary Elementsの編修にも携わるチャンスもいただいております。

2004年には名古屋大学の電子機械工学教室に教授として呼んでいただきました。ここではまず水晶振動子のような熱圧電材料の変形による、熱損失と固有振動数の関係を有限要素法で計算する課題に取り組みました。熱損失は微小なのですが、クロック数が上がった場合にQ値にどのくらいの影響があるのかを調べる必要がありました。倍精度の計算では計算に影響が現れないため、京都大学の藤原宏志先生が開発された多倍長計算のライブラリをいただいてLAPACKなどのサブルーチンに手を入れて計算しましたところ、きれいな固有振動数の分布が得られ、Q値への影響を定量的に評価することができました。

その後、境界要素法はトポロジー最適化に向いているのではないかと考え、そのためのメッシュ生成ソフトなどを作り始めていたタイミングで、京都大学から山田崇恭先生（現東京大学所属）が学位取得後すぐに助教として来ていただきました。山田先生が手にしていたレベルセット関数を用いるトポロジー最適化法と境界要素法、境界要素法のメッシュの切り出しを一つにして、一気に研究がはかどり、熱伝導、音響、静弾性、動弾性問題まで境界要素法を用いたトポロジー最適化の研究が進展しました。その後、新たに飯盛浩志先生（現慶應義塾大学所属）が助教として着任し、高橋徹先生と協力の下で波動問題における高速境界要素法を用いたトポロジー最適化の展開が一気に進みました。優秀な同僚と多くの博士課程の学生に恵まれ、研究グループとして問題の理解が深まり、多くの成果を上げることができたことは感謝に耐えられません。山田先生、飯盛先生が転出された現在は、崔羿先生を新たにスタッフとして迎え、これまで着目されていなかった問題や方法へ研究を展開し始めたところです。

さて境界要素法研究会は、2000年から日本計算数理工学会へと発展し、西村直志会長の後任として私が微力ながら会長を引き受けています。そこでの活動をベースに、計算力学部門講演会では、境界要素法の高速解法、周期構造や最適化などに関係したOSの編成を行ってきました。また、計算力学技術者認定試験と付帯講習会の東海地区会場の実施責任者、2016年の第29回計算力学講演会の実行委員長、2019年度部門長などの活動を通じて、計算力学部門の仕事を担当させていただきました。計算力学という広い学問領域に対して、私の知識や仕事は狭く、なかなか十分な貢献ができなかったのを残念に感じます。現在、AIやXRなど計算機を使用したアプリケーションの社会実装が進み、計算力学に今後どのような風が吹くか興味が尽きないところですが、研究に費やせる時間は余り残っておりませんので、皆様の活躍に大いに期待したいと思っております。計算力学分野、計算力学部門の益々の発展を祈念し、受賞の御礼といたします。



業績賞を受賞して

荒井 政大
名古屋大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻

この度は、栄誉ある日本機械学会計算力学部門業績賞をいただき、大変光栄に存じます。これまでご指導いただいた先生方に心より感謝いたします。

思えば私にとって計算力学部門講演会での初めての発表は、東京工業大学の大学院修士課程の学生であった1991年、川崎市産業振興会館で行われた第4回の部門講演会でした。当時の部門長は、東大の三好俊郎先生であったと記憶しています。私は大学院にて境界要素法の精度改善に関わる研究に携わっておりました。部門講演会の境界要素法セッションは、当時境界要素法を精力的に研究しておられた信州大学の田中正隆先生、東京大学の結城良治先生、日本大学の登坂宣好先生をはじめとして蒼々たるメンバーであり、はじめての部門講演会での発表にたいへん緊張しながら臨んだことを昨日の出来事のように思い出します。境界要素法の研究に携わっている方々は、学会のセッションでも遠慮なく厳しい意見を述べられる方々が多かったのですが、そういった厳しい環境で育てて頂いた経験が、その後の私の人生に大きく寄与していると感じています。

東京工業大学の修士課程を修了したあと、私は一時、(株)三菱総合研究所に籍を置きましたが、二年も経たないうちに東京工業大学に戻り、恩師松本浩之先生の助手となりました。そこで学位を取得した後、長野新幹線が開通し、長野オリンピックが終わった2000年、境界要素法の研究でご縁のあった田中正隆先生がおられた信州大学にて助教教授に採用頂きました。信州大学工学部はちょうど改組の次期を迎えたところであり、私は運よく機械システム工学科にて独立の研究室として活動の場を頂くことができました。とはいえ、計算機も材料試験機も何もない空っぽの研究室で、実験装置から計算機まで、すべて一人で立ち上げなければなりません。正直なところ研究資金は不足していましたから、秋葉原で中古のマザーボードやメモリなどの部品を購入してPCを組み上げ、フリーで入手できるLinuxを導入して学生の研究環境を自分一人で作り上げました。当時はLaTeXとGnuコンパイラが動けば研究も論文執筆もできましたので、私にとって安価なLinuxの環境は非常に助かりました。まだ助教教授になりたての頃、大学の外部評価で東京大学の矢川元基先生が信州大に來られ、昼食をご一緒しました。「1年間の研究費はどのくらいか?」という矢川先生のご質問に「400～500万円程度です」とお答えしたところ、「最新の研究を行うにはその10倍は必要ですよ」とおっしゃられて、当時まだ若かった自分はいへんショック

を受けたことを思い出します。

境界要素法の研究では学位論文として特異積分の正則化に関わる研究に携わりました。二次元、三次元の静弾性解析、動弾性解析、共振周波数解析、弾性板の解析など、さまざまな解析に境界要素法を適用し、実験力学や逆問題など実用的な応用も踏まえながらプログラムの開発を行ってまいりました。境界要素法は非線形問題が不得意という点がウイークポイントではありますが、破壊力学や弾性波動問題といった分野ではたいへん強みを発揮します。私どもの研究グループでは、炭素繊維強化プラスチック(CFRP)の破壊力学解析や定常・非定常動弾性解析に対して境界要素法の適用を試みて、そのなかのいくつかの論文に関しては学会賞や部門賞を頂くなど、皆様からもご評価を頂くことができました。現在は私の研究も非線形問題を中心とした力学解析に軸足が移っており、粘弾性・粘弾塑性構成式をベースとした非線形有限要素法と均質化法によるマルチスケールシミュレーションへと研究の中心は移っていますが、境界要素法をはじめとした研究の課程で培われた多くの知見は、私の人生の後半の計算力学研究にも多くの影響を与えています。

近年は名古屋大学ナショナルコンポジットセンターにて自動車への繊維強化プラスチックの応用を踏まえた材料開発、成形法の開発を行っていますが、そういった実用研究・応用研究にも私がこれまで携わってきた計算力学に関する過去の研究成果が活かされていると感じています。

近年は固体の衝撃破壊に対する個別要素法でのアプローチや繊維強化プラスチックの成形解析に対して粒子法を適用する取り組みなど、新たな数値解析手法の研究にも取り組んでいます。私自身が先端の数値解析的研究に携われる期間は残り少なくなっていますが、これからは計算力学という研究分野に対する興味を失うことなく、新たな数値計算手法に立ち向かう努力を微力ながら続けていきたいと考えております。

最後になりますが、東京工業大学時代の恩師である松本浩之先生、さまざまな研究のご指導を頂き現在豊橋技術科学大学の副学長を務められている足立忠晴先生、境界要素法のご指導を頂き、現在も折に触れて研究のご助言を頂いている東工大名誉教授の岸本喜久雄先生、学生時代から信州大学在籍時、そして名古屋大学に異動してから今に至るまで、たくさんの励ましとご助言を頂いた松本敏郎先生(現名古屋大学)に、この場を借りて心より感謝を申し上げたいと思います。



業績賞を受賞して

岩本 薫
東京農工大学大学院工学府機械システム工学専攻

この度は、日本機械学会計算力学部門業績賞を受賞させて頂き、望外の喜びでございます。ご推薦頂きました計算力学部門の皆様、これまでお世話になった多くの皆様に厚く御礼申し上げます。本受賞の背景となりました事柄につきまして、ご紹介させて頂きます。

本業績賞の内容である乱流制御の研究については、東京大学名誉教授の先師・笠木伸英先生と、鈴木雄二先生に幸運にもご指導頂いたことに始まります。少し逆説的な考えですが、学生時代に教わった学問の中で、最も理解し難かったのが流体力学、特に乱流で、そこに魅力を感じました。100年以上の乱流研究の歴史の中で、未だに大部分が未解明の乱流をさらに意のままに制御する研究に携わり、心が躍る瞬間が多々あります。少しの制御入力で流れや結果が大きく変わる非線形性を内包しており、この研究に20年以上も携わった今でも全く予測できない多くの結果に驚愕します。

博士課程の学生時代では、同期だった長谷川洋介氏(現・東京大学)、福島直哉氏(現・東海大学)、吉野崇氏(現・本田技研工業株式会社)をはじめ、栗本正規氏(現・株式会社デンソー)や留学生を含めて9名の博士課程学生が在籍し、毎日深夜に至るまで雑談も含めて活発に議論できたことは忘れられません。特に、深淵康二博士(現・慶應義塾大学)がポスドクとして着任されてからは、議論の質が一段と高まり、レベルの高い論文が数多く発表されることとなりました。当時、FIK恒等式(*Phys. Fluids*, 2002)を導出した我々のグループは、主に研究対象としていた低レイノルズ数乱流場では、壁近傍の乱流輸送が摩擦や熱伝達の支配要素となることを明らかにしましたが、他方、工業上の多くの機器の流れ場である高レイノルズ数乱流場では、どのように乱流制御手法を構築すれば良いのか指針がありませんでした。研究室のある夜の雑談がきっかけと記憶しておりますが、壁近傍の乱れを理想的に減衰させたときに壁から離れた乱流場はどのように変化するかと着想を得て、永く未解明であった高レイノルズ数乱流場においても、壁面や境界面近くでの乱流輸送が摩擦や熱伝達の支配要素となることを示す準解析解を一晩で導出できました(*Phys. Fluids*, 2005)。このような研究結果が得られたのも、現在では産学の第一線で活躍されているメンバーといつでも議論できた笠木・鈴木研究室の環境のおかげと改めて御礼申し上げます。

時を同じくして、制御の対象場である高レイノルズ数乱流場に関する研究に関して、スーパーコンピュータの飛躍的な発展を背景に、直接数値シミュレーション(DNS)が研究手段として活躍し始めました。当時、世界一のスーパーコンピュータであった地球シミュレータを使用できるという幸運に恵まれ、世界最大のチャンネル乱流DNS(レイノルズ数が10万、格子点数が163億)を実施し、高レイノルズ数乱流場における乱流制御効果を定量的かつ高精度に示すデータベースを構築しました。本プロジェクトでは加藤千幸先生(東京大学)や金田行雄先生(名古屋大学)をはじめ多くの皆様からご指導頂きました。実務的には、地球シミュレータの運用当初ではリモート接続が許可されておらず、現地(JAMSTEC, 横浜市)にほぼ毎日

赴き、そのプログラム作成と高速化に多くの時間を費やしました。システムの大部分を占める計算のため、なかなか実行順番が回ってこなく、実行されても、初歩的なコーディングミスやシステムの初期トラブル等ですぐに異常終了する等、愕然とした記憶も鮮明に思い出されます。総じて、東京大学における研究で、高レイノルズ数乱流場の特徴を把握し、壁面の極近傍の乱流輸送を標的にすれば乱流制御のレイノルズ数依存性は小さく留まり、実用的な高レイノルズ数乱流場においても同制御が有効であることが明らかとなり、私として一つの区切りとなる結論を示すことができたと感じております。以後は、いかにしてその壁近傍の乱れを減衰させるかという具体的な制御手法に関する研究に興味に移ります。

博士課程修了と1年間の学振ポスドクを経て、東京理科大学の河村洋先生に助手として採用頂きました。河村先生は、故・笠木先生、故・長野靖尚先生(名古屋工業大学)、宮内敏雄先生(東京工業大学)とともに乱流工学ハンドブックを編集され、本分野の世界的第一人者です。乱流に関するご指導を賜りましたことと共に、私にとって初めての教育職ということもあり、教育に対する姿勢や研究室運営の基礎を河村先生に教導頂きました。乱流制御手法の一つである、血流の脈動原理を応用した流体の加減速制御の研究を学生とともに担当させて頂きましたが、思い出深い事項として、当学生が研究発表会で「ある脈動を流体に付加したところ乱れが全て消滅して層流化し、DNSをうまく実行できません」と報告しました。河村先生と私は一驚し、再層流化が乱流制御の究極の目標の一つであることを論ずるとともに、学生が失敗と思い込んでいた結果が大成功ということも多々あり、大学における研究の面白さ・奥深さを経験しました。同時期に、川口靖夫先生(東京理科大学)には、別の乱流制御手法である、カジキ等の分泌物を模擬した抵抗低減ポリマーを有する新規の船底塗料に関する産学共同研究にお誘い頂きました。前述の基礎科学の問題の範囲に留まらず、環境問題の解決に直接関連する実用的な工学問題の解決に関しても研究を展開するきっかけとなりました。

2007年に現在の所属機関である東京農工大学に特任助教授(後に特任准教授に職名変更)として着任致しました。日本型テニュアトラックシステムをベースとしており、優れた業績を上げることが条件ではありますが、その後任期なしポストを確保して頂いており、若手研究者にとって魅力的な制度です。また、独立した研究室の主宰者(PI)、研究室の立ち上げに必要な研究費支給、大学管理運営の負担軽減などの優遇処置があり、集中して研究を行う環境が与えられ、若手研究者にとって非常にメリットがありました。東大、理科大での理論的解析と数値解析の経験から、乱流制御の実用化を推進するためには、その効果を実験的にも確認する必要があると考え、乱流・乱流燃焼の世界的第一人者である店橋護先生(東京工業大学)に多大なご助言・ご指導を賜り、計測工学の分野で困難な壁面近傍の乱流場を対象としたレーザ計測

(2平面ステレオ粒子画像流速測定)にも果敢に取り組みました。同専攻の望月貞成先生、村田章先生には、PIとして心構えをご教示頂きました。今でも基盤的な考えとしている事項として、教員評価項目である論文実績や研究費獲得実績も上げるべきだが、それと同等に自身でやりたい研究を進めるといふ点です。研究者としては当たり前のことではあります。が、ややもすれば前者に偏りがちな現在の日本の研究環境において、日々自戒しております。宮内先生からも、健全な赤字研究を作るべき、という同義の金言を頂いております。

近年の地球環境問題を解決するには、各種高速輸送機器や流体機器等の高効率化と低環境負荷化が重要な技術課題であり、乱流制御によってもたらされる新たな技術革新への期待が高まっています。論文や研究費実績に必要以上に囚われることなく、これまでの研究成果をさらに発展させ、乱流制御を実用化し、世界のエネルギー問題や地球環境問題の解決の一助となるように、今後も奮励致します。最後となりますが、今後とも計算力学部門の発展に微力ながら尽力する所存ですので、今後ともご指導ご鞭撻の程宜しくお願い致します。



業績賞を受賞して

野々村 拓
東北大学

この度は、日本機械学会計算力学部門業績賞という大変栄誉ある賞をいただき、誠に光栄に存じます。ご推薦いただきました宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所の大山聖准教授をはじめ、一連の計算力学にかかる研究をご指導いただきました東京理科大学の藤井孝藏教授、また共同研究をさせていただいた先生方・学生諸氏、また審査をしていただきました先生方に深く感謝を申し上げます。

私は、2003年に東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻に修士学生として入学してから、当時の文部科学省宇宙科学研究所の藤井孝藏先生の研究室で主に数値流体力学の研究を始めました。ちょうど入学から半年のタイミングで宇宙航空研究開発機構に組織改組があった時期でした。研究テーマとしてロケットの射点においてロケット噴流から発生する空力音響波のシミュレーションを頂きました。この研究を修士課程学生から博士課程学生、ポスドク、宇宙科学研究所の助教として13年間行っております。2016年に東北大学へ異動してからはシミュレーションに関する研究を一旦止め、風洞試験を主な道具として新たな研究を進めてきています。本受賞は宇宙科学研究所で行ってきた空力音響場のシミュレーション技術および東北大学へ異動してからの計算力学で培った技術の風洞試験への適用に対していただきました。

修士学生として空力音響のテーマを頂いたときは、コンパクトスキームなど不連続のない流れ場において非常に高精度な計算手法が利用され始めた頃でした。特に、VisbalとGaitondeのJournal of Computational Physics誌掲載の論文で記述された一般座標で一様流を保持する方法が提案されたことで、複雑形状を含む実用計算が可能になりつつありました。一様流保持は藤井先生の教科書「流体力学の数値計算法」でも紹介されており、2次精度では有限体積と有限差分の考えが一致し、有限体積法の考え方で進めれば良いことが知られていますが、高次精度有限差分法の場合は必ずしも適用できません。VisbalとGaitondeの方法は、過去の差分法に対する一様流保持手法を素直にコンパクト差分法へ適用したものでした。しかしながら、私のテーマであったロケット噴流は最大マッハ数が2から5に達するような条件となり、不連続となる衝撃波の生成が避けられず、実用計算に利用され始めたコンパクトスキームを使うことができませんでした。不連続を捕獲しかつ高精度な手法として、Weighted Essentially Nonconcentrating (WENO)法や重み付きコンパクト差分法(WCNS)法が提案されておりましたが、曲線座標における一様流保持性に関する議論がありませんでした。そこで、WENO法とWCNS法に対して一様流保持ができないかを調べる研究を行い、WCNS法においてメトリックの評価を工夫(VisbalとGaitondeと同様の定式化に対して差分・補間スキームを適用する順番を工夫)することで、これが可能であることを示す研究成果に繋が

りました。当初数値流束の定義の理解があまり進んでおらず、いろいろ苦労をしましたが、当時研究室の先輩であった飯塚宣行氏(現宇宙航空研究開発機構)にご助言を頂くことでこの理解を深めることができました。当時藤井先生からは、いつも最終ゴールを見据えて、宇宙科学研究所の伝統(当時よくそう仰っしゃられていました)であった「やって見せる研究」をするよう言い聞かされており、上記の一般座標で使える手法の研究など実用的な解析技術の部分で学術に貢献できたのではないかと考えています。これらの経験により、最終ゴールを見据えた研究の進め方・考え方を学ぶことができ、一連の数値解析分野や実験分野の研究において非常に役に立ちました。

さて、この研究でWCNS法の特徴を理解し、3つの長所を明らかにしています: 1. 差分法にも関わらず変数補間が可能、2. リーマンソルバを含む様々な流束評価法が利用可能、3. 解像度が高い。これらの特徴を活かし、圧縮性多成分気体の解析において、WCNSを用いることで、界面における圧力・温度の虚偽振動が抑えられることを明らかにしました。また、このような特徴を持ったWCNS法を様々な場所で活用できるよう、5-9次精度までの高精度化、および、よりロバストな定式化を提案しました。これらWCNSにかかる数値解析の手法はNASA-Ames研究所やStanford大学のCTRのグループなどで利用されており、最先端研究へ微力ながら貢献できたかと自負しております。

さらに、研究を始めた当初に実装を検討したWENO法に関しても、WCNS法の一連の研究で得られた知見を活かし、中心差分部分と数値粘性部分を分けて考えるといった特殊な定式化を考えることで、一様流保持や多成分気体の界面から発生する虚偽振動を抑制できることを示しています。

現在、私は現在東北大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻においてシミュレーション分野から離れ、風洞を用いた実験空気力学分野での研究を行っていますが、上記研究での計算力学での知見を活かし、動的モード分解とカルマンフィルタを融合させた実験結果のノイズ除去手法や流体場の予測手法に関する研究を進めています。さらにこれらの技術をさらに発展させてデータ駆動科学を利用した計算コストを抑えた(疎な)スパースなセンサ位置の最適化手法に応用するなど、計算力学の知見・アルゴリズムを実験に活かした非常に先進的な研究を開始しており、これらの分野で成果を出しつつあります。具体的な成果はVol.122の「機械工学とインフォマティクス」特集号などに寄稿しているためそちらをご覧くださいと存じます。

以上のように、私はこれまでのシミュレーションでの貢献に加えて、計算力学の知見を生かした融合分野での研究を行っており、今後も計算力学に貢献をしていきたいと考えております。引き続き何卒よろしくお願い致します。

特集：EXAスケールコンピューティング「京」から「富岳」へ



特集にあたって 「EXA スケールコンピューティング「京」から「富岳」へ」

大島 伸行
北海道大学

スーパーコンピュータ「富岳」運用が始まり、先行機「京」の数10倍の計算性能が現実のものとなった。このような先端的HPCI（High-performance Computing Infrastructure：高性能計算環境）においてその高性能に見合う十分な成果を得るために、挑戦すべき対象ごと計算環境に適合した物理モデルや計算法の選定が重要であり、さらに、その実装には新たなソフトウェアや運用技術の開発が必須である。科学・工学の各分野において英知を集めてこれらの課題への取り組みが進められてきた。

計算力学部門では2021年9月開催の計算力学講演会（CMD2021）において「富岳」開発リーダーである松岡聡先生をお招きして特別講演『スパコン「富岳」と、その機械工学分野への適用による革新の可能性』を頂くとともに、フォーラム『EXAスケールコンピューティング「京」から「富岳」へ』を企画して、機械工学応用の柱となる材料科学および熱流体力学における先端的HPCIの最新動向をご紹介、ご討論していただいた。

その間、「富岳」は2020年6月よりスーパーコンTOP500リストにて第1位を2年間保ち続けており、また、2021年スーパーコンコンピューティング会議（SC2021）ではCOVID-19飛沫研究への応

用にてゴードン・ベル特別賞を受賞するなど、国内外でHPCI研究開発への関心をますます高めている。

このような機運をHPCI専門家だけでなく、計算力学部門、また、機械学会の幅広い技術・研究者の皆様と共有していただきたく、ニュース編集のご尽力をうけて、フォーラムご講演をいただいた4氏に加えて、先端的HPCIの機械工学応用へご貢献されておられる方々にも本特集へのご寄稿をお願いした。

機械工学がカバーする工学領域は幅広くHPCI応用の対象も限らないが、本特集では材料・熱流体・工学設計など様々な対象・視点での最新の研究動向と開発成果を解説いただけたことに感謝申し上げたい。講演会では議論し足りなかった内容も交え、ご参加できなかった会員の皆様にもニュースとしてお届けすることでさらに新たな関心とイノベーションを期待している。

現代は、5GネットワークやSociety 5.0に謳われるように、IT技術が大きく世の中を変えつつあり、スーパーコンを含む先端的HPCIもその一角を担うものとなる。どのような未来が拓かれるか、第一線の開発・研究のご紹介を拝読しながら、一読者として想像を広げることをお許し願う。



京、ポスト京の材料科学、そして富岳へ

毛利 哲夫
北海道大学/JST

2021年の9月23日に第34回計算力学講演会で表題のタイトルで話す機会を得た。今回、講演内容を報文にまとめよとの指示に基づいて本稿を記載している。表題からもわかるように、私の報告は、主として2005年前後から2020年頃にかけての「京」、「ポスト京」の時代における計算物質科学、とりわけ計算材料科学分野の動向について述べたものであり、いわば回顧録の感が強い。計算材料科学研究拠点の運営に携わった者として、そのような記録を記すことで責任の一端を果たしたいと思うが、正式な記録は既に成書として残している。むしろ、「京」へ至る前のいわば「pre-京」の時代における計算材料科学に対する問題意識や私見を、かつての筆者の研究室の年報に記した一文を要約・抜粋する形で述べ、「京」「ポスト京」へ至る必然性を記したい。そして、本稿の後半部では、講演の最後に触れた現在進行形の教育・人材育成についても記したいと思う。但し、それぞれの事業に関わった代表者名や関連者の氏名の記載は省略させていただくことをご容赦願いたい。

計算物質科学とは、少なくとも「京」「ポスト京」の文脈の中では、計算物性科学、計算分子科学、そして計算材料科学の3つのコミュニティから構成されている。これは2010年（ハードの開発を含む「京」プロジェクトは既に2006年に開始されている）から始まった「京」プロジェクトの戦略分野2「新物質・エネルギー創成」の構成コミュニティであり、その後、「ポスト京」を含む10年近くにわたって連携を保ってきた。

材料科学のコミュニティにおける計算材料科学の歴史は必ずしも最近始まったものではない。実際、科学研究費「計算機支援による材料設計」は、既に1990年には始動し、アモルファスの構造解析や、平衡状態図の計算、金属間化合物中の点欠陥挙動の解析、放射線照射における格子欠陥の生成過程、転位と点欠陥の相互作用、凝固シミュレーション、クラスターの構造揺らぎ、クラック伝播のシミュレーション等、まさに材料科学に特徴的な種々多様な計算が全国的な組織の下で展開されている。さらに、ここに至る萌芽となるアクティビティは、照射損傷のシミュレーション、固溶強化の統計論と転位運動のシミュレーション、平衡状態図の理論計算等、散発的ではあるが1970年代から芽生えていた。しかし、他の2つのコミュニティが計算材料科学のそれと大きく異なるのは、物性や分子では、それぞれのバックボーンに物性論、理論化学という理論分野が確立しており、理論の具体化の手段、そして理論と実験を繋ぐinterfaceとして計算が認知されていたという点である。これに対して材料科学では、もとより理論材料科学などというものは存在しておらず、従って、理論を実証・検証するというような動機は希薄であった。材料科学において計算は理論の具現化ではなく、実験の補足・補填という側面が強かったのではないかとと思われる。又、上述のように多様な計算が展開されているが、これらに用いられている手法の多くは現

象論的な手法（厳密ではないが、ここでは第一原理計算以外を総称してこのように呼ぶことにする。）であり、結果は実験との比較には使えても、実験との矛盾をfeedbackすべき背後の原理原則は亡羊としている。水平方向への汎用性はあっても、垂直方向への深度がない。理論、計算、実験が三位一体になって発展するのは、それぞれが妥協なき緊張感に満ちた役割を果たすときであり、計算におけるそれが第一原理計算であることに異論をささむ人はいないであろう。しかし、理論に源を発する現象論的計算は、自発的に第一原理計算へと発展するが、実験に付随する現象論的計算は往々にして定位置に留まる。残念ながら、上述の計算の多くは後者であり、又、それぞれのテーマは、当時の計算機のパワーをもって第一原理的なアプローチを試みるには複雑に過ぎた。そして、これに従事していた人々の多くが、一定の成果が得られると元来の実験に軸足を移していき、少数の後継者が第一原理計算に直接、間接に関りながら、実験が圧倒的に主導するそれぞれの分野で命脈を保ってきた。

強度や変態、組織等、材料科学の中核に存在する現象は、極めて非線形性が強く、非平衡状態にあり、さらに、多くの場合、非一様であることが本質であり、それ故に局所的な現象が全体を支配していくという、真に難しい問題である。これが材料科学の問題の本質である。又、計算手法という視点から見た場合、例えば強度、塑性変形の問題を取り上げると、材料の変形を担っている転位の密度は $10^6 \sim 10^{12} \text{cm}^{-2}$ のレベルにあるが、これは従来のシミュレーションで取り扱うには多すぎるし、統計力学の対象として扱うには少なすぎるという狭間の領域にある。このような「狭間の問題」が材料科学の中心には多くあるが、これら材料科学に固有の問題を扱うに、集積すべき原理は手中にあっても、これを紡ぐに計算機のパワーは小さ過ぎ、これを補填するには計算技法も未成熟であった。このような材料科学固有の問題に真正面から取り組み始めたのが「京」「ポスト京」の時代であったと思われる。

「京」の課題として、材料科学分野からは「実用材料の飛躍的高性能化にむけたマルチスケール組織設計・評価手法の開発」、「合金凝固組織の高精度制御を目指したデンドライト組織の大規模数値計算」、「超高速分子動力学計算による強誘電体薄膜キャパシタの高性能化」そして、「ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイミクス」が取り上げられたが、これらは、それぞれが構造材料、機能性材料、材料プロセスなど、材料科学の典型的な問題、あるいは、中心に位置づけられるものである。又、最初の一つが重点課題として予算やスパコンの使用条件で優遇的な措置を受けることができた。後者の3つは特別支援課題という位置づけであったが、それぞれの成果は目覚ましく、特に合金凝固組織の大規模数値計算はその後に特筆すべき発展をみた。

「ポスト京」では、重点課題「次世代産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」の中で、材料科学のコミュニティは、“高信頼性材料”をテーマに掲げ、次世代構造材料の強靱化の設計・制御を目指した計算を展開した。これは「京」における上述の「実用材料の飛躍的高性能化にむけたマルチスケール組織設計・評価手法の開発」を引き継いだものであるが、前者が強靱化機構の解明をはかるものであったのに対し、後者では、それを実現する組織の設計・制御と製造プロセスにまで踏み込んだものである。

このような実用的課題をターゲットにし得るようになったのは、一つには「京」のパワーに負うところが大きであるが、私見では、材料科学のように背後に多種多様な産業を有している学問分野にあって、計算材料科学の健全で持続的な発展の為に、pure academismの閉鎖社会を作らずに、文字通り「ハミルトニアンから高炉まで」を包括する多彩な人々に開かれたコミュニティを作り、そこに含まれる多種多様な手法を第一原理手法に向かって系統化していこうという機運が高まりつつあったこと、そして、計算物性科学や計算分子科学のコミュニティの大規模計算から大きな刺激を受け、真に材料科学らしい計算とは何かを真剣に追及していた点が大いと思う。

又、重点課題以外に萌芽的課題として、東北大学が代表機関となった「基礎科学の挑戦—複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」が採択され、“破壊とカタストロフィ”や“相転移と流動”など、4つのテーマに関して文字通り萌芽を育む研究を展開した。

さて、「京」の時代には、分野振興費として、人材育成・教育、アプリ講習会、配信講義などの予算が比較的潤沢に計上されていた。これを利用して、成果の普及活動が極めて効果的に行われたが、「ポスト京」では、全体のトーンが“基礎から実用化”へと移行し、人材育成のように直ぐに結果を出すことが難しいものに対しては、予算が大幅に削減されることになった。このことは「京」時代に培い蓄積してきた諸々のknow-howやアクティビティの凍結・中断になることから、我々は危機感を募らせ、上述の3つのコミュニティを代表する機関、即ち、東京大学・物性研究所（計算物性科学）、自然科学研究機構・分子科学研究所（計算分子科学）、東北大学・金属材料研究所（計算材料科学）の3つの研究所と、「京」時代に配信講義の実施を始めとして教育・人材育成で中心的な役割を果たしてきた大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センターの4機関が合同し、東北大・金研を代表機関として文科省の『科学技術人材の育成コンソーシアム事業』に応募し、2015年に「計算物質科学人事育成コンソーシアム事業」（Professional development Consortium for Computational Materials Scientists : PCoMS）として採択された。当事業は8年間のものであり、最初の5年間は補助金が交付されるが、残りの3年間は自主財源で運営することになっており、本稿を書いている2022年度は最終年度に当たる。

この事業では、「ポスト京」利用し、HPC技術を駆使した最先端の物質科学研究を遂行できる若手研究者を育成し、彼らに安定な雇用環境や多様な場で活躍できる機会を提供しようとする次世代研究者人材育成事業；（Next generation Professional Development; NPD）と、産業界に計算物質科学研究の成果・技術の汎用化を行う人材の育成を目指すイノベーション人材育

成事業（Innovative Professional Development; IPD）の2つの事業から成り立っており、前者は助教、准教授クラスを、後者はDC院生、PD、助教クラスを対象にしている。特に、前者では、国際公募により、計9名の助教、准教授を雇用し、（4機関の内、東北大・金研が3名、残る3機関が2名ずつ）、いずれも15名程度の応募者の中から厳選した。このNPD事業では、人材の流動性が一つのテーマとなっており、雇用された各人材は雇用元の研究機関で研究を遂行するだけでなく、一定期間他機関に滞在して、異分野・異領域の学問を吸収することが要件となっており、当初の規定では1回2週間以上の滞在を1年間に総計1か月以上行うことを義務付けていた。

又、IPD事業では、事業が採択された2015年から補助金の交付される初期5年間に、総計80名の人材を雇用し、特にインターンシップや合宿セミナーなどを通じて、材料開発の基礎、応用、実用化の階層を超えていく人材の育成を目的とした。

補助金の配賦が終了した2020年3月までの段階で、NPDでは滞在型研究の延べ日数が477日（41件）に達し、公表論文数も87件を超えるような活発な成果が上がった。9名は、既に次のポジションを得て新たな研究に着手しているが、本事業は2023年3月まで継続し、現在もその後の研究成果について年次報告会での報告を行っている。

IPDは80名の確保が極めて大きな課題であったが、関係者の並々ならぬ努力の甲斐あって、2021年3月末の段階で、総採用者数88名に達し、当初目標を超える110%を達成することができた。彼らは、計算科学の幅広い素養を養うカテゴリー A、HPC技術の修得を目指すカテゴリー B、そして、コミュニケーション力などを中心としたリサーチャー・ビジネススキルを醸成するカテゴリー Cの3つの単位構成の中から必要単位を履修し、さらに“フェロー”なる対象者には、1ヶ月以上の国内外企業、研究機関での長期インターンシップを課している。2020年度末の時点で、国内企業28名、国内研究機関2名、国内大学のべ10名（同一大学への複数回の派遣を含む）、海外大学・研究機関16名が、短くても1か月、長い者で3か月のインターンシップを行った。各参画機関はそれぞれに特徴のある単位の提供を行っているが、東北大・金研の特筆すべき単位の「合宿セミナー」がある。これは上述の3修得カテゴリーを一度に修得することができる2.5日程度の合宿形式のものであり、最先端の研究成果やアプローチを学ぶだけでなく、企業研究者の講演から、最新の企業研究等を知ることができる。さらに、能動的学習を取り入れたグループ実習や、講義と連動したコンピュータ実習等から構成されている。これと類似の総合的あるいは統合的な取り組みとして、東大・物性研では計算物質科学イノベーションキャンプを、阪大ではCMD(Computational Materials Design)ワークショップや計算科学技術特論(配信講義)を、そして分子研では、分子シミュレーションスクールや量子化学スクールを提供しており、いずれも多くの参加者を集めている。又、非常に重要なことであるが、これらのIPD事業のセミナーや各種のイベントは計算物質科学に携わる研究者だけではなく、実験科学に携わる研究者に対してもオープンにし、計算科学手法の汎用化を図っている。

教育・人材育成は息の長い事業であり、一足飛びに飛躍的な成果が得られるものではない。長年の地道な努力によって初めて成果が現れ始めるものである。又、結果の多角的な検証作業

も必要である。本事業は2019年度で補助金が打ち切りとなり、その後2022年度までは自己資金での継続を求められているが、現在も諸々の活動を継続しながら、コーディネーターを中心に各種セミナーなどへの参加者のアンケートなどの解析から、教育の実効化に関する検証を行っているところである。本事業の内容や成果についてはホームページに詳しく、興味のある方は“PCoMS”で探索可能である。

最後に、再度、計算材料科学の一般論に戻ろう。1980年代からの“第一次計算材料科学ブーム”なるものの一時の興隆とその後の長い衰退を経験してきた者として強く感じるのは、「原子番号のみで結果が得られる」などという表層的なキャッチフレーズを標榜するのではなく、あくまでも地道な取り組みと、実験研究者や材料開発の現場技術者との協調・協働を大切にしなければいけないということである。そして、継承すべきは、プログラムコードやHPC技術のみではない。多少口幅ったいが、

「京」における材料科学コミュニティの立ち上げの時期に、ある先生の果たされた役割は大変大きく、その先生のご尽力がなければ今の計算材料科学はなかったということを書いておきたい。仮にその先生の名をA先生としておこう。物性科学がご専門のA先生からは、3つのコミュニティで最も規模が小さく大規模計算からも距離のあった私達に対して、“本当に材料科学で京を使う必要があるのか”という大変厳しいコメントや、遅々として進まぬ研究計画に対して叱正をいただいたが、私達の知らないところで他のコミュニティの人達に対して、計算物質科学の調和的な発展のためには材料科学を必ず入れなければいけない、ということを手紙で主張して下さっていた。一つの分野の発展のためには、公益をしっかりと見据えて、私情を離れたところで正論を主張する善意の人が必要なのだということを強く思う。富岳へ、そして更なる後継事業に継承すべきは、このような高邁な志であらうと思う。



材料組織予測シミュレーションの変革 —マルチスケールからクロススケールへ—

高木 知弘
京都工芸繊維大学 機械工学系

1. はじめに

フェーズフィールド法が注目されてから約30年が経過した。メゾスケールにおける材料組織予測の分野では、従来モンテカルロ法やセル・オートマトン法が用いられていたが、組織形態が特に複雑な合金凝固時のデンドライト成長問題ではフェーズフィールド法に対する期待は特に大きく、多くの研究者がフェーズフィールド法の研究に着手した。しかしながら、フェーズフィールド法は拡散界面モデルであり、狭い界面領域に複数の格子点を配置することから、計算負荷が非常に大きく、当時の計算機環境では取り扱える時空間領域に大きな制限があった。

2010年ごろに当該分野では使用実績がほとんどないGPU計算機を導入し、デンドライト凝固のフェーズフィールドシミュレーションを行ったところ、当時研究室にあったCPU計算機に比べて計算速度が約70倍となり大変驚いたのを覚えている。GPUはCPUに比べて非常に多い数百～数千のコアを有しており、これを超並列させることで計算高速化を達成している。フェーズフィールド方程式は、一般的な陽解法で離散化が可能(効率的なメモリアクセスが可能)であり、特にデンドライト成長のフェーズフィールドモデルでは1ステップに必要な計算回数が多い(演算密度が高い)ため、GPU計算とは大変相性がいい。GPUの欠点はメモリが少ない点であり、大規模計算を行おうとすると並列計算が必須になる。青木らのグループは2011年にフェーズフィールド法の複数GPU並列実装を行い、東京工業大学のGPUスーパーコンピュータTSUBAME2.0において4,000基のGPUを用いた計算によって1 PFlopsを達成した[1]。これ以降、筆者らのグループではTSUBAMEを用いた大規模フェーズフィールドシミュレーションによる材料組織予測に関する研究を続けている[2-5]。TSUBAME2.0に搭載されていたGPUはNVIDIA Tesla M2050であり、単精度演算性能が1.03 TFlopsであった。約10年経過した現在、最も高速なGPUであるNVIDIA Tesla A100の単精度演算性能は19.5 TFlopsであり、M2050に比べて約20倍の高速化、メモリも3 GBから80 GBと約27倍となっている。筆者の研究室はA100を8基搭載した並列GPU計算機を有しており、この性能は20年前の世界最高性能スパコンに匹敵する。富岳を用いればさらなる大規模計算が可能である。このような状況で、現在では大規模かつ高速なフェーズフィールドシミュレーションが可能となっており、その計算可能領域は実験観察サイズに到達しようとしている。

以上のような計算機の発展に伴い、メゾスケールにおける材料組織予測の数値シミュレーションは、その役割が変わろうとしている。従来は現象の再現が主な目的で、いわば実験の後追いという位置づけであり、それをどう材料設計やプロセス設計につなげるのかという課題もあった。計算機の性能が向上し、取り扱える時空間スケールが拡大し、データサイエンスとの融合によって数値シミュレーション駆動の材料開発も見えてきた印象がある。本稿では、フェーズフィールド法を用いた材料組織予測の最近の変革について概観したい。

2. クロススケールモデリング

計算機の発展にともない、計算材料科学分野における従来のマルチスケールモデリングの考え方が変わろうとしている。図1は、学際研究の分類方法[6]を参考に澁田ら[5]が提案したマルチスケールモデリングの変遷である。従来の1. Multi-scale modelingでは、例えば第一原理計算や分子動力学(MD)シミュレーションによって得られた情報を平均化してより上位のモデルの入力値として用いていた。計算機の発展にともない、各モデルが取り扱える時空間領域が拡大し、それらが重複するようになった。例えば、固液界面特性の異方性に起因する凝固時の異方性形態や[7]、粒界エネルギーを駆動力とする多結晶粒成長が[8]、MDシミュレーションによって再現できるようになった。さらに、MDシミュレーションにより得られた材料組織情報を直接フェーズフィールドシミュレーションに引き継ぐことも可能となっている[9, 10]。この状況は図1の2. Inter-scale modelingに対応し、異なるモデル間の直接的なマッピングを可能としている。現在はさらに発展し、3. Cross-scale modelingの段階に入ったといえる。このクロススケールモデリングでは、異なるスケールで用いられていたモデルにおいて全く同じ時空間スケールの取り扱いが可能となり、データ駆動型の新しい方法や取り組みが可能となる。さらに計算機の高速化が進めば、これまでのマルチスケールの枠組みはなくなり、新しい階層化が生まれてくる可能性がある。これが4. Trans-scale modelingである。

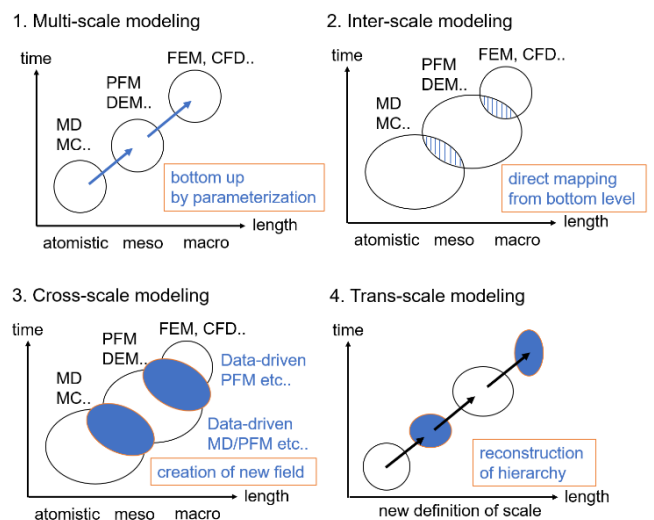


図1 計算可能な時空間領域の拡大に伴うマルチスケールモデリングの変遷。 [5]

3. 計算と実験の融合

材料組織の中で、筆者は最近特に凝固組織予測の研究に力を入れている。凝固組織の形成過程は、固体内の組織変化と異なり、液相の流動や固体の運動を伴い複雑である。合金凝固は不透明かつ高温な現象であるため、凝固過程の直接観察は不

可能であり、凝固完了後の断面組織観察を行うのが一般的であった。そのため、凝固組織の形成過程を観察するために、金属と同じ結晶構造を有する透明有機材料によるその場観察実験が多く行われてきた[11]。2000年ごろからX線イメージが行われるようになり[12]、金属合金凝固の時間分解その場観察が行われるようになった。従来は、厚さ100 μm程度の薄膜内での観察が行われていたが[13, 14]、現在では時間分解X線トモグラフィによる円柱試料の3次元組織の観察も可能となっている[15, 16]。

計算では大規模シミュレーションが可能となり、実験による dendrait 凝固形態の時間発展を観察できるようになった現在、計算と実験を直接比較する方向性は極めて自然である。計算を実験と全く同じ条件で行い、その結果が等しくなれば、その計算で用いられるパラメータは真の値といえる。従来、物性値を取得するにはそれぞれ専用の計算や実験が行われてきたが、そのような作業を行うことなく、実験観察そのままの状態から物性値が推定可能となることが期待できる。さらに、そのような真の物性値を用いたシミュレーションは熱力学に基づく高精度なフィルタともいえる。フェーズフィールドシミュレーションの一つの課題は物性値の欠如であり、その場観察実験の課題は時空間解像度である。計算と実験の直接比較は、両者の課題を同時に解決できる可能性があり、まさに相補的手法となりうる。計算と実験の融合は従来技術の課題解決のブレークスルーであり、その期待は非常に高い。

4. データ同化

計算と実験の融合を可能とする一つの有力な方法がデータ同化である[17]。データ同化は地球科学の分野で発達してきた学問であり、日々の天気予報でも用いられている。流体分野でも積極的に活用されており、既に書籍も出版されている[18]。フェーズフィールドによる組織予測の分野では小山が初めてその使用を提案した[19]。その後、山中のグループは積極的にデータ同化の研究を進め[20-26]、大野や澁田ら[27-29]もいくつかの問題にデータ同化を適用している。ここではデータ同化のイメージのみを紹介する。詳細は書籍[17, 18]や解説記事[30, 31]を参照頂きたい。

データ同化には逐次データ同化と非逐次データ同化がある。ここでは、既存のコードをそのまま使える逐次データ同化に着目する。一般には、実験において得られる材料組織画像の時間間隔は、数値シミュレーションより粗い。数値シミュレーションを行い、実験結果が利用できる時間で計算と実験の組織の比較を行い、計算結果を修正してシミュレーションを再開する。これを繰り返すことで、数値計算で用いるパラメータは真値に近づくことが期待される。さらに、一般的に数値シミュレーションの方が時空間解像度が高いため、実験では得られない連続的なイメージや、高解像度データも取得可能である。このように、実験を取り込んだシミュレーションを行うことができれば、材料物性値の欠如という数値シミュレーション側の課題と、時空間解像度不足という実験側の課題を同時に解決できる。この際、数値シミュレーションを一つだけ行うのではなく、複数のシミュレーションを同時に行えば統計的な視点でデー

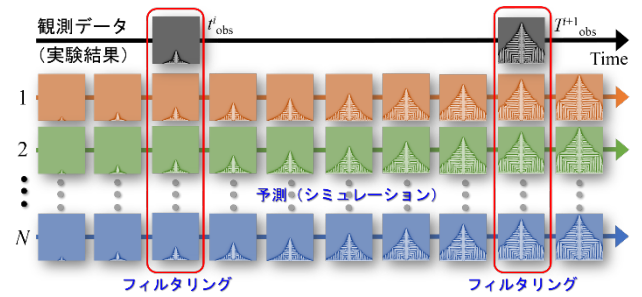


図2 逐次データ同化のイメージ。

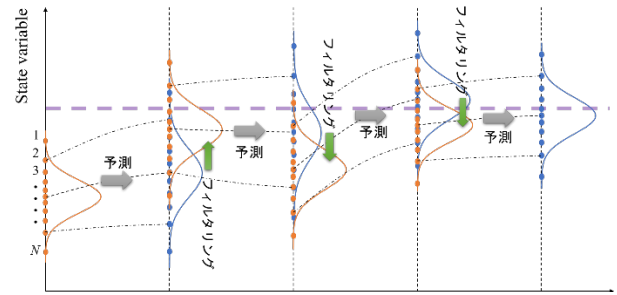


図3 アンサンブルカルマンフィルタを用いた際のある状態変数の時間変化イメージ。

タの修正を行うことが可能となる。逐次データ同化は、数値シミュレーションに対応する「予測」と、シミュレーション結果を実験結果に基づいて修正する「フィルタリング」の2つの作業から構成される。

図2は先に述べた逐次データ同化のイメージ、図3は逐次データ同化の一つであるアンサンブルカルマンフィルタを用いた際の、ある一つの状態変数の時間変化イメージを示す。時間 $t = 0$ で異なる初期状態から N 個のシミュレーションを開始し、実験結果が利用できる時間 $t = t_{obs}$ においてベイズ推定に基づくフィルタリングを行い、シミュレーション結果を修正する。この際、アンサンブルカルマンフィルタでは状態の分布を正規分布として考える。「予測」と「フィルタリング」の2つの作業を繰り返すことで、状態量の平均値は紫色の破線で示す真値に近づき、また、その状態量のばらつきも徐々に小さくなり、数値シミュレーションの結果が徐々に実験結果に近づいていく。

5. フェーズフィールド法を用いたデータ同化

フェーズフィールド法を用いたデータ同化の例を2つ紹介する。一つ目は双子実験と呼ばれる数値実験である。データ同化のプログラムを作成した際、それが正しく機能していることを確かめるために、実験結果の代わりにシミュレーション結果を用いて物性値推定などを行う。図4は、二元合金の dendrait 凝固を再現可能な定量的フェーズフィールドモデル[32, 33]を用いた Al-4wt%Cu の2次元一方向凝固シミュレーションの結果である。計算は平滑な固液界面からスタートし、上下には周期境界条件を設定しているため、 dendrait 先端位置は必ずしも領域中央にはこない。このシミュレーションでは、当然ながらフェーズフィールド計算に必要な全ての物性値を入力して行われている。ここで、図4のシミュレーション結果を実験で観察された組織とみなして、液相の溶質拡散係数 D_l と固液界面エネルギーの異方性強度 ϵ の同時推定を、アンサンブルカルマンフィルタを用いて試みた。

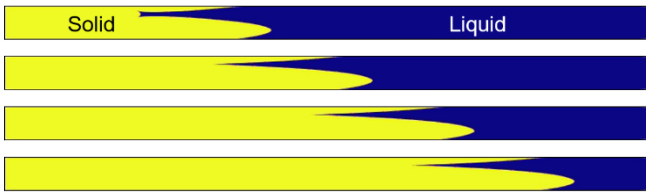


図4 フェーズフィールド法によるAl-4wt%Cuの2次元一方向凝固シミュレーション結果. 左から右に温度勾配 $G = 9 \text{ K/mm}$ を与え, 一定の冷却速度 $R = 5 \text{ K/min}$ で系全体を一様に冷却している.

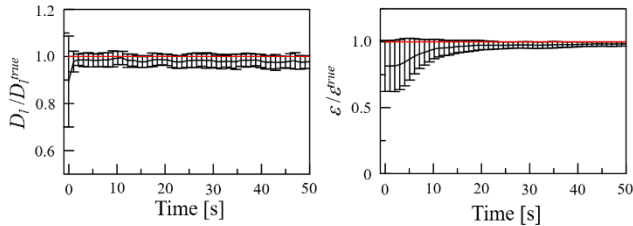


図5 図4の凝固形態を観測データとするデータ同化による液相の溶質拡散係数 D_l と固液界面エネルギーの異方性強度 ε の推定結果.

図5に D_l と ε の推定結果を示す. 縦軸はそれぞれ図4のシミュレーションで用いた値 $D_l^{\text{true}} = 4.4 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, $\varepsilon^{\text{true}} = 0.02$ で除して無次元化して示している. つまり, 縦軸の1が正しい値である. 初期値は適当な値からスタートし, アンサンブル数 $N = 46$ のデータ同化を行った. 液相の拡散係数 D_l は1回目のフィルタリングで真値に近い値が推定されている. 界面エネルギーの異方性 ε は, 徐々に真値に近づいている. この収束性の違いは, 凝固形態の決定に対する寄与度の違いを示している. 仮に図4の計算領域の高さ方向を小さくした1次元計算を行ったとすると, その結果に ε は関与しないため, 当然ながら ε は推定できない. つまり, 推定しようとするパラメータが強く反映された組織を用いた方が, パラメータを推定しやすい. また, 図5から推定値が完全に真値になっていないことがわかる. これは, 本データ同化において, 観測データは図4に示す領域であるが, これをそのままデータ同化に用いると計算コストが膨大となるため, デンドライト先端を追跡した小さい領域を対象とするデータ同化を行っており, その際の領域追跡による誤差が表れたものである. 実際の実験結果を用いる際, 条件にもよるが, そのままの条件を完全にデータ同化することは, 現在の計算機が高性能になっているといってもまだ性能が不十分である. このため, データ同化には適切にデータを抜き取るなど, 効率的に計算を行う技術開発も必要である.

次にMDシミュレーションの結果を観測データとするデータ同化を紹介する[29]. 図6は, 純Niの等温凝固のMDシミュレーションの(a)初期状態と(b)固相核成長の様子を示している. 図6(b)のように, (001)面において綺麗な4方向対称性を有する異方性核の時間発展が確認できる. この固液の二値化された状態を文献[9]の方法を用いてフェーズフィールド変数で表現したものを観測データとして, フェーズフィールド法によるデータ同化を行った[27]. ここでは, 界面カイネティック係数 β_0 , その異方性強度 ε_k , 界面エネルギー σ_0 , その異方性強度 ε_c の合計4パラメータを同時推定した. このように多数のパラメータを同時に推定できることもデータ同化の魅力である[28].

図7に推定結果を示す. いずれも時間とともにある一定値に収束

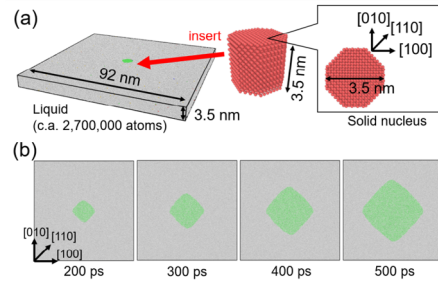


図6 純Niの等温凝固のMDシミュレーション. (a) 初期状態, (b) 凝固形態(緑部)の時間発展. 過冷度は $\Delta T = 200 \text{ K}$. [29]

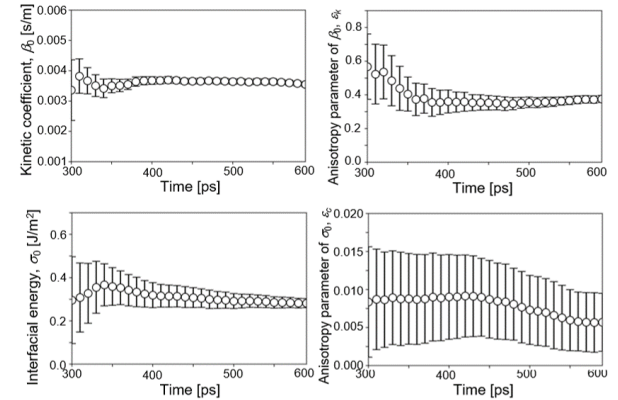


図7 図6(b)の結果を観測データとするデータ同化における界面カイネティック係数 β_0 , その異方性強度 ε_k , 界面エネルギー σ_0 , その異方性強度 ε_c の推定結果. [29]

することがわかるが, 界面エネルギーの異方性 ε_c のみ収束挙動が確認できなかった. これは, 過冷却度の高い現象を対象としているため, 界面エネルギーよりカイネティクス係数の方が成長形態に対する寄与度が大きく, 固液界面エネルギーの異方性 ε_c の寄与が小さいためと考えられる. 他のパラメータの収束性は良好であり, 温度を変えた評価を行うことで, これらのパラメータの温度依存性の評価を可能とした[27, 29]. 一方で, 図5の双子実験に比べると収束性や安定性は低い. MDの固液界面は揺らいでおり, 完全な対称性は得られていないことなどが要因である.

6. おわりに

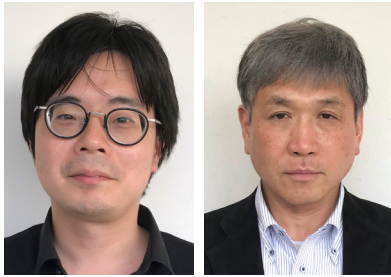
計算機の発展によって, 従来のマルチスケールモデリングの枠組みが変化し, 実験の追従に終始していたフェーズフィールド法によるメゾスケールにおける材料組織予測の役割が多様化している. ここでは, データ同化を用いてフェーズフィールドシミュレーションに必要な物性値の推定を紹介した. しかしながら, これまで報告されているデータ同化の多くは双子実験に限定されており, 実際の実験結果を用いたデータ同化は未だほとんど行われていない. 実際の実験結果にはノイズが多く含まれ, 時空間解像度も低く, 双子実験とは比にならない困難さがあることが予想される. また, 凝固形態そのものではなく, X線の透過像を観測データとするデータ同化の開発なども必要である. さらに, 系統的な評価を可能とする高速データ同化の開発のため, 並列計算やアダプティブメッシュ法[34]などの高性能計算をフルに活用した技術開発も必須である. フェーズフィールド法にデータサイエンスを融合する研究はまだはじまったばかりであり, この技術開発を積極的に推し進め, シミュレーション駆動の材料開発技術, 材料開発のデジタルトランスフォーメーションやデジタルツインを達成する必要がある.

謝辞

ここで紹介した研究成果は、東京大学 澁田靖教授、北海道大学 大野宗一教授との共同研究として行われたものです。また、高性能計算に関しては、東京工業大学 青木尊之教授、京都工芸繊維大学 坂根慎治助教の支援を受けました。また、今回紹介した研究の一部は科学研究補助金基盤研究(A) 20H00217の支援を受けて行われました。

参考文献

- [1] T. Shimokawabe, T. Aoki, T. Takaki, A. Yamanaka, A. Nukada, T. Endo, N. Maruyama, S. Matsuoka, Peta-scale phase-field simulation for dendritic solidification on the TSUBAME 2.0 supercomputer, International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 2011, pp. 1-11.
- [2] T. Takaki, T. Shimokawabe, M. Ohno, A. Yamanaka, T. Aoki, Unexpected selection of growing dendrites by very-large-scale phase-field simulation, *J. Cryst. Growth* 382 (2013) 21-25.
- [3] T. Takaki, Phase-field modeling and simulations of dendrite growth, *ISIJ Int.* 54(2) (2014) 437-444.
- [4] Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takaki, Solidification in a Supercomputer: From Crystal Nuclei to Dendrite Assemblages, *JOM* 67(8) (2015) 1793-1804.
- [5] Y. Shibuta, M. Ohno, T. Takaki, Advent of Cross-Scale Modeling: High-Performance Computing of Solidification and Grain Growth, *Adv. Theory Simul.* 1(9) (2018) 1800065.
- [6] 赤司秀明, 一松信, 学際研究入門: 超情報化時代のキーワード, 文園社1997.
- [7] Y. Shibuta, K. Oguchi, M. Ohno, Million-atom molecular dynamics simulation on spontaneous evolution of anisotropy in solid nucleus during solidification of iron, *Scripta Materialia* 86(0) (2014) 20-23.
- [8] S. Okita, E. Miyoshi, S. Sakane, T. Takaki, M. Ohno, Y. Shibuta, Grain growth kinetics in submicrometer-scale molecular dynamics simulation, *Acta Mater.* 153 (2018) 108-116.
- [9] E. Miyoshi, T. Takaki, Y. Shibuta, M. Ohno, Bridging molecular dynamics and phase-field methods for grain growth prediction, *Comput. Mater. Sci.* 152 (2018) 118-124.
- [10] Y. Shibuta, S. Sakane, E. Miyoshi, T. Takaki, M. Ohno, Micrometer-scale molecular dynamics simulation of microstructure formation linked with multi-phase-field simulation in same space scale, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* 27(5) (2019) 054002.
- [11] R. Trivedi, K. Somboonsuk, Pattern formation during the directional solidification of binary systems, *Acta Metallurgica* 33(6) (1985) 1061-1068.
- [12] R.H. Mathiesen, L. Arnberg, F. Mo, T. Weitkamp, A. Snigirev, Time Resolved X-Ray Imaging of Dendritic Growth in Binary Alloys, *Phys. Rev. Lett.* 83(24) (1999) 5062-5065.
- [13] H. Yasuda, K. Morishita, N. Nakatsuka, T. Nishimura, M. Yoshiya, A. Sugiyama, K. Uesugi, A. Takeuchi, Dendrite fragmentation induced by massive-like δ - γ transformation in Fe-C alloys, *Nat. Commun.* 10(1) (2019) 3183.
- [14] H. Yasuda, I. Ohnaka, K. Kawasaki, A. Sugiyama, T. Ohmichi, J. Iwane, K. Umetani, Direct observation of stray crystal formation in unidirectional solidification of Sn-Bi alloy by X-ray imaging, *J. Cryst. Growth* 262(1-4) (2004) 645-652.
- [15] K. Nakano, T. Narumi, K. Morishita, H. Yasuda, Characterization of Growing Dendrites in CrMnFeCoNi High-Entropy Alloy by Time-Resolved and In-Situ Tomography, *Mater. Trans.* 61(4) (2020) 596-604.
- [16] T. Narumi, T. Nakata, R. Kobayashi, H. Yasuda, Time-resolved and in-situ Observation of Semisolid Deformation in Al-Cu Alloys with Equiaxed and Columnar Grain Structures by Using a Combination Technique of 4D-CT and 3DXRD, *ISIJ Int.* 61(5) (2021) 1567-1578.
- [17] 樋口知之, 上野玄太, 中野慎也, 中村和幸, 吉田亮, データ同化入門: 次世代のシミュレーション技術, 朝倉書店2011.
- [18] 大林茂, 三坂孝志, 加藤博司, 菊地亮太, 照井伸彦, データ同化流体科学: 流動現象のデジタルツイン, 共立出版2021.
- [19] T. Koyama, Y. Tsukada, Y. Kawai, Estimation of materials parameters by data assimilation with phase-field method, International Conference on Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials 2015, 2015, pp. 831-832.
- [20] S.-i. Ito, H. Nagao, A. Yamanaka, Y. Tsukada, T. Koyama, M. Kano, J. Inoue, Data assimilation for massive autonomous systems based on a second-order adjoint method, *Phys. Rev. E* 94(4) (2016) 043307.
- [21] K. Sasaki, A. Yamanaka, S.-i. Ito, H. Nagao, Data assimilation for phase-field models based on the ensemble Kalman filter, *Comput. Mater. Sci.* 141(Supplement C) (2018) 141-152.
- [22] A. Yamanaka, Y. Maeda, K. Sasaki, Ensemble Kalman filter-based data assimilation for three-dimensional multi-phase-field model: Estimation of anisotropic grain boundary properties, *Mater. Des.* 165 (2019) 107577.
- [23] A. Yamanaka, K. Takahashi, Data assimilation for three-dimensional phase-field simulation of dendritic solidification using the local ensemble transform Kalman filter, *Mater. Today Commun.* 25 (2020) 101331.
- [24] A. Ishii, A. Yamanaka, E. Miyoshi, Y. Okada, A. Yamamoto, Estimation of solid-state sintering and material parameters using phase-field modeling and ensemble four-dimensional variational method, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* 29(6) (2021) 065012.
- [25] K. Takahashi, A. Yamanaka, Quantitative three-dimensional phase-field modeling of dendritic solidification coupled with local ensemble transform Kalman filter, *Comput. Mater. Sci.* 190 (2021) 110296.
- [26] A. Ishii, A. Yamanaka, E. Miyoshi, A. Yamamoto, Efficient estimation of material parameters using DMC-BO: Application to phase-field simulation of solid-state sintering, *Mater. Today Commun.* 30 (2022) 103089.
- [27] M. Ohno, Y. Oka, S. Sakane, Y. Shibuta, T. Takaki, Bayesian inference of solid-liquid interfacial properties out of equilibrium, *Phys. Rev. E* 101(5) (2020) 052121.
- [28] E. Miyoshi, M. Ohno, Y. Shibuta, A. Yamanaka, T. Takaki, Novel estimation method for anisotropic grain boundary properties based on Bayesian data assimilation and phase-field simulation, *Mater. Des.* 210 (2021) 110089.
- [29] Y. Nagatsuma, M. Ohno, T. Takaki, Y. Shibuta, Bayesian Data Assimilation of Temperature Dependence of Solid-Liquid Interfacial Properties of Nickel, *Nanomaterials* 11(9) (2021) 2308.
- [30] 長尾大道, 材料科学に資するデータ同化, ふえらむ, 2021, pp. 517-523.
- [31] 山中晃徳, データ同化との融合によるフェーズフィールド法の進展, *軽金属* 69(12) (2019) 591-601.
- [32] M. Ohno, K. Matsuura, Quantitative phase-field modeling for dilute alloy solidification involving diffusion in the solid, *Phys. Rev. E* 79(3) (2009) 031603.
- [33] M. Ohno, Quantitative Phase-field Modeling and Simulations of Solidification Microstructures, *ISIJ Int.* 60(12) (2020) 2745-2754.
- [34] S. Sakane, T. Takaki, T. Aoki, Parallel-GPU-accelerated adaptive mesh refinement for three-dimensional phase-field simulation of dendritic growth during solidification of binary alloy, *Materials Theory* 6(1) (2022) 3.



燃焼解析ソフト HINOCA の今までと今後

南部 太介 (左)
溝渕 泰寛 (右)
国立研究開発法人 宇宙航空研究開発機構 航空技術部門

HINOCA (火神) は第1期戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)「革新的燃焼技術」(FY2014-2018)のなかで構築された自動車エンジン燃焼解析ソフトである(1)。HINOCAの特徴は、等間隔直交格子とghost-cell型のImmersed Boundary (IB)法(2)を用いることにより、物体形状データ(ただし現状ではSTL形式に限られる)を与えれば、格子生成を経ずに直ちに数値シミュレーションを開始できる点である。これにより、従来数週間から数か月要していたといわれるメッシュ作成の期間をほぼなくすことに成功している。図1にHINOCAを使った自動車エンジン燃焼計算の流れを示す。本報ではSIP期間中の自動車エンジン解析への取り組み、SIP終了後に開始した航空エンジン解析への適用、HINOCAをベースに開発したソフトを用いた大規模解析による噴霧燃焼現象解明への取り組みについて紹介する。

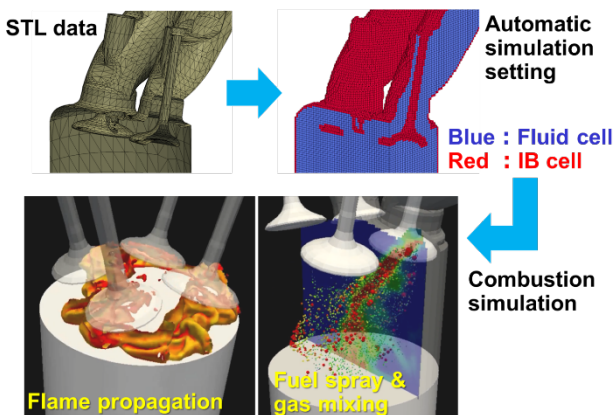


図1：HINOCAを用いた自動車エンジン燃焼解析の流れ

SIP期間中にはJAXA(宇宙航空研究開発機構)を含む幾つかの大学、研究機関が共同でHINOCAの構築を行った。JAXAがバルブおよびピストンといった移動境界を含む複雑形状内の圧縮性流れを解析するための流動プラットフォームを構築し、そのプラットフォームに海洋技術安全研究所、北海道大学、大阪大学、早稲田大学、広島大学、東北大学、大分大学が自動車エンジン用のサブモデルを組み込むことによりHINOCAはエンジン燃焼の一連の現象を解析できるソフトとなった。また、JAXAが担当した流動計算については、自動車用内燃機関技術研究組合(AICE)の支援のもと検証会を毎月開催し、AICEメンバー各社が提供するデータを用いた精度検証および課題解決が行われた。

JAXAでのプログラム開発は主としてJAXA Supercomputer System Generation 2 (JSS2)上で実施した。JSS2は京と同じく富士通製PRIMEHPC(ただし京に使われたFX10の後継機FX100)を中核とし、京の約1/3の理論性能値を有するシステムであった。そのような開発環境で長期間仕事をしてきたこともあり、SIPに参加した当初には数万並列程度の大規模シミュレーションを想定していた。しかし、SIP参加後、ユーザーが求める解析はそのような

大規模解析ではなく、数十から百数十並列程度の規模の解析であることが分かった。そのため、方針を変更し、小さな計算資源で短時間に結果を出す手法の開発に注力することになった。その中で幾つかの新しい計算手法が開発され(3)、IB法の課題である保存性の改善を図りつつ計算コストを削減した。

自動車用HINOCAの流動プラットフォームは、SIP革新的燃焼技術後もAICEからの研究委託により、継続的に高速化、高精度化を進めている。また、日本電気株式会社からの研究委託により、SIP終了時点の流動プラットフォームはベクトル計算ユニットSX-Aurora TSUBASA向けに改変され、ベクトル化された流動プラットフォームはベンダーよりライセンス販売されるに至っている。

SIP後はJAXAの研究開発としてHINOCAの航空エンジンへの適用が進められている。航空エンジン用HINOCA(HINOCA-AE)には、コンパクト差分(4)と時間積分陰解法の内部計算収束性を向上させるためのMulti-grid法が導入されている。航空エンジン燃焼器には自動車エンジン燃焼室のような可動部分がないため、導入はスムーズであった。高精度差分の導入による格子数削減、Multi-grid法の導入による内部反復回数の削減により、計算時間を大幅に削減することに成功している。また、航空エンジンの燃焼器内で用いられることの多い多孔板を模擬するためのモデルや、拡散燃焼にも対応できる燃焼モデルの実装などを進めている。

航空エンジン燃焼器解析の精度を向上させ、かつ低コスト化するためには、解析プラットフォーム(HINOCA-AE)の開発だけではなく、各物理現象のモデルを高度化する必要がある。液体燃料の燃焼過程では、燃料微粒化、蒸発、混合、化学反応が起こっているが、その詳細はよく分かっていない。それらの現象を実験的に観察することは難しいため、詳細な物理モデルを組み込んだ数値実験が、その詳細を知る有効な手段と考えられる。そこで著者らはHINOCAをベースに二相流詳細解析ソフトを開発し、微粒化から燃焼に至る素過程の高精度シミュレーションに取り組んでいる。

図2は航空エンジン条件(気液密度比、Weber数)での燃料微粒化を世界で初めて詳細解析で再現した結果である。従来この種の解析が行われてきた低密度比、低Weber数の条件ではKelvin-Helmholtz不安定性により一次微粒化が顕著であったが、航空エンジン条件ではRayleigh-Taylor不安定性によってもたらされる液系の生成が大きな役割を果たしていることが確認された(5)。

図3は液滴群の蒸発過程を詳細な解析で再現した世界初の結果である(6)。これは液滴を点近似でモデル化することなく、VoF法等を用いて気液界面を補足しつつ、液滴内部まで格子で離散化した詳細な解析となっている。液滴同士の干渉による個々の蒸発速度の低下を定量的に評価することができており、今後そのモデル化を実施していく予定である。このシミュレーションは2021年に導入を完了したJAXAの新しいスパコンJSS3のHPCシステムのおよそ半分の計算資源を3週間占有して得ら

れた結果である。JSS3のHPCシステムは富岳と同じアーキテクチャをもつ規模が約1/30のシステムである。

これらの研究は将来、複数液滴の群燃焼解析及びそのモデル化を経て、噴霧燃焼の高精度な解析へと発展させていきたいと考えている。その際には富岳の先の計算機システムが必要となるであろう。

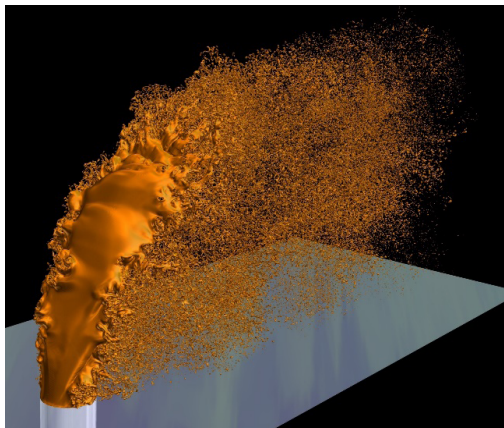


図2：燃料微粒化の詳細数値解析結果(気液界面分布図)

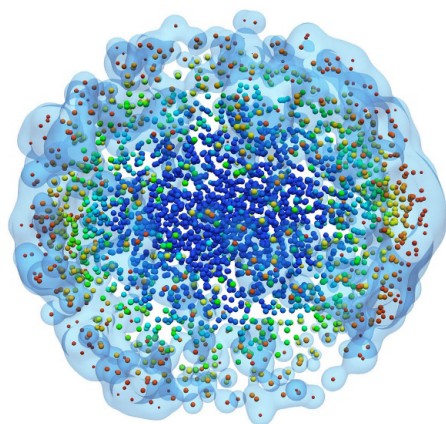


図3：液滴群蒸発の詳細解析結果(燃料成分の等値面及び、液滴表面の温度分布を示している)

謝辞

本研究の一部は、総合科学技術・イノベーション会議のSIP(戦略的イノベーション創造プログラム)「革新的燃焼技術」(管理法人：JST)によって実施された。SIP期間中HINOCA開発に尽力いただいたSIP革新的燃焼技術関係者の皆様、同制御チームCAEグループクワスター大学の皆様、情報提供等のご支援、ご助言をいただいている自動車用内燃機関技術研究組合(AICE)の皆様、プログラム開発を支援いただいている株式会社菱友システムズの皆様に謝意を表します。

本報で紹介した解析にはJAXA Supercomputer System Generation 2および3(JSS2, 3)を利用した。

参考文献

- (1) JST HP, https://www.jst.go.jp/sip/event/k01_hinoca/index.html (アクセス日：2022年4月10日)
- (2) Mittal, R. and Iaccarino, G., "Immersed Boundary Methods, Annual Review of Fluid Mechanics", Vol.37 (2005), pp.239-261.
- (3) Yao, H, Nambu, T and Mizobuchi, Y., "An immersed boundary method for practical simulations of high-Reynolds number flows by k- ϵ RANS models", Journal of Fluid Science and Technology, Vol. 16, Issue 1(2021), jfst0007.
- (4) Lele, S. K., "Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution", Journal of Computational Physics, Vol.103 (1992), pp.16-42.
- (5) Nambu, T. and Mizobuchi, Y., "Detailed Numerical Simulation of Primary Atomization by Crossflow under Gas Turbine Engine Combustor Conditions," Proceedings of the Combustion Institute, Vol 38, Issue 2 (2021), pp3213-3221.
- (6) 南部太介, 溝渕泰寛：液滴群蒸発の大規模数値解析とモデル化, 第59回燃焼シンポジウム.



「富岳」で目指すSociety 5.0時代のスマートデザイン

坪倉 誠
理化学研究所 / 神戸大学

1. はじめに

少子高齢化に伴う労働生産性の低下、確実に来襲する新興ウイルスによるパンデミックや予期せぬ自然災害への対応、さらにはカーボンニュートラル社会の実現等、激変する社会に対応して今後も我が国がものづくり大国としてその国際競争力を維持していくためには、単なる性能試験の代替としてのシミュレーションを脱却し、新たなデジタルエンジニアリング技術を創生することが急務である。我々のグループでは、スパコン「富岳」の性能を十二分に活用できるアプリケーションソフトウェアによる高性能大規模シミュレーションと、多目的最適化、機械学習、データ同化等のデータ科学を融合させることで、サイバー空間とフィジカル空間を高度に結合させた次世代デジタル設計システムを構築することを目指し、「富岳」成果創出加速プログラムで研究開発を行っている。ここでは、深層学習を用いたビッグデータ解析とは異なり、限定されたデータ群に物理シミュレーション技術を効率的に統合することで、演繹的なシミュレーション技術と帰納的な機械学習技術を高度に融合した最適設計システムを開発する。演繹的なシミュレーション技術と帰納的な機械学習・AI技術との融合は、その相互補完性の観点で既に研究レベルでは盛んに議論されているが、実際の製品開発を想定して実機や実在構造物を対象として、大規模計算資源を活用した研究は稀である。開発したシステムは、我が国の基幹産業分野を構成する自動車・機械・土木・建築分野の応用課題への展開を目指し、自動車空力設計、都市・建築性能設計、室内環境設計、カーボンフリーガスタービン設計に適用することで、その有用性を実証する。本プロジェクトの特徴は、それぞれのターゲットに対応した産学コンソーシアム構築し、産業界での実用化を想定したシステムの設計から実証、さらには産業界メンバーへの技術教育を通じたHPC人材育成を経て、社会実装までを連携して行う点にある。これにより、我が国を代表する基幹産業分野において、Society 5.0時代のスマートデザインを実現することを目指している。10以上の研究機関、25以上の分野を代表する産業界企業の他、計算機科学研究者やデータ科学研究者、さらには医師等も参画する分野横断型プロジェクトである。

基盤アプリには、これまで地球シミュレータ、「京」コンピュータ、及びスパコン「富岳」の産業利用促進を目的として、我々が産学連携で独自開発を進めてきたソフトウェアを活用する。理研計算科学研究センターで開発を進めている複雑現象統一的解法フレームワークCUBEは、従来の非構造格子に基づく計算モデル作成時間を抜本的に加速できるソフトウェアであり、様々な形状に対する最適化シミュレーションによるビッグデータ作成に、大きな強みとなる。一方、東京大学、北大等で研究開発が進められ、現在は理研計算科学研究センターで超並列計算環境を想定した利活用をサポートしているFrontFlow/redは、より汎用的な非構造格子に基づくアプリであり、特に燃焼シミュレーションで世界をリードするソフトウェアである。これにより、市販ソフトウェアでは捉えることができない燃焼現象の再現が可能である。このような高精度かつ実用的なソフトウェアを独自開発し、産学連携で実機を対象としたLES解析を実現している研究グループは、世界的に見ても例がない。具体的には、以下の四つのサブ課題に対して、研究開発を進めている。

2. 本プロジェクトで実現する具体的課題

サブ課題A 意匠空間を考慮したAI支援多目的最適化による自動車空力デザイン

カーボンニュートラル実現に向けた新たな自動車の開発には、今までの長年の経験に基づく「ものづくり」では不十分である。そこでAIを活用して、より高速に複数の設計案件に対して多目的最適化する技術が必要となる。特に自動車空力設計では、意匠担当のデザイナーと協調した形状最適化が不可欠であり、既存の空力性能設計空間のみでの最適化は実用化しない。そこで本課題では、性能設計空間と意匠デザイン空間を融合させた新たな空力多目的最適化システムを構築し、実際の自動車空力設計に適用することで、その有用性を実証する(図1参照)。また、多次元設計空間での最適化を実現するために、遺伝的アルゴリズムに基づく多目的最適化を、自動車設計で実用化するフレームワークを構築する。さらに、キャパシティコンピューティングによる多目的最適化で問題となる計算負荷低減技術として、

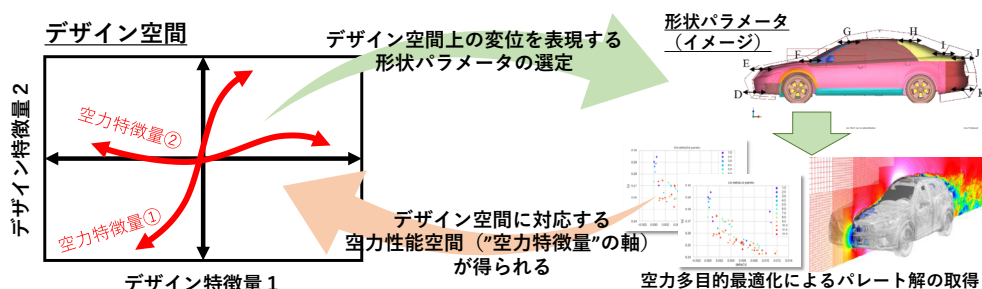


図1 意匠空間を考慮した多目的最適化の概念

機械学習によりサロゲート（代理）モデルやリダクション（縮約）モデルを構築し、多目的設計の大幅な時間短縮を目指す。本課題は、神戸大学と広島大学が中心となり、理研産学連携「HPCを活用した自動車用次世代CAEコンソーシアム」（自動車会社8社、サプライヤー6社、大学研究9機関）を活動母体として課題を遂行する。

サブ課題B 変容する都市・建築の自然擾乱対応の性能設計

コロナなど感染症の蔓延を起こさせない、あるいは将来の気候変動による温暖化を抑制するためのカーボンニュートラルを実践する社会の構築が喫緊の課題であり、これまでの集中化する都市・建築の姿を見直すことが求められている。また、地球温暖化がもたらす将来の顕著気象に対して未経験の気象インパクト下での変容都市の安心安全な生活の構築は喫緊の課題であるといえる。本課題では、データサイエンスに基づきメタボリズム（新陳代謝）的に変容する都市・建築モデルをサイバー空間上に再現し、都市・建築の離散的空間での換気性能、グリーンインフラに基づく気温調整機能を定量化することを目指す。ここでは、気象モデルと乱流シミュレーションを融合した広範囲の周波数帯の乱流変動の再現し、極端気象（スーパータイフーン、竜巻、豪雨）下での都市・建築の挙動を把握することで、防災性能を予測することを目標とする。課題の遂行にあたっては、Society 5.0の理念を踏襲しながら、自然起源の擾乱の都市・建築へのインパクト推定技術の社会貢献をめざし、コンソーシアムを基本として、産業界を巻き込んで実務の展開と不確定性に基づく性能設計の理念と方法を構築する。本課題は、東京工業大学を中心として組織された「都市・建築CFDコンソーシアム」（建設会社5機関、大学・研究5機関）を活動母体として、横浜国立大、近畿大、お茶の水女子大が参画して課題を進める。

サブ課題C 新興ウイルス感染症にロバストで健康・快適・サステイナブルなポストコロナ時代の室内環境設計

現在も進行形で猛威を振っている新型コロナウイルス感染症への迅速な対策技術の確立、更には、確実に来襲する新たな新興ウイルスへの準備と対策に対しては、様々な居住環境に対

する感染リスク評価のデジタルトランスフォーメーションが急務である。即ち、予測精度・信頼性、スピード、対応ケース数の全てにおいて、今までの実験計測やシミュレーションを凌駕する革新的な感染リスク統合評価システムの構築が求められている。本課題では、各種の空気感染性汚染物質の生成から室内空気中での輸送動態、さらに体内動態と免疫システム応答・生理反応までを包括的に解析し、可視化する統合的システム（図2参照）を開発し、「富岳」に実装することを目指す。これにより、室内の快適性と感染症に対するロバストネスを両立させる多目的最適化による設計手法を提案する。システム開発の基盤技術として、既にものつくり分野で実績を上げている理化学研究所等で開発された熱流体複雑現象統一的解法シミュレーションフレームワークCUBEを活用することで、確実且つ迅速な研究開発が可能となる。このような感染リスクのDXとそのスパコンでの実装による各段に精度の高い感染リスク評価は、新たな新興ウイルス対策のための政策立案も貢献できるであろう。本課題は、九州大学が中核となり、「富岳」新型コロナ飛沫感染シミュレーションで理研が中心となって構築した産学連携組織を活動母体として研究を進める。

サブ課題D マルチコンポーネント統合シミュレーションによるカーボンフリーガスタービン設計

風力や太陽光などの再生可能エネルギーから製造する水素（H₂）やアンモニア（NH₃）を燃料として燃焼させ、発電する方法（究極のカーボンフリー発電システム）が注目されている。水素やアンモニアの燃焼はフラッシュバック（逆火）、燃焼振動、失火等の異常燃焼が起こる危険性があるため、それらの燃料に順応したガスタービン（圧縮機、燃焼器、タービン）の設計、開発、操作条件の選定が不可欠である。スパコン「京」では、圧縮機、燃焼器、タービンとの個別コンポーネントでの高精度予測は実現しているが、このような異常燃焼を想定した設計では、その発生から各コンポーネントへの影響を正確に予測するためにはガスタービンを構成する圧縮機、燃焼器、タービンを完全に統合してLESで一気に解く、世界初、真のマルチコンポーネント統合シミュレーション技術が必要となる。これにより、

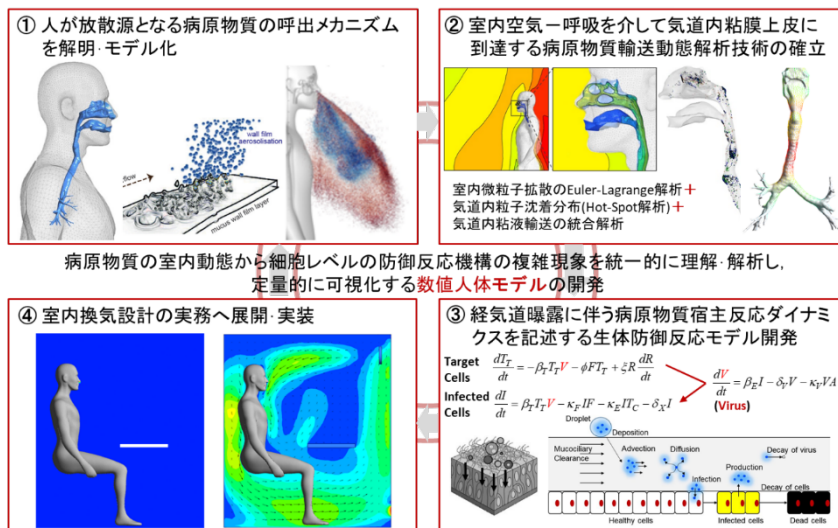


図2 新興ウイルスを含む病原物質の生成・室内動態・感染メカニズムを統合した感染リスク評価システムの概念

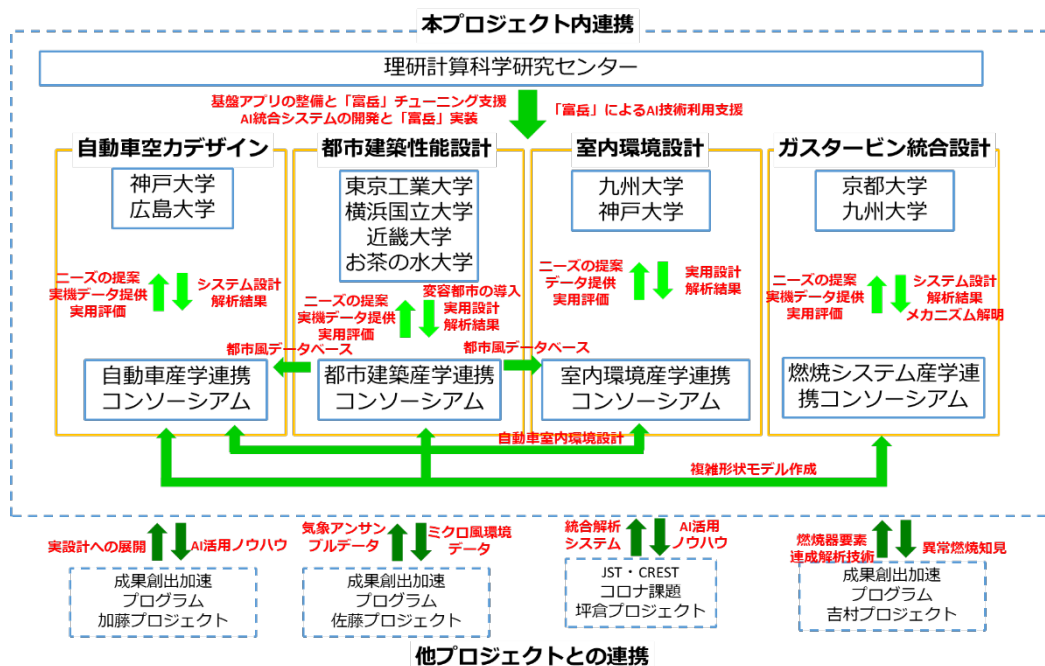


図3 産学連携を主体としたプロジェクト全体の実施体制図

フラッシュバックや燃焼振動等のよびすす等の様々なエミッションの正確な予測に有用であることを示す。さらに本統合シミュレーション（サイバー空間）結果から、異常燃焼発生時の物理メカニズムを解明し、さらに異常燃焼の兆候を自動で探知するためのAIセンシング技術を開発することによって、これらの知見、技術が実機（フィジカル空間）の設計や最適操作条件選定に貢献しうることを実証する。圧縮機、燃焼器、タービンの数値解析は各々が計算負荷が高く、「京」を用いてようやく実施可能なものであったがそれらの統合シミュレーションは、「富岳」の誕生によってはじめて実現可能な状況にある。本課題は京都大学が中核となり、理研産学連携「燃焼システム用次世代CAEコンソーシアム」（産業界員10機関、大学・研究10機関）が活動母体となって研究開発を進める。

図3に本プロジェクトの実施体制図を示す。

3. 基盤アプリのチューニング状況

基盤アプリの一つであるCUBEの「富岳」チューニング状況については、単体性能については最大215.84GFLOPSで、ピーク性能比6.39%である。ただし、いくつかのホットスポットがまだ残っており、さらなる最適化により10%程度の性能向上が見込まれている。一方、並列性能については良好な結果が得られており、実自動車を対象とした弱スケーリング評価で、51,200ノード（全系の1/3程度）において74.11%のスケーリングを示している。この際の空力シミュレーションに用いた総格子数は700億セル程度である。図4にCUBEと「富岳」で実施した100億セル規模の詳細自動車形状による自動車空力シミュレーションの一例を示す。

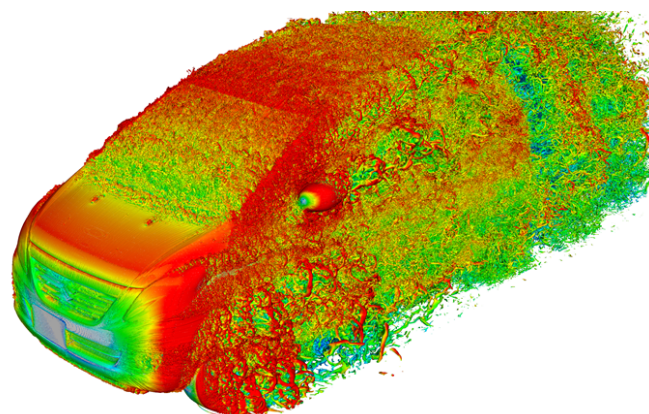
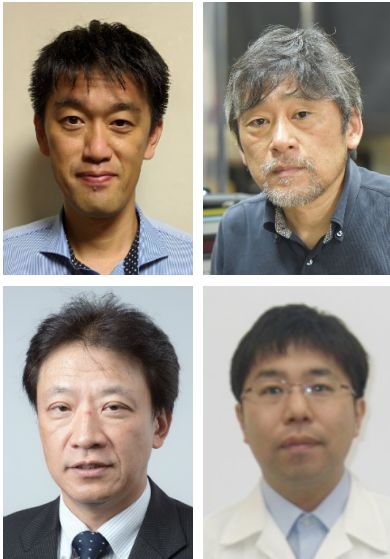


図4 詳細自動車形状に対する100億セル規模空力LESの例

4. おわりに

以上、Society 5.0時代のものづくりとして「富岳」で実現を目指すスマートデザインプロジェクトについて紹介した。プロジェクトは2021年の秋にスタートしたばかりであるが、既にサブ課題Aでは、100車種以上の市販SUV車のLES空力シミュレーションを実施し、その空力性能と車体形状特微量との相関関係が明らかになりつつある。この車体形状特微量とデザイン空間との関係を求めれば、デザイン空間と空力性能空間の融合が実現する。また、サブ課題Cでは、室内環境における局所換気特性と、実際に飛沫・エアゾルを飛散させて求めた感染リスクとの関係が明らかになりつつある。これにより従来議論されてきた室内環境におけるCO2センサーを用いた簡易計測による感染リスク評価の妥当性を示すことができる。今後の成果に期待して頂きたい。



富岳を利用した Lattice Boltzmann Method による超大規模流体解析

山出 吉伸 みずほりサーチ&テクノロジーズ株式会社（上段左）
 飯田 明由 豊橋技術科学大学（上段右）
 加藤 千幸 東京大学（下段左）
 宮澤 真史 株式会社本田技術研究所（下段右）

Lattice Boltzmann Method Large Eddy Simulation

1. はじめに

ものづくりの現場に3次元の流体解析ソフトウェアが普及し始めたのは1990年代であり、それから30年程度が経とうとしている。現在、ものづくりの様々な分野で、流体解析ソフトを用いた製品の性能や信頼性の評価が日常的に行われている。市販の流体解析ソフトの大半は乱流中の微小な渦の運動による運動量や熱等の輸送をモデル化するReynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) に基づいている。RANSは時間平均モデルに基づいているため、製品の定常性能、たとえば、ターボ機械なら流量特性、車なら空力抵抗等、を予測することはできるが、非定常特性（振動・騒音、非定常流体力、不安定特性等）を予測することは困難である。筆者の一人である加藤らは乱流現象を高精度に予測できるLarge Eddy Simulation (LES) をベースとする有限要素法流体解析システムFrontFlow/blue（以下、FFB）を開発し[1, 2]、これをターボ機械、船舶、車等の性能や信頼性の予測に適用してきた[3-11]。これらの解析により、LESにより乱流現象を高精度に予測することが種々の工学的問題に対して有用であることが実証されたが、同時に、上記の解析技術をもものづくりの現場に本格的に普及させるためには、製品の複雑な形状に対し、高速かつロバストにメッシュを作成する技術の確立が必須であることが確認された。

格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method、以下LBM)は直交等間隔格子に定義される、離散化された速度分布関数の時間発展を計算することにより、流れを計算する手法である。直交等間隔格子を用いているため、メッシュ作成がきわめて容易であることが特長のひとつである。筆者らは、上記した計算格子作成に関する課題を抜本的に解決するため、LBMをベースとし、さらに、FFBの開発および実証で培ったLESによる乱流解析技術を組み合わせた流体解析システムFFXを開発している[12]。本稿では、FFXの開発状況と今後の展望について概説する。

2. LBMに基づく汎用流体解析コード

2.1 基礎方程式

LBMは直交格子に定義された粒子の分布関数の時間発展

を計算する。密度、速度等のマクロ変数は分布関数を積分することにより計算できる。各粒子の速度は、速度と時間刻みの積が格子幅になるように定義される。したがって、ある時刻ある格子に存在する粒子は、次の時間ステップでは隣の格子に移動する。このため、対流や伝播現象を正確に予測することができる。粒子モデルとして、3次元の場合、自分の点を含め15点、19点あるいは27点の隣接点に対応した速度を定義する選択肢があり、これらをそれぞれD3Q15、D3Q19、D3Q27と称する。本システムでは現状D3Q15を採用しているが、すでにD3Q27モデルを用いた計算も実施しており、将来的にはD3Q27モデルにも拡張する予定である。

分布関数 $f_i(t, x_a)$ の時間発展は粒子の移動（以降、並進と称する）および衝突で表される。衝突は格子における分布関数の変化を介して粒子間の密度、運動量およびエネルギーの交換を表す。分布関数の時間発展を記述する方程式を格子ボルツマン方程式という。以下に格子ボルツマン方程式を示す。

$$f_i(t+\Delta t, x_a+c_{i,a} \Delta t) = f_i(t, x_a) + \Omega_i [f_i(t, x_a)]$$

格子ボルツマン方程式の右辺第一項は並進項であり、時刻 t 、位置 x_a における分布関数は次の時間ステップ $t+\Delta t$ には、隣の格子点 $x_a+c_{i,a} \Delta t$ にコピーされることを表している。第2項は衝突項である。FFXでは、各粒子成分の衝突項を各粒子の非平衡成分で表すSingle Relaxation Time (SRT)[13]および、分布関数をモーメントに変換し、モーメント空間において衝突を記述するMulti Relaxation Time (MRT)[14]をサポートしている。

2.2 計算格子の自動作成機能

FFXの最大の特長は、直交等間隔格子を用いる利点を生かして、計算格子を完全に自動的に作成できることにある。LBMでは、表面形状データを、隣接する格子間のインターセクト情報（格子線と表面形状を表す三角形パッチの交点）に変換するだけで形状を表現できるため、任意の複雑形状に対して、メッシュ作成ソフト上でGUIを利用して人が操作することなく、メッシュデータを自動作成することができる。つまり、ユーザはメッシュ作成を意識する必要はなく、形状データをソルバー実行時に指定することにより任意の複雑形状を考慮した流体解析を実行することができる。富岳を用いたベンチマークテストでは、複雑形状

を含む解析対象に対し1兆格子規模の計算において、30秒程度でメッシュデータを自動作成できることを確認している。

FFXでは最大数兆格子規模の流体解析を想定しており、このような大規模なデータをハンドリングするため、中橋ら[15]が提唱したBullding-Cube Method (BCM) を適用している。BCMでは、直交等間隔格子で構成される立方体領域を「Cube」とし、計算領域を階層的な解像度を有するCubeに分割する。BCMを適用することにより物体近傍に効率的に高解像度格子を配置できる。また、ユーザは直接格子データを取り扱う必要がなく、Cubeの解像度を指定するだけで解析が可能であるため、大規模データハンドリングのコストを大幅に低減できる。FFXではCubeあたりの格子数として10万点程度を想定しているの、全体で1兆格子を用いて計算をする場合でもおよそ1,000万Cubeを扱えばよく、1兆格子を直接扱う場合に比べて、大規模なデータを取り扱うためのユーザの負荷を大幅に低減できる。

2.3 FFXの実効性能

「富岳」における、ノードあたり4300万格子を用いたFFXのWeak Scaleベンチマークテストの結果を図1に示す。最大で「富岳」の32,768ノードを用いて、4.4 PFLOPSを達成し、1.4兆グリッドを用いた計算を1時間ステップあたり0.08秒で計算できることを確認している。LBMは陽解法であり時間刻みが小さく、時間ステップ数が長くなるが、典型的な時間ステップ数は100万ステップ程度であるため、22時間程度で計算できる。

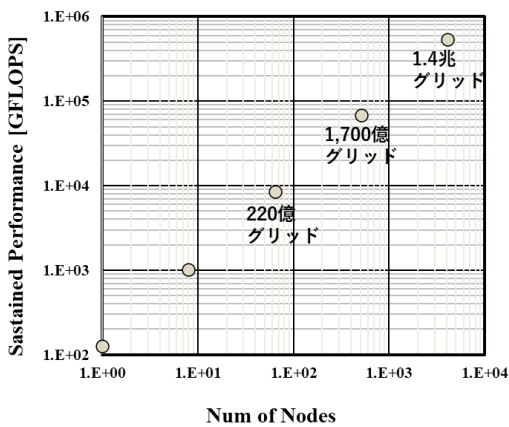


図1 「富岳」におけるFFXのWeak-Scaleベンチマークテスト

3. 検証解析および実証解析

3.1 一様等方性乱流

FFXの計算精度の検証のため、一様等方性乱流の解析を実施した。初期流れにおける速度のRMSおよび基準長さ（計算領域×2π）によって定義したレイノルズ数は121である。解析領域は立方体とし、3方向に周期境界を与えた。初期流れ場として、店橋[16]らが実施したDNS解析と同じ初期条件を用いた。1方向あたりの格子数は64とした。図2にエネルギースペクトルの比較を示す。ここではFFXのSRTおよびMRTによる計算結果と、店橋[16]らのスペクトル法によるDNS解析結果を比較している。FFXによって計算されたエネルギースペクトルはスペクトル法によるDNSの結果と概ね一致しているが、FFXによるスペクトルは高波数領域においてDNSと比較しパワーが大きい。この理由はFFXによる計算においてサブグリッドスケールモデルを適用していないためと考えられる。衝突項 (SRT, MRT) の違いはエネ

ルギースペクトルの結果には影響を与えなかった。第二不変量の等値面により可視化した乱流渦構造 (図3) を比較しても、衝突項を変えても渦構造がほとんど変わらない。一様等方性乱流によるベンチマークテストにより概ねDNSと同等の予測精度があることを確認した。

一般に、LBMによる計算はレイノルズ数が高くなると、緩和時間が0.5に近い値となり計算が不安定になることが多い。計算の安定性は、壁面の有無、速度勾配等、様々な条件にも影響を受ける。壁面や平均的な速度勾配の影響のない条件下での安定性を把握するため、FFXを用いてレイノルズ数を上げた条件に対して一様等方性乱流のベンチマーク計算を実行したところ、SRT、MRTの安定限界 (安定に計算できる緩和時間の最低値) はそれぞれ、0.507、0.504であり、MRTのほうが若干安定であった。

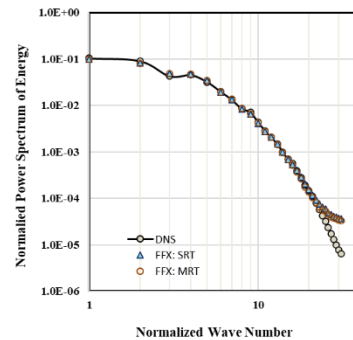


図2 一様等方性乱流におけるエネルギースペクトルの比較

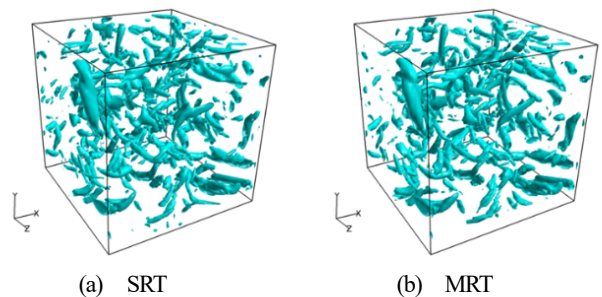


図3 一様等方性乱流の乱流構造の可視化結果

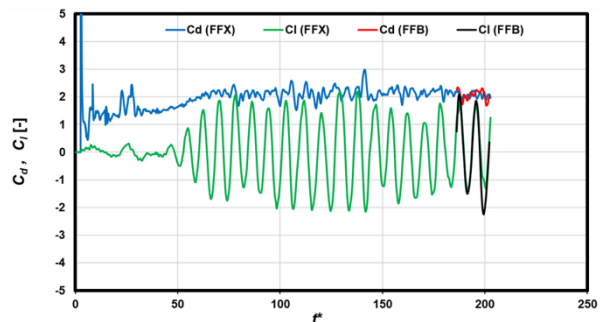


図4 角柱に作用する流体力の時刻歴

3.2 角柱まわり流れ解析

壁面の影響を受ける外部流れに対するFFXの精度検証のため、角柱まわりの流れのLES解析を実施した。角柱長さDおよび主流速さUをベースとするレイノルズ数は2×10⁴である。角柱の長さDで規格化した格子幅Δ/Dは2×10⁻³であり、全体の格子数は約1,300億である。本計算で計算領域全体に同一の解像度を使用しているため、格子数が多くなっているが、計算精度を検証した後に、角柱遠方の解像度を落とした計算を実施する予定で

ある。図4に角柱に作用する流体力の時刻歴を示す。抵抗係数は2.15であり、計測値2.22と近い値となっている。また、揚力係数の変動値(計測：1.45、FFX：1.26) およびそのストローハル数(計測：0.134、FFX：0.119)についてもそれぞれ近い値になっており、FFXによって角柱まわりの流れを高精度に計算できることを確認した。図5に角柱近傍の主流方向速度の瞬時分布を示す。前述のように、本計算では全領域に同一の解像度を適用しているため、角柱から離れた場所においても微細な渦構造が計算されている。

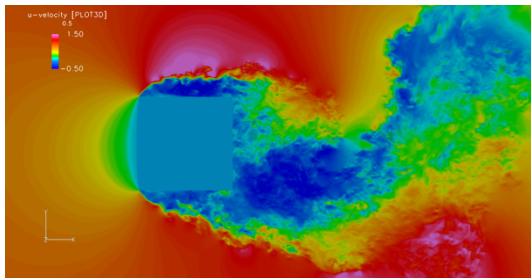


図5 角柱近傍の主流方向速度の瞬時分布

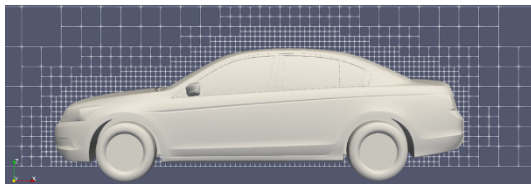


図6 車体まわり流れ計算の計算モデル

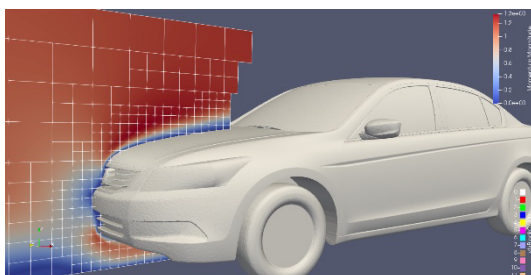


図7 車体近傍の主流方向速度の瞬時分布

3.3 車体まわり流れ解析

時速100キロメートル程度の速度で走行する車両の表面には乱流境界層が発達し、境界層中の微小な渦のダイナミクスが境界層内の運動量輸送を担っている。たとえば、時速80キロで走行する車体表面に発達する乱流境界層には直径0.5mm程度の渦が存在する。これらの渦のダイナミクスを直接計算することができる、解像度0.05mm程度の計算格子を用いた乱流の準直接計算を実施することにより、風洞試験に匹敵する精度を有する車体まわりの流れ計算が可能となる。

解像度0.05mmの計算格子を計算領域全体(長さ40m、幅5m、高さ4mの直方体)に配置すると格子数は6,400兆となり、富岳をもってしても計算は不可能であるので、車両近傍のみに高解像度Cubeを配置するマルチレベル計算が必須となる。車両まわりの流れの準直接計算の準備計算のとして、解像度2 mm ~ 16 mmの階層的解像度を有するマルチレベル計算格子によるテスト計算を実施した。図6に車両表面には配置されたマルチレベルキューブを示す。総格子数は25億グリッドであり、富岳256ノードを用いてステップあたりの計算時間は時間ステップあたり約0.15秒であった。本計算はあくまでテスト計算という位置づけであるが、

図7に示すように、マルチレベルのCubeを用いた計算が正常に動作することを確認している。今後、最大2兆グリッドを用いた車両まわりの流れの準直接計算を実施する予定である。

5. まとめ

本稿では、格子ボルツマン法に基づく汎用流体解析コードFFXの概要について概説し、精度検証結果および実証計算の準備状況について述べた。今後、「富岳」を用いて2兆格子規模の大規模実証計算を実施し、このような計算の有効性を示していきたい。

参考文献

- [1] Kato, C., Kaiho, M. and Manabe, Transactions of ASME, Journal of Applied Mechanics, Vol. 70 (2003), pp. 32–43.
- [2] Kato, C., Yamade, Y., Wang, H., Guo, Y., Miyazawa, M., Takaishi, T. and Takano, Y., Computers & Fluids, Vol. 36, No. 1 (2005), pp. 53–68.
- [3] Yamanishi, N., Fukao, S., Qiao, X., Kato, C., and Tsujimoto, Y., 2007, Journal of Fluids Engineering, 129, pp. 587-594.
- [4] Pacot, O., Kato, C., Guo, Y., Yamade, Y., and Avellan, F., 2016, Journal of Fluids Engineering, 138 (11), pp.111102-1-111102-11.
- [5] Yamade, Y., Kato, C., Nagahara, T. and Matsui, J., Journal of Fluids Eng. Mar 2020, 142(3): Paper No: FE-19-1687.
- [6] Makihara, T., Kitamura, T., Yamashita, T., Maeda, K., Kato, C., Takayama, T., Yamamoto, K., Yamade, Y., and Suzuki, Y., 2016, SAE Int. J. Passeng. Cars - Mech. Syst. 9 (2).
- [7] Yamashita, T., Makihara, T., Saito, Y., Kato, C., Takayama, R., Takayama, T., and Yamade, Y., 2018, SAE Int. J. Passeng. Cars - Mech. Syst. 11(5), pp. 415–428.
- [8] Nishikawa, T., Yamade, Y., Sakuma, M., Kato, C., 2013, 16th Numerical Towing Tank Symposium (NuTTS'13), Duisburg, Germany.
- [9] Nishikawa, T., Yamade, Y., Sakuma, M., Kato, C., 2012, Journal of the Japan Society of Naval Architects and Ocean Engineers, 16, pp. 1-9.
- [10] Akiyama, O. and Kato, C., 2017, Journal of Fluids Engineering, 139, pp. 091302-1-091302-11.
- [11] Kato, C., Yamade, Y., Nagano, K., Kumahata, K., Minami, K. and Nishikawa, T., Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, November 2020 Article No.: 3Pages 1–13.
- [12] 山出 吉伸、加藤 千幸、山田 和豊、大西 順也、今野 彰、生産研究、2018年 70 巻 1 号 p. 43-48.
- [13] Y. H. Qian, D. D'Humières and P. Lallemand, Europhysics Letters, Volume 17 (1992), Number 6.
- [14] D. d'Humires et al., Phil. Trans. R. Soc. A 360, (2002), 437 451.
- [15] Nakahashi, K., AIAA Paper 2005-4876, 2005.
- [16] 店橋護, 岩瀬誠, 宮内敏雄, 日本機械学会論文集 B編 / 65 巻 638 号, p. 3237-3243 (1999).

部門からのお知らせ



American Society of Mechanical Engineers (ASME) 活動紹介

滝沢 研二
早稲田大学 理工学術院 総合機械工学科

ASMEはご存知の通り、学術的な活動のみならず産業との結びつきが強く規格や基準を策定してきた組織です。その中で、Applied Mechanics Division (AMD) は6つの基礎グループの中の最大の部門です。日本機械学会では計算力学分野に相当するといえますが、実際には計算力学部門よりは幅広い分野です。例えば、ロボティクス系の分野も本部門に含まれていますし、日本では応用数理学会で発表される内容も本部門で発表されることが多いです。AMDは1927年に、Stephen Timoshenko氏を議長として発足しました。また、AMDには、Journal of Applied Mechanics (JAM) という学会ジャーナルがあります。現在はインパクトファクターこそ高くはないものの、有名な計算手法がこのジャーナルで最初に発表されていることも少なくなく、重要なジャーナルの一つと言えます。

私は、昨年度7月より、AMDのExecutive Committee (EC) メンバーに選出されました。ECは5名からなり、5年目に議長を務めるまで、毎年それぞれ異なる役割を担っています。EC活動としては主に、部門運営、表彰、International Mechanical Engineering Congress & Exposition (IMEC) (<https://event.asme.org/IMECE/Program>) があります。

表彰は毎年行われ、その賞にはTimoshenko Medal, Koiter Medal, Drucker Medal, Thomas K. Caughey Dynamics Award, Ted Belytschko Applied Mechanics Award, Thomas J.R. Hughes Young Investigator Award, Journal of Applied Mechanics Awardなどがあります。このように当該分野で活躍

されているメンバーの名前を冠とする賞がほとんどです。これらのメンバーを眺めると、計算力学部門がAMDと最も近い関係にあることがわかるのではないのでしょうか。表彰員会は5名のECメンバーに加え、直近の5名の議長・それぞれの賞の直近5年の受賞者(ただし、Thomas J.R. Hughes Young Investigator Award受賞者を除く)からなります。日本を本属とする研究者の受賞は、2010年に松本洋一郎先生がTed Belytschko Applied Mechanics Awardを受賞されており、私は2012年にThomas J.R. Hughes Young Investigator Awardをいただいております。

IMECはASMEの最も大きな国際会議で、2022年10月30日から11月3日までオハイオ州のコロンバスで行われます。AMDとしてはTrack 12と呼ばれる、Mechanics of Solids, Structures, and Fluidsを運営します。本トラックでは、その名の通り構造力学から流体力学を含みます。基礎分野から応用分野まで様々であり、計算分野に限らず広く募集されます。また、学術分野のみならず産業界からも多く発表されることが特徴です。本年度の詳細については、https://imece.secure-platform.com/a/page/track_listのTrack 12をご参照ください。本年、私は、本トラックの副議長として、そして来年は議長を務めることとなります。来年はぜひ皆様にご参加いただけますと幸いです。

以上がASMEのAMDの簡単なお紹介となります。残り4年ほどとなりますが、その間に、JSME、特に本計算力学部門との関係が強化できるよう働きかけていきたいと思っております。



第34回計算力学講演会 (CMD2021) 優秀講演表彰

高野 直樹
慶應義塾大学理工学部機械工学科

第34回計算力学講演会（後援 北海道大学大学院工学研究院, 北海道大学情報基盤センター）において、座長および参加者に評価をお願いした結果に基づき選考を行い、計算力学部門一般表彰として優秀講演表彰3名、優秀技術講演表彰3名、ならびに日本機械学会若手優秀講演フェロー賞6名を表彰することとなりました。表彰状を受賞者にお送りするとともに、本誌上に公開して、心よりお祝い申し上げます。（以下敬称略, 五十音順）

● 優秀講演表彰

下川智嗣(金沢大学)

大規模分子動力学法による調和組織材料の欠陥ダイナミクスと強度・延性特性の関係

田上大助(九州大学)

一般の多面体メッシュにおける離散de Rham複体を利用した電磁場問題の有限要素法とその応用

松永拓也(東京大学)

LSMPS法の数値安定化と複雑な自由表面流れへの適用

● 優秀技術講演表彰

齊藤 啓(株式会社 JSOL)

特性テンソル法を用いた三次元き裂先端特異応力場の評価

上甲康之(株式会社 日立製作所)

動力学モデルとモンテカルロ法を用いたドラム式洗濯式乾燥機の脱水起動シミュレーターの開発

● 優秀講演表彰



下川 智嗣



田上 大助



松永 拓也



齊藤 啓

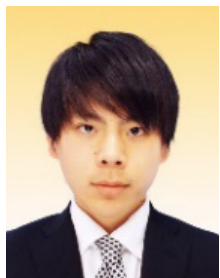


上甲 康之



神保 智彦

● 日本機械学会若手優秀講演フェロー賞



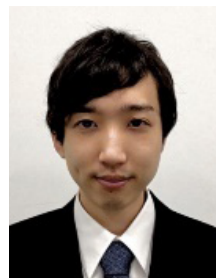
石川 敦己



小林 新



須田 大貴



高橋 慶伸



原木 響也



Yin Meng

神保智彦(株式会社 東芝)

風力発電・ドライブトレイン構造の不規則動荷重に対する確率論的信頼性解析法

● 日本機械学会若手優秀講演フェロー賞

石川敦己(徳島大学)

円錐状肺細葉構造の数理モデル：肺細葉気道分布の解析

小林 新(大阪大学)

乱流域で動作する分流器のデータ駆動型トポロジーデザインの試み

須田大貴(金沢大学)

様々な変形モードの順次起動による高延性化に向けた2元系モデリング

高橋慶伸(早稲田大学)

流動による経時変化を考慮した粒子法に基づく塗装の膜厚分布解析

原木響也(電気通信大学)

構造物表面の部分的なレーザ計測点群を用いた変形解析の検討

Yin Meng(東北大学)

グラフェン上ガス分子吸着脱離特性の歪み依存性に関する第一原理解析

● 優秀技術講演表彰



2022年度年次大会部門企画について

桑水流 理
福井大学学術研究院工学系部門原子力安全工学講座

日本機械学会2022年度年次大会は、2022年9月11日（日）から9月14日（水）までの日程で、富山大学五福キャンパス（〒930-0855富山市五福3190番地）で開催される予定ですが、新型コロナウイルス感染症の感染拡大状況によっては、オンライン開催となることがあります。本大会は「シンギュラリティがもたらす機械工学の未来」をキャッチフレーズに、「アフターコロナにおける機械工学」、「DXによる機械技術の革新」、「SDGsへの対応」の3つを主要テーマとして開催されます。特別企画や他部門とのジョイントセッションなどが数多く企画されており、一般の方、企業の方、学生の方も含め

て、多くの方にご参加頂ける内容となっております。年に1度の部門の枠を超えた学术交流の場として、研究成果のご発表や最新研究情報の収集、研究者ネットワークの構築などにご活用下さい。なお、部門同好会は開催致しません。本大会の詳細は2022年度年次大会ホームページ（<https://confit.atlas.jp/guide/event/jsme2022/top>）をご覧ください。

計算力学部門では、以下の特別企画・オーガナイズドセッションを企画致しております。皆様のご参加を心よりお待ちしております。

【特別企画】市民フォーラム

「デジタルツイン構築における人とAIの役割とは ～ Industry4.0、Society5.0を超えるパラダイムを目指してPart1 ～」

（計算力学部門、生産システム部門、設計工学・システム部門）
平野徹（ダイキン情報システム）

「Beyond the paradigm of Industry4.0 and Society5.0 Part2 ～ Japan-German Symposium on IoT Design, Systems and Applications2022 ～」

（設計工学・システム部門、計算力学部門、生産システム部門）
伊藤照明（岡山県立大）

【特別企画】先端技術フォーラム

「金属AMにおけるDesign for Additive Manufacturing (DfAM)を理解するために」

（機械材料・材料加工部門、計算力学部門）
京極秀樹（近畿大）

※計算力学部門より高野直樹先生（慶応義塾大）と山田崇恭先生（東京大）がご講演されます。

【特別企画】ワークショップ

「循環器疾患の治療デバイス・治療法の進展と工学への期待」

（医工学テクノロジー推進会議、機械力学・計測制御部門、バイオエンジニアリング部門、材料力学部門、機素潤滑設計部門、流体工学部門、ロボティクス・メカトロニクス部門、熱工学部門、計算力学部門、情報・知能・精密機器部門、マイクロ・ナノ工学部門、日本循環器学会）

「持続可能な未来の実現のための技術ロードマップ」

（技術ロードマップ委員会）
山崎美稀（日立製作所）

※計算力学部門より吉村忍先生（東京大）がご講演されます。

【オーガナイズドセッション】

「SDGsに貢献する「電子実装技術の最先端」：熱・信頼性制御技術」

（計算力学部門、材料力学部門、熱工学部門）
池田徹（鹿児島大）、小金丸正明（鹿児島大）、三浦英生（東北大）、木下貴博（富山県立大）、畠山友行（富山県立大）、中川慎二（富山県立大）

「解析・設計の高度化・最適化」

（計算力学部門、設計工学・システム部門）
西脇眞二（京都大）、下田昌利（豊田工大）、山本崇史（工学院大）、長谷川浩志（芝浦工大）

「安心安全な水素社会を創る流体解析と計測技術」

（計算力学部門、流体工学部門）
松浦一雄（愛媛大）、月川久義（元）九州大）、錦慎之助（帝京大）、鈴木健吾（新コスモス電機）、寺田敦彦（日本原子力研究開発機構）、丸祐介（宇宙航空研究開発機構）、朝原誠（岐阜大）、茂木俊夫（東京大）小林弘明（宇宙航空研究開発機構）、加藤喜峰（九州大）、湯川宏（名古屋大）、武野計二（豊田工大）

「機械学習×機械工学の最先端」

（熱工学部門、流体工学部門、計算力学部門）
塩見淳一郎（東京大）、櫻井篤（新潟大）、後藤田浩（東京理科大）、深湯康二（慶応義塾大）、大西領（東京工大）、下山幸治（東北大）

「1DCAE・MBDのためのモデリング」

（設計工学・システム部門、機械力学・計測制御部門、機械材料・材料加工部門、流体工学部門、熱工学部門、計算力学部門）
大富浩一（明治大）、山崎美稀（日立製作所）、長沼要（金沢工大）、脇谷伸（広島大）、岩田宜之（東芝インフラシステムズ）、西田怜美（DataLabs）、山岸義弘（京セラドキュメントソリューションズ）、畑陽介（ブラザー工業）、福江高志（金沢工大）

「燃料電池・二次電池とナノ・マイクロ現象」

(マイクロ・ナノ工学部門, 流体工学部門, 熱工学部門, 計算力学部門, 材料力学部門, 動力エネルギーシステム部門)

徳増崇(東北大), 杵淵郁也(東京大), 田部豊(北海道大), 大島伸行(北海道大), 橋田俊之(東北大), 鹿園直毅(東京大), 花村克悟(東京工大)

「医工学テクノロジーによる医療福祉機器開発」

(医工学テクノロジー推進会議, 機械力学・計測制御部門, 流体工学部門, 計算力学部門, バイオエンジニアリング部門, ロボティクス・メカトロニクス部門, 情報・知能・精密機器部門, 材料力学部門, 熱工学部門, マイクロ・ナノ工学部門, 機素潤滑設計部門)

白樫了(東京大), 佐久間淳(京都工芸繊維大), 藤井文武(山口大), 張月琳(上智大)

お問い合わせ先: 桑水流理(福井大学) kuwa@u-fukui.ac.jp



第35回計算力学部門講演会 (CMD2022) 開催案内

池田 徹
鹿兒島大学学術研究院理工学域工学系

2020年より始まった新型コロナウイルス (COVID-19) 禍は、予防接種の普及やウイルスの弱毒化などにより、徐々に収束に向かっている状況ですが、未だ、完全な収束には至っていません。鹿兒島大学では、2020年のCMD2020の担当を予定しておりましたが、中止となってしまいました。CMD2021は、北海道大学の主催により、遠隔方式で行われました。CMD2022は再び鹿兒島大学で対面の通常大会を行う予定でしたが、完全に自由な対面での会合が行える目処が立たないことから、やむなく、遠隔会議での開催をすることとなりました。

そのような経緯で、CMD2022は、2022年11月16日(水)～11/18(金)まで、インターネットを利用した遠隔方式で行います。まずは、4月下旬～6月下旬にかけて発表申込み受付から行う予定ですので、皆様のご参加をお待ちしております。詳しくは、ホームページにて、順次お伝えすることになりますので、そちらをご覧ください。

皆様に、鹿兒島の雄大な自然と新鮮な食べ物や温泉を満喫していただきたいと思っておりましたが、今回はかなわぬこととなりました。しかし、今回のパンデミックが始まってから、皆様もすっかり、遠隔会議に慣れて来られたことから、遠隔会議でも対面に劣らない発表や質疑が行えるようになって参りました。遠隔開催でも充実した学会となるように、実行委員一同全力を尽くして参りたいと思います。

遠隔開催となり、書くことがほとんど無くなりますが、せつかく、紙面を使わしていただきましたので、簡単に鹿兒島大学の紹介をさせていただきます。

鹿兒島大学は、旧制第7高等学校と各種専門学校や師範学校が、第二次世界大戦後に合併して、県立鹿兒島大学として発足し、昭和30年から数年をかけて国立大学に移管された、典型的な地方国立大学です。

鹿兒島大学には、工学部があるメインキャンパスの郡元キャンパスと医歯系学部がある桜ヶ丘キャンパス、水産学部がある下荒田キャンパスがあります。工学部がある郡元キャンパスは鹿兒島市内の中心部に位置し、鹿兒島の玄関口である、鹿兒島中央駅前から市電で7～8分で着く便利な場所に立地しております。

それでは、特別講演を行う予定であった、鹿兒島大学の稲盛会館と、鹿兒島市内から見られる雄大な桜島と新燃岳の写真をご覧下さい。

COVID-19のパンデミックは、無論、それ自体が人類にとっての大きな災害ですが、疫病の蔓延という事態にとどまらず、この間の世界の政治状況の変化や、ライフスタイルの変化は、歴史上の大きな転換点として記憶されることと思います。第一次世界大戦とスペイン風邪の流行が大きな歴史上の転換点となっていることも思い起こされます。どのように歴史が動いて行くかは、現時点では判りませんが、良い方向に向かうことを祈りたいと思います。



特別講演を予定していた鹿兒島大学の稲盛会館(安藤忠雄の設計による、球形ホールという変わった建築物です)



市内の正面にそびえる桜島と左奥に見える新燃岳(桜島は始良カルデラ、新燃岳は加久藤カルデラの火山です)



部門連携による講習会シリーズ「機械材料・材料加工のシミュレーションと計測」

高野 直樹
慶應義塾大学理工学部機械工学科

2021年度より、計算力学部門と機械材料・材料加工部門が合同で企画する講習会「機械材料・材料加工のシミュレーションと計測」をシリーズで開催することにいたしました。

学会全体で進める部門間交流の方針を受け、当部門内に部門間交流担当委員会を設けています。2021年度は、ダイキン情報システムの平野徹氏に委員会委員長をお願いし、熱工学部門および流体工学部門との連携は前部門長の高木周先生（東京大学）に合同講習会「機械学習×熱工学・流体工学の最先端」を企画いただいています。機械材料・材料加工部門との連携は2020年度から協議をはじめ、第1回講習会を「3D積層造形」と題して、2021年12月1日(水)にオンラインで開催しましたので、ご報告します。

主として企業あるいは研究所の技術者、研究者、マネージャーの方を対象として、

- ・積層造形をこれから業務で使用するをご検討中の方、
- ・積層造形を使っているがCAEを導入しようとお考えの方、
- ・積層造形のCAE業務に携わっているが、造形の現場のことを知りたいという方や、現場で求められるシミュレーション技術について知りたい方、
- ・積層造形を使っているが様々な問題（プロセスパラメータの決定法やサポートの設定の仕方、材料選択、レーザ等の消耗品や粉末再利用、装置の更新など）を抱えておられて、解決へのヒントを求めている方、

を想定し、金属粉末の選択的レーザ焼結を主に、炭素繊維強化プラスチック(CFRP)の話題も含めて、以下の5名の講師より講演をしていただきました。

「No. 21-79 機械材料・材料加工のシミュレーションと計測（第1回：3D積層造形）」（2021年12月1日開催）

- (1) 3D積層造形技術における材料および装置開発の動向と今後の展開
京極 秀樹 氏(近畿大学)
- (2) 造形プロセスパラメータの設定の勘所：失敗に学ぶノウハウ
高関 二三男 氏(株式会社J・3D)
- (3) 積層造形シミュレーションプラットフォーム
梅崎 敦 氏(ダッソー・システムズ株式会社)
- (4) 積層造形のためのトポロジー最適化の理論及び有限要素ソフトウェアを用いた実践例
山田 崇恭 氏(東京大学)
- (5) 炭素繊維の3Dプリンティング
松崎 亮介 氏(東京理科大学)

午後だけの半日のコンサイスな講習会でしたが、講習会をきっかけとして講師と受講者の間の情報交換、共同研究、造形委託などのよい関係が生まれるよう、受講者には講師へのコンタクトアドレスが書いてあるハンドアウトをお配りしました。

2部門合同企画の最大のメリットは、各部門に造詣が深い講師をそれぞれ推薦することで、単独の部門企画の講習会や講演会ではなかなか聞くことができない話題も含めて、複数の切り口から、総合的な内容に仕上げる点にあると思います。

当日は51名の方にご参加いただきました。参加料は、本会正会員および自動車技術会や日本金属学会など協賛学協会会員の方は10,000円、学生員（本会および協賛学協会）は2,500円でした。参加いただいた企業の方は本会会員の方が多く、また大学の先生、学生さんにも多数ご参加いただきました。

この講習会はシリーズ開催することを念頭に企画しました。すでに「第2回：複合材料の成形加工」を2022年6月16日(木)午後オンラインで開催することが決まっています。2回の講習会企画に多大なるご協力をいただいた2021年度機械材料・材料加工部門長の小林訓史先生（東京都立大学）には深謝申し上げます。

「No. 22-29 機械材料・材料加工のシミュレーションと計測（第2回：複合材料の成形加工）」（2022年6月16日開催）

- (1) 繊維強化プラスチックにおける樹脂含浸挙動
小林 訓史 氏(東京都立大学)
- (2) 連続繊維強化熱可塑性樹脂複合材料の連続成形
仲井 朝美 氏(岐阜大学)
- (3) 繊維強化プラスチック中の材料欠陥検出とその評価
吉村 彰記 氏(名古屋大学)
- (4) PAM-COMPOSITESによるRTM成形シミュレーションの事例紹介
青野 芳大 氏(日本イーエスアイ株式会社)
- (5) J-Compositesによるプレス成形シミュレーションの事例紹介
林 信哉 氏(株式会社JSOL)

今後も最低でも年1回の開催を続けたいと考えています。取り上げて欲しいトピックがあれば、学会計算力学部門担当事務までご連絡ください。皆様のご支援ご協力をお願い申し上げます。

《各行事の問い合わせ、申込先》

日本機械学会計算力学部門担当 石澤 章弘 E-mail: ishizawa@jsme.or.jp

〒162-0814 東京都新宿区新小川町4番1号 KDX飯田橋スクエア2階 TEL 03-4335-7610 FAX 03-4335-7618

計算力学部門ニュースレター No. 67 : 2022年6月30日発行

編集責任者：広報委員会委員長 倉橋 貴彦

ニュースレターへのご投稿やお問い合わせは下記の広報委員会幹事までご連絡ください。

なお、各記事の文責は著者にあります。

広報委員会幹事 篠崎 明 E-mail: akira.shinozaki@mizuho-rt.co.jp

みずほりサーチ&テクノロジーズ株式会社 サイエンスソリューション部

〒101-8443 東京都千代田区神田錦町2-3

TEL 03-5281-5415 FAX 03-5281-5331