

東洋大学計算力学研究センター

2017 年度 年報



2018 年 3 月

**2017 Annual Report of
Center for Computational Mechanics Research
Toyo University**



March 2018

目次

1. まえがき.....	1
2. センターの概要.....	2
2.1. センター設置について.....	2
2.2. 組織.....	3
2.3. 構成メンバー.....	4
3. 研究成果.....	5
3.1. 大規模高精度流体－構造連成解析手法の開発と詳細実験による精度・妥当性検証	5
3.1.1. 標準問題のための弾性円柱の振動実験.....	5
3.1.3. 連成解析の確率論的評価技術の開発.....	14
3.1.4. オープン CAE による接触解析の精度・妥当性検証.....	18
3.1.5. 大規模構造解析のための領域分割法に基づく並列 FEM ソルバーの性能最適化...	24
3.1.6. 超音波治療用プローブの形状による音圧分布特性解析.....	28
3.1.7. 超大規模領域分割計算の高速化手法の統一的構築.....	32
3.1.8. 石灰岩地盤の溶解・生成シミュレーション.....	36
3.1.9. コンクリート構造物の 3 次元塩害劣化予測シミュレーターの開発.....	39
3.1.10. 粒子法による粒子間インタラクションに着目した大規模数値シミュレーション	42
3.1.11. 最適化アルゴリズムに関する研究.....	44
3.2. AI グループ.....	48
3.2.1. 人工知能技術を用いた数値解析結果予測の開発.....	48
3.2.2. Variational Autoencoder を用いた人物動作生成モデルの構築.....	54
3.2.3. 物性データ・数学的知識交換のためのデータ表現形式の開発.....	59
3.2.4. 深層学習による計算力学の高度化.....	61
4. 共同研究.....	74
4.1. JST CREST プロジェクト.....	74
4.1.1. 研究実施内容.....	74
4.1.2. 研究実施体制.....	76
4.2. 原子力科学技術プロジェクト.....	77
4.2.1. 研究実施内容.....	77
4.2.2. 研究実施体制.....	78
4.3. 「知」の集積と活用の中プロジェクト.....	79
4.3.1. 研究実施内容.....	79
4.3.2. 研究実施体制.....	80

5. 成果の広報および普及活動.....	81
5.1. 台湾龍華科技大學にて合同ワークショップ開催.....	81
5.1.1. プログラム.....	81
6. 学術活動.....	83
6.1. 論文投稿.....	83
6.2. 学会発表.....	84
6.3. 招待講演.....	86
6.4. 受賞.....	86
7. 終わりに.....	87

1. まえがき

2012 年に私立大学戦略的研究基盤形成支援事業に選定されたプロジェクト「大規模高精度流体-構造連成解析手法の開発と詳細実験による精度・妥当性検証」が昨年度に終了となり、今年度から東洋大学計算力学研究センターはまた新たなスタートとなった。本報告はその1年目の活動を中心にとりまとめたものである。

研究内容は、これまでのように中心となるプロジェクトは持たないが、大きく2つの分野(グループ)を作った。1つは、これまでのプロジェクトの延長線上の位置づけで、流体-構造連成を中心とした連成解析分野、もう1つはさらに1つ前のプロジェクトでテーマとしていた逆問題・最適化からの流れを発展させた人工知能分野の研究である。前者についてはこれまでの研究成果の上に、より幅広い応用を考え、後者は計算力学における逆問題や最適化を踏まえつつ最新の人工知能技術をどのように適用していくかといった新しい分野の開拓を目指している。

本センターの活動にあたっては、学内外の研究者・技術者の方々、また、本学担当事務部にも多大なご支援・ご協力を賜っている。各々名前を挙げることはしないが、ここにあらためて謝意を表するとともに、関係各位にはさらなるご批判とご指導を賜れば幸いである。

2018 年 3 月

東洋大学計算力学研究センター長
田村 善昭

2. センターの概要

本センターは、わが国の私立大学学術フロンティア拠点のひとつとして文部科学省から設置が認められ、平成 17 年度に活動を開始した。その後、平成 23 年度に科学技術振興機構の戦略的研究推進事業 CREST の選定、続いて平成 24 年度に文部科学省の私立大学戦略的研究基盤形成支援事業の選定を受け、今日に至っている。

本センターに参加する研究員は、東洋大学の複数学部の教員（国際地域学部，総合情報学部，理工学部），研究助手，大学院生などを中核とし，また客員研究員として関連分野の研究者から構成されている。

各自の専門分野は，構造解析，流体解析，破壊解析，逆問題・最適化，大規模並列計算，可視化など，計算力学分野で必要とされるほぼ全ての分野に跨っており，この分野における専門家集団である。平成 23 年度に採択を受けた CREST では「京」コンピュータ利用のための超大規模解析技術に関して，また平成 24 年度からは，私立大学戦略的研究基盤形成支援事業の選定を受け，連成解析や計算力学の精度検証・妥当性検証にも積極的に取り組んでいる。

さらに，東洋大学 125 周年を契機とした国際化に合わせて海外の関連する大学と積極的に交流を進め，若手の人材育成にも寄与したいと考えている。

2.1. センター設置について

東洋大学計算力学研究センター設置の経緯とこれまでの概要は以下の通りである。

- 平成 17 年 6 月文部科学省私立大学学術研究高度化推進事業「学術フロンティア推進事業」に研究題目「数値逆解析手法の開発とその構造健全性向上のための応用」で採択され，計算力学研究センター発足
- 平成 17 年 12 月センター開所式開催のあと，白山第 2 キャンパス内計算力学研究センター棟に入居し本格活動開始
- 平成 22 年 3 月「学術フロンティア推進事業」終了
- 平成 23 年 8 月科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 CREST「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」に研究題目「ポストペタスケールシミュレーションのための階層分割型数値解法ライブラリ開発」で採択される
- 平成 24 年 4 月文部科学省私立大学戦略的研究基盤形成支援事業に研究題目「大規模高精度流体-構造連成解析手法の開発と詳細実験による精度・妥当性検証」で採択される
- 平成 29 年 3 月「私立大学戦略的研究基盤形成支援事業」終了

2.2. 組織

計算力学研究センターの組織は以下の通りである。

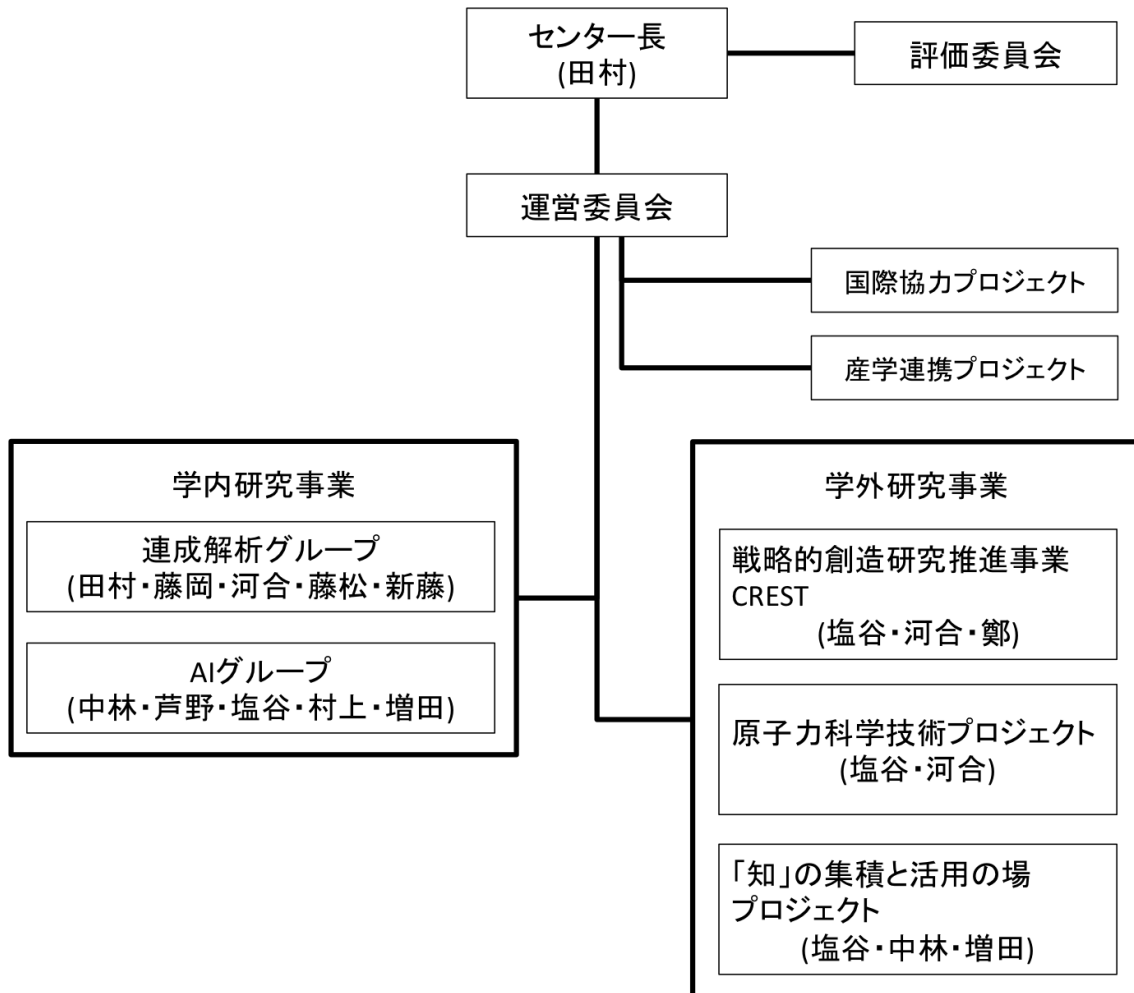


Fig.2.1. センターの組織

2.3. 構成メンバー

計算力学研究センターは以下のメンバーで構成されている。

センター長

田村 善昭（東洋大学総合情報学部総合情報学科教授）

研究員

芦野 俊宏（東洋大学国際地域学部国際地域学科教授）

河合 浩志（東洋大学総合情報学部総合情報学科教授）

塩谷 隆二（東洋大学総合情報学部総合情報学科教授）

新藤 康弘（東洋大学理工学部機械工学科助教）

田村 善昭（東洋大学総合情報学部総合情報学科教授）

中林 靖（東洋大学総合情報学部総合情報学科教授）

藤岡 照高（東洋大学理工学部機械工学科教授）

藤松 信義（東洋大学理工学部機械工学科准教授）

村上 真（東洋大学総合情報学部総合情報学科准教授）

研究助手

鄭 宏杰（東洋大学計算力学研究センター）

増田 正人（東洋大学計算力学研究センター）

客員研究員

江澤 良孝（工学院大学非常勤講師，元東洋大学総合情報学部教授）

大石 篤哉（徳島大学大学院理工学研究部准教授）

金山 寛（日本女子大学特任教授，九州大学名誉教授）

富山 潤（琉球大学工学部准教授）

松原 仁（琉球大学工学部助教）

矢川 元基（前東洋大学計算力学研究センター長，東京大学名誉教授，東洋大学名誉教授）

横山 真男（明星大学情報学部准教授）

3. 研究成果

3.1. 大規模高精度流体－構造連成解析手法の開発と詳細実験による精度・妥当性検証

大規模高精度流体－構造連成解析手法の開発と詳細実験による精度・妥当性検証グループ（以下、連成解析グループ）は、昨年度までの5年間行われた同名の私立大学戦略的研究基盤形成支援事業を受けて、ここで行われた研究を継続・発展させようとするものである。これまでの5年間で、流体－構造連成解析手法自体の開発は終わっているので、今年度は、検証のための詳細実験のまとめと、精度・妥当性検証の手法に重点をおいて研究を進めた。また、主に客員研究員を中心に、これまでの成果を踏まえてさまざまな応用研究も行ってきたので、これらを併せて報告する。

3.1.1. 標準問題のための弾性円柱の振動実験

(1) 目標・計画

流体－構造連成解析手法を検証するための標準問題として、低速風洞を用いた円柱の振動試験を行った。風路下流に実験模型を設置して試験を行い、数値解析の検証用データを提供することを目的としている。

(2) 意義・国際社会との比較

流体－構造連成問題について数値計算、実験は多数行われているが、その殆どが単独に行われたものである。文献にはいずれかの結果が引用される場合が多く、両者の信頼性を保証した上で、結果を議論した例が見られないのが現状である。本研究では、数値計算結果の信頼性を検証するためのデータを提供することを主眼として実験に取り組んだ。そのため、計算結果の検証に使用しやすい問題を選定し、データを提供することを目的としている。

(3) 研究内容

Fig. 1 は弾性円柱の振動試験の概要図である。風洞の出口面積は $A=0.3\times0.3\text{ m}^2$ であり、最大40m/s まで風速を上げることができる。風洞出口の直下にはシリコンゴム製の円柱が設置されており、サポート材で円柱の片端が固定されている。これは円柱の上端が固定端となっており、下端は自由であることを意味する。風路から放出される気流により、円柱が振動する様子を高速度カメラ(HAS-L1, (株)ディテクト)を用いて、円柱の側面と下面から撮影を行った。動画は VGA 形式であり、500fps で記録される。円柱の運動を解析するために、運動解析ソフトウェアである DIPP-Motion-Pro-N((株)ディテクト)を用いた。

Table 1 は弾性円柱の空力振動試験に使用した円柱の大きさとヤング率を示している。直径と長

さは1種類、硬さは3種類で実験を行った。ヤング率の右側に括弧書きした数値はゴムの硬さ試験法の一つであるデュロメータ硬さを意味している。A50 が最も柔らかい材質であり、下二桁の数字が大きいほど硬度が高い。

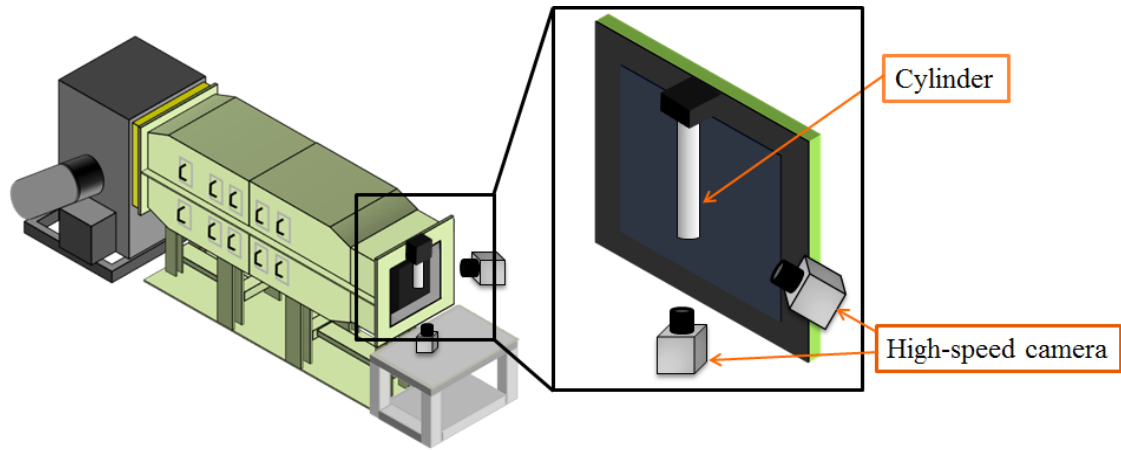


Fig.1 Schematic picture of experimental setup.

Table 1 Specifications of cylindrical cantilever.

Diameter d [mm]	20
Length L_c [mm]	160
Young modulus E [MPa]	2.9 (A50)
	4.9 (A60)
	6.8 (A70)

振動する円柱の動画像を取得した後、2 値化処理を行い、円柱領域を把握した。円柱の中心座標は円柱部分のピクセルを積算して求めた。その後、中心座標の時間履歴を取得し、円柱の変位と周波数特性について調べた。添え字 x, y は流れに平行な成分と垂直な成分を意味している。

Fig. 2 は Re 数に対する変位量 D と変位量の RMS 値 a を円柱の直径 d_c で無次元化した値を示している。縦軸と横軸は常用対数を取った値である。円柱の材質によらず、変位量 D_x と変位の RMS 値 a_x は Re 数と共に増加していく。RMS 値の傾きは、円柱の硬度が高いほど緩やかである。一方、A60 の RMS 値は変動の大きい結果を含んでいる(図↓)。

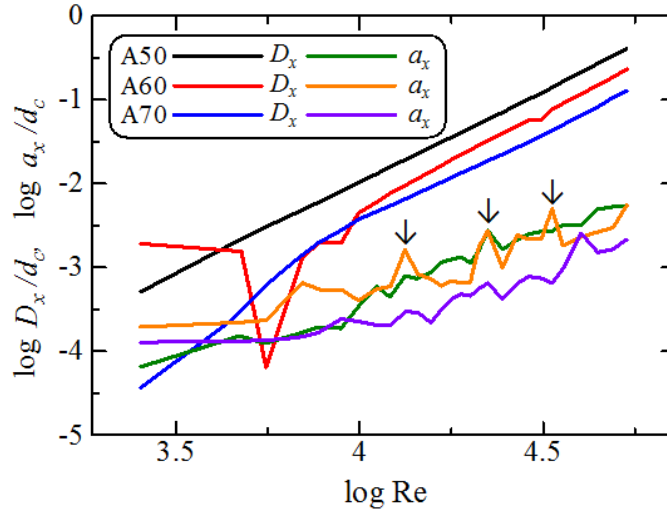


Fig. 2 Logarithmic scaled time-averaged displacement and R.M.S. amplitude.

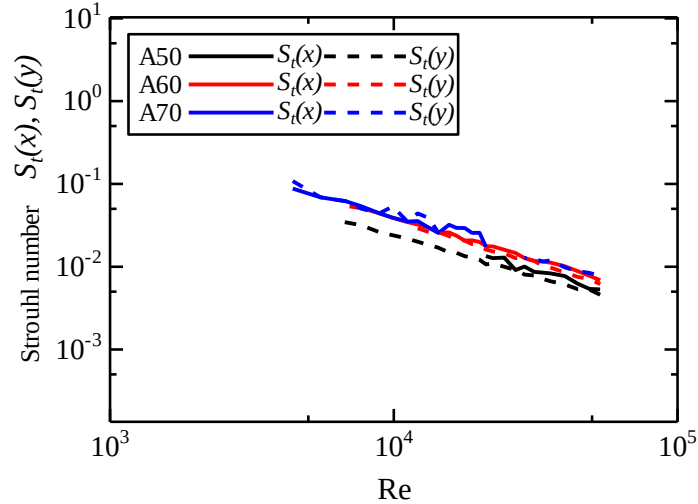


Fig. 3 Frequency characteristics of oscillating cylinder.

Fig. 3 は円柱の周波数特性を示している。St 数は Re 数と共に減少しており、その傾きは円柱の材質と変形の方法に依らず一定である。また Fig. 2 の RMS 値のばらつきは、周波数特性に影響していないことが分かる。

次に、測定値の統計的性質を調べてみた。Fig. 4 は A60 の円柱について Re 数ごとに a_x に関する共分散を、RMS 値の ± 5 倍の範囲で示した図である。比較のため、A50 の結果も示した。Re $< 1 \times 10^4$ の風速では横軸の原点にデータが集中しており、振動の振幅は殆ど変化しないことが分かる。Re $= 1 \times 10^4$ を越えた辺りから、緩やかに増加している。Fig. 2 で RMS 値の変動が大きかった位置を $\rightarrow$ で示す。他の Re 数の結果に比べて変位量の大きい成分が含まれており、変動に影響したものと考えられる。一方、RMS 値の変化が緩やかだった A50 の結果は、A60 のように顕著な傾向を確認することはできない。矢印で示したような A60 の統計的性質が Fig. 2 でみられた RMS 値の変動になったものと考えられる。

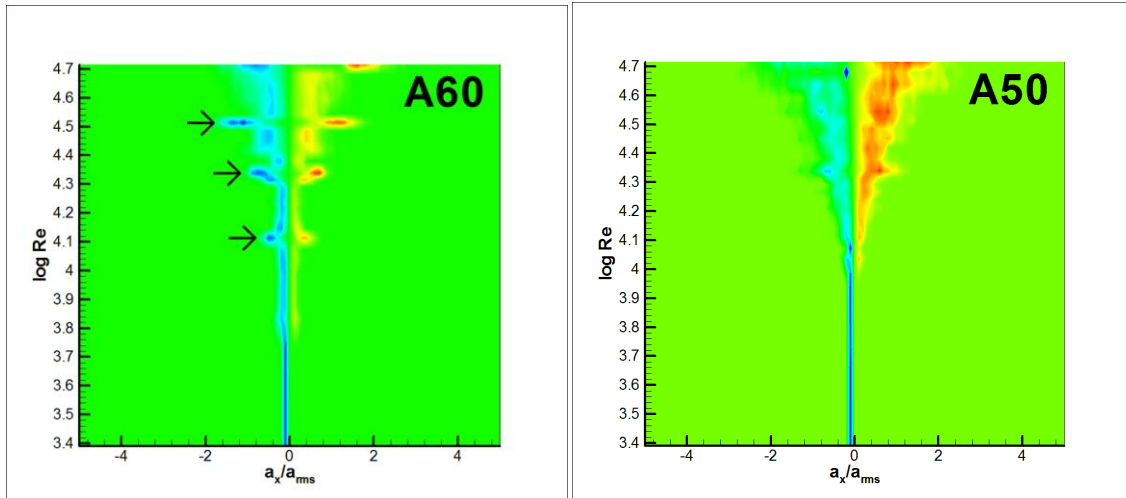


Fig. 4 Covariance distribution of oscillating circular cylinder.

(4) 平成 29 年度進捗状況

弾性円柱の振動実験を行い，変位量，変位の RMS 値，振動周波数の特性を調べた。測定値の信頼性を評価するために，実験条件ごとに共分散特性を確認した結果，弾性円柱の振動特性の傾向と対応付けることができた。

(5) まとめ

流体構造連成解析のための標準問題として弾性円柱の振動実験を提案した。数値解析結果の妥当性を検証するために利用可能な実験結果を示した。

3.1.2. 流体-構造連成解析の検証用風洞実験システムを用いたフラッタ特性の確認実験

(1) 目標・計画

フラッタ特性に関する理論的・実験的研究は，これまで多く行われてきた^(1,2)。しかし，系統的にデータを整理した成果は数少ない^(3,4)。本研究は様々なシート材のフラッタ特性を調べて，材料と流体力学の物理量を関連付けることで，フラッタ特性を整理できる無次元パラメータの提案を試みる。

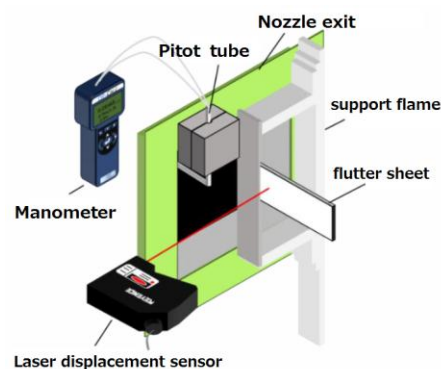
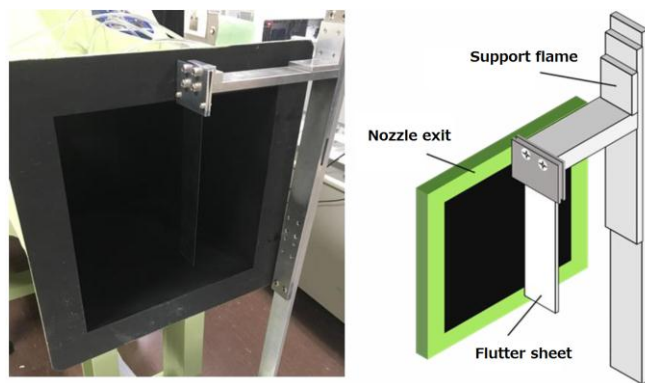
(2) 意義・国際社会との比較

翼のフラッタに関する数値計算は流体-構造連成問題の主要課題の一つである。計算機性能

の向上により、予測精度の信頼性は向上している一方で、数値計算結果の妥当性を確認するために参照できる実験データは数少ない。本研究ではフラッタ現象に関する基礎的な実験を通じて、無次元数を提案する。

(3) 研究内容

Fig. 1 は風洞装置の全体図である。風洞装置は出口断面積が $0.3 \times 0.3\text{m}^2$ であり、気流速度は最大 40m/s である。風洞装置の出口部分には Fig. 1 (b)に示したようなフラッタ装置を設置している。試験片であるシート材は金属フレームで支持されており、片端固定、他端自由の状態である。固定端は二枚の金属板で挟まれており、実験中に外れない様にボルト固定されている。鉛直と水平に設置したシート材の変位を測定するために、レーザ変位計(LK-G500, KEYENCE Corp.)を用いた。風速を変化させて実験を行い、フラッタ開始時の風速を調べた。フラッタ時のシート材の変位をサンプリング周波数 5kHz で約 13 秒間測定し、65000 点のデータを収録して周波数解析を行った。



(a) Wind-tunnel (vertical support).

(b) Horizontal support.

Fig.1 Experimental setup of wind-tunnel.

昨年度までに、金属製とゴム製のシート材を用いて実験を行ってきた。フラッタ特性を系統的に整理する無次元数の有効性を確認するために、今年度は樹脂製のシート材で実験を行った。

Table 2 はシート材の種類とヤング率を示しており、名称の横には、凡例に表記する略称を併記している。Table 3 はシート材のサイズを示している。

Table 1 Young's modulus of flutter sheet.

Name	Young's modulus [MPa]
Polyvinyl chloride (PVC)	2.95
Polyethylene terephthalate (PET)	1.94
Acrylic (AC)	3.01
Polycarbonate (PC)	2.24
Duracon (POM)	2.74
ABS	1.94
Polystyrene (PS)	1.98
Propylene	1.58
Polyethylene	1.06

Table 2 Dimensions of flutter sheet.

L [mm]	160, 180, 200, 220, 240
w [mm]	30, 35, 40, 45
t [mm]	0.2, 0.3, 0.5, 0.8, 1.0

Fig. 2 はシート材の幅 w に対するフラッタ開始速度 U の特性を示している。シート材の幅が増してもフラッタ開始風速は変化しないことが分かる。昨年度の成果で提案した無次元数は、流体力のモーメント $\rho u^2 / 2wL^2$ と曲げモーメント EI / t の比である。 t はシート材の厚さであるが、曲率半径 r は t に比例すると考えることができる。無次元数を整理するとシート材の幅 w の影響が打ち消される形をしており、実験結果は無次元数の形を支持している。

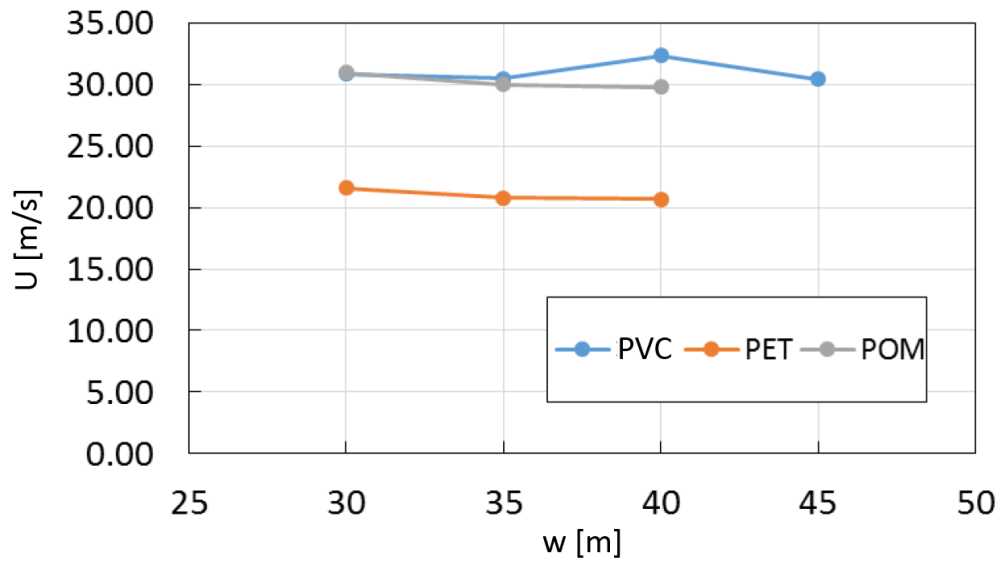
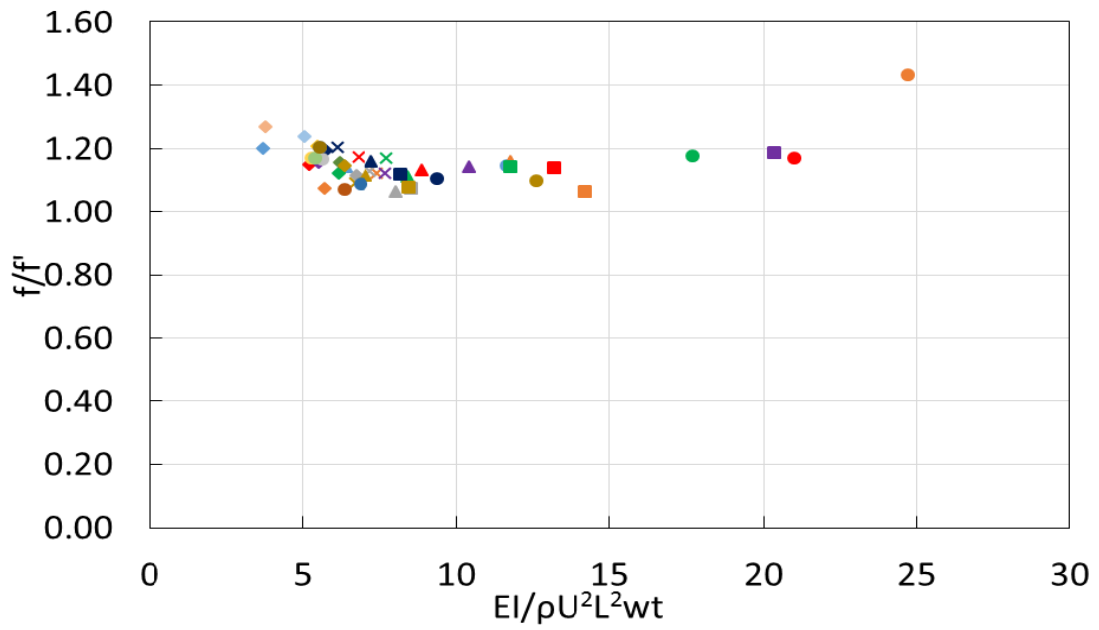


Fig.2 Comparison of flutter velocity to the width of flutter sheet.



● AC (t0.2w40L200)	▲ AC (t0.5w40L200)	◆ AC (t1w40L200)
● PET(t0.2w40L200)	■ PET(t0.3w40L200)	▲ PET(t0.5w40L200)
× PET(t0.8w40L200)	◆ PET(t1w40L200)	● PVC (t0.2w40L200)
■ PVC (t0.3w40L200)	▲ PVC (t0.5w40L200)	× PVC (t0.8w40L200)
◆ PVC (t1w40L200)	● PC (t0.2w40L200)	■ PC (t0.3w40L200)
▲ PC (t0.5w40L200)	× PC (t0.8w40L200)	◆ PC (t1w40L200)
■ POM(t0.3w40L200)	▲ POM(t0.5w40L200)	× POM(t0.8w40L200)
◆ POM(t1w40L200)	◆ ABS(t1w40L200)	◆ PS(t1w40L200)
◆ PP(t1w40L200)	◆ PE(t1w40L200)	■ POM(t0.5w40L180)
▲ POM(t0.5w40L160)	× POM(t0.8w40L180)	◆ POM(t0.8w40L160)
■ PVC (t0.5w40L180)	▲ PVC (t0.5w40L160)	× PVC (t0.8w40L180)
◆ PVC (t0.8w40L160)	■ PET(t0.5w40L180)	▲ PET(t0.5w40L160)
× PET(t0.8w40L180)	◆ PET(t0.8w40L160)	● POM(t1w35L200)
● POM(t1w30L200)	● PVC (t1w35L200)	● PVC (t1w30L200)
● PET(t1w35L200)	● PET(t1w30L200)	● PVC (t0.5w40L220)
● PVC (t0.5w40L240)	● PVC (t1w45L200)	

Fig. 3 Characteristics of flutter frequency to FSI parameter.

Fig. 3 は樹脂製シート材のフラッタ開始速度とフラッタ周波数を系統的に整理した結果である。縦軸はフラッタ周波数を固有振動数で無次元化した値であり、横軸は材料の曲げモーメントと流体力によるモーメントの比を表す無次元数である。大きさと材質を変更して実験した結果、樹脂製のシート材のフラッタ周波数は、概ね固有振動数で振動していることが分かる。また曲げモーメントが流体力の5～25倍の範囲でフラッタ現象が開始している。

この結果は、無次元数とフラッタ開始速度に関係があることを意味している。無次元数とフラッタ開始風速の関係を示した結果が Fig. 4 である。横軸の無次元数は、複雑な式となるため図中には示していない。樹脂製シート材の設置方法によらず、無次元数とフラッタ開始風速が概ね比例関係にあることが確認できる。

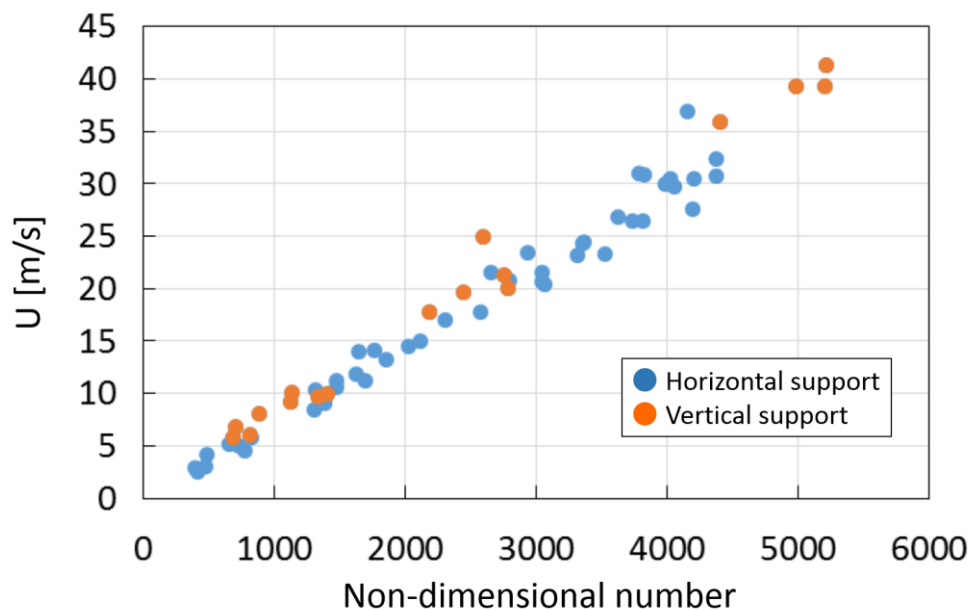


Fig. 4 Flutter velocity to non-dimensional number.

(4) 平成 29 年度進捗状況

樹脂製のシート材を用いてフラッタ実験を行った。シート材の大きさ、材質によらず、無次元数を用いてフラッタ周波数特性を系統的に整理できることが確認できた。シート材を水平支持、垂直支持の2種類で実験した結果、シート材の支持方法によらずフラッタ開始速度を予測できることが確認できた。

(5) まとめ

流体構造連成解析の検証に使用できる実験データを取得するために、フラッタ試験を行ってきた。金属製、ゴム製、樹脂製のシート材についてフラッタ開始速度を調べた結果、フラッタ特性を系統的な傾向が確認できた。実験結果に基づいて導出した無次元数は、シート材料の材質、大きさによらず、フラッタ特性を整理できる形をしている。またシート材の支持方法によらず、フラッタ開始速度を整理できることが確認できた。

参 考 文 献

- (1) Eloy, C., Souilliez, C., Schouveiler, L., "Flutter of a rectangular plate", J. Fluids Struct., 23, 904-919 (2007).
- (2) 伊藤憲一, 剛体と弾性体を用いた翼のフラッタ特性に関する研究(GS 流体力学(流体計測, 翼など)), 日本機械学会, 東海支部総会講演会講演論文集,(2009).
- (3) 黒川雄太, フラッタを生じる旗に作用する風荷重測定: その2 重量比およびアスペクト

- 比が風荷重に与える影響(膜構造:風洞,構造 I), 日本建築学会学術講演梗概集, B-1, (2007).
- (4) 山口信行, 伊藤恵介, 緒方正幸, 柔軟ウェブ基礎形態のフラッタ限界とその挙動に関する研究 (第 1 報, フラッタ限界の予測と風洞試験結果), 日本機械学会論文集 (B 編), 67 巻, 663 号 (2001-11), pp. 2738-2745.
- (5) 五十嵐保, 杉山均, 流体工学と伝熱工学のための次元解析活用法, 共立出版, (2013).

3.1.3. 連成解析の確率論的評価技術の開発

(1) 目標・計画

工業製品をはじめとする構造用包装や精密機器を衝撃から保護する緩衝材として用いられる段ボールは周知のように広く用いられている。段ボールは物流の基盤を形成する重要な製品であり, その品質が求められる。

しかし, 段ボールの設計では従来過去の経験や試行錯誤に依存しており, 理由としては形状が複雑であることや, 異方性を示す材料であるため材料物性値の設定が難しいことなどから, 数値解析を行なうことの障害となっている。そのため数値解析を利用して効率的に解析を行ない, さらにその精度妥当性を示すことは重要な課題といえる。

本研究では, 均質化法による数値解析と段ボールの曲げ試験から得られた試験値から弾性係数を求め, ベイズ推定を用いて求めた弾性係数に対する不確定性の低減を行う。不確定性の低減においてはハイパーパラメータに対して情報量基準(Widely Applicable Information Criteria, WAIC)^[1]を用いて最適化したパラメータと特に検討を行わないパラメータから求めた事後分布を比較検討することでその有効性を確認した。

(2) 意義・国際社会との比較

パリ協定により, 世界的な平均気候の上昇を産業革命以前の 2℃未満にする目標が掲げられている。段ボールは紙であることからリサイクルシステムが確立されており環境保全の観点からもこの目標に貢献できる一要因となる材料である。このような背景からも段ボールは多種多様な分野で用いられており, 数値解析を利用して解析を行ない, その精度妥当性を示すことができればコストダウンや設計期間の短縮など段ボール製品の効率的かつ迅速な設計が期待できる。

(3) 研究内容

本研究では段ボールを構成するライナと中芯の弾性係数を曲げ試験による観測値と数値解析をもとに階層ベイズモデルを用いて推定する。パイパーパラメータの設定には情報量基準に着目し, WAIC を用いて最適化されたパラメータを導入した。

(i) 曲げ試験による観測データの取得

本研究では図 2(a)に示す JIS P 3902, JIS P 3904 に準拠した表・裏 LB180, 中芯 MC120 で構成された両面段ボール(B flute)を対象に曲げ試験から変位を得る。試験片は同一の段ボールシートから $250 \times 250 \times 3\text{mm}$ を切り出し、温度 25 度、湿度 50% で前処理を施した。段ボールは異方性を有する材料であり紙巾方向(Cross direction, CD), 流れ方向(Machine direction, MD)で機械的特性が異なる。そのため、観測データ群を取得に際しては、両方向に対してそれぞれ各 10 回実施した。Fig. 2 に荷重変位特性を示す。ここで得られた各観測データに対して回帰直線を求め任意の変位をベイズ推定で用いる観測データとする。

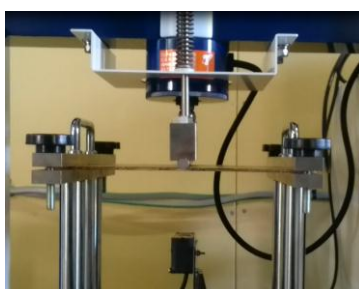


Fig. 1 Bending test

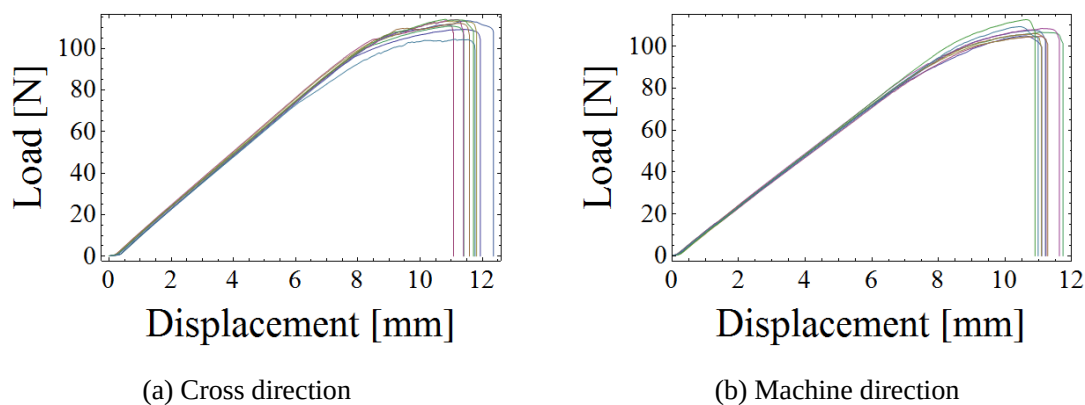


Fig. 2 Load - displacement characters

(ii) 数値解析

段ボールの有限要素解析を実施する場合、段が多数存在し、全ての段に対してメッシュ分割を行う必要がある。その結果、メッシュ数が膨大となり計算コストや計算時間は実用的ではない。そこで本研究では段ボールの周期性に着目し均質化法^[2]による解析を行なう。段ボールの一つの段をユニットセルとするマイクロモデルを Fig. 3(a)に示す。段ボールの中芯は製造過程に依存し各段で異なる波形状を有する。そこで本研究では Harrysson の数値シミュレーション解析モデル^[3]にならい中芯を正弦波形として近似しモデル化を行った。本研

究ではライナと中芯を独立した材料とみなし各々に弾性係数を設定する。また、全要素数は解析時間を考慮し 2973 とした。段ボール試験片の全体構造解析を行うための有限要素モデルを Fig. 3(b)に示す。ここでは曲げ試験と同様の試験片の寸法をモデル化し境界条件を与える。CD に対して解析を行う場合の境界条件は C_1 , C_2 面上の xyz 方向を完全拘束し, L_1 線上の鉛直方向に任意の荷重を与える。一方, MD に対して解析を行う場合の境界条件は C_3 , C_4 面上の xyz 方向を完全拘束し, L_2 線上の鉛直方向に任意の荷重を与える。本研究では CD, MD の境界条件を用いて 2 通りの数値解析を行った。全要素数は変形挙動が変わらない程度の規模を選択し 1492 とした。

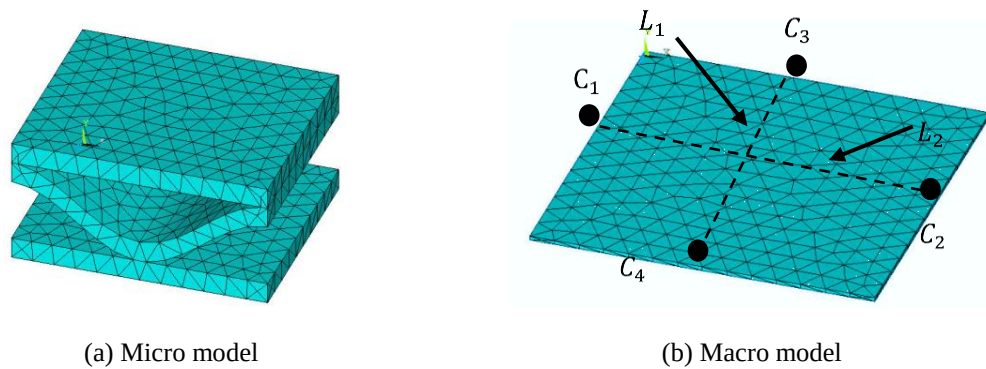


Fig. 3 Homogenization model

(iii) ハイパーパラメータの最適化

階層ベイズモデルにおけるハイパーパラメータは事前分布のパラメータに対してさらにパラメータを導入するものである。ハイパーパラメータの設定において全ての不確定性因子を考慮するのは膨大な時間と労力を必要とするため効率的ではない。そこで試験機の精度に着目しガンマ分布を仮定した。ここで、ガンマ分布に対して WAIC による最適化を行った。WAIC はベイズの定理^[4]に基づき推定された事後分布の周辺尤度で表され、ハイパーパラメータの関数となり WAIC を最小化するモデルは周辺尤度を最大化するという意味でよいモデルでとなる。したがって、ガンマ分布の周辺尤度を最大化するパラメータを最尤推定法により決定した。

(iv) 確率モデル

弾性係数を推定するため既存研究^[5]で構築した単純なベイズモデルを階層ベイズモデルへと拡張したものを用いる。このモデルは CD, MD の観測データ群から各々回帰直線を求め、任意の変位と近似値となるようライナと中芯の弾性係数を変化させた数値解析による探索を行った結果から応答曲面近似式を求める。ここで求められた CD, MD の応答曲面近

似式を尤度関数として用いる。事前分布の平均は CD, MD の応答曲面近似の重ね合わせから求めた値を用いた。一方、分散共分散はハイパーパラメータを導入している。

(V) 事後分布

WAIC により最適化されたハイパーパラメータの有効性を確認するため、一様分布を設定したハイパーパラメータと比較を行った。事後分布の推定にはマルコフ連鎖モンテカルロ法(Markov Chain Monte Carlo Methods, MCMC)^[6]を用いた。Fig.4 に事後分布を示す。Fig.4 よりそれぞれの事後分布を比べるとの全体分布形状は類似しているが、最適化を行った事前分布では分布形状の幅が狭くなっている。さらに、確信度の高い区間も的確に捉えられているが、事前分布に一様分布を設定した場合では確信度の高い区間の幅は広領域に広がっている。その結果、無情報事前分布によりハイパーパラメータの影響を考慮しない場合に比べて最適化パラメータを用いる場合、ばらつきにライナで 31%, 中芯で 22%の改善が図られた。このことによりハイパーパラメータの設定の違いにより事後分布に与える影響が異なることが確認できた。従って、最適化パラメータを用いることで事後分布に与える影響は大きく、的確にハイパーパラメータを設定できたといえる。

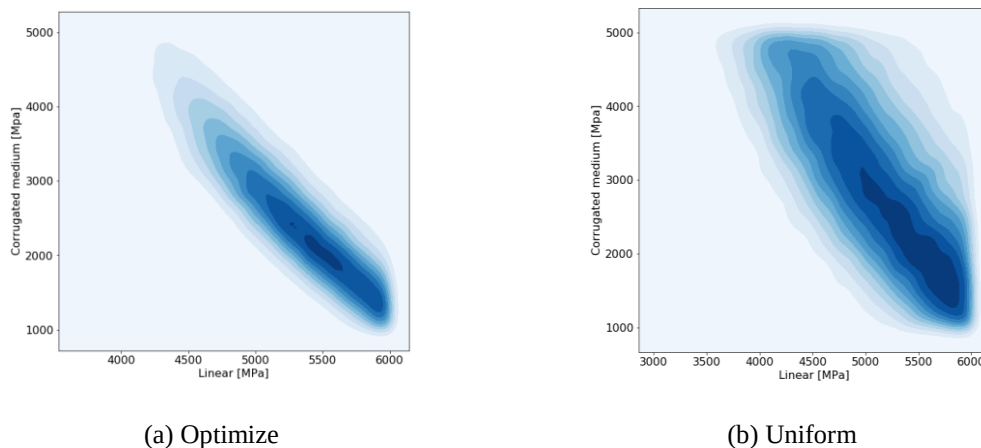


Fig.4 Posterior distribution of elastic modules obtained by Monte Carlo simulation

(4) 平成 29 年度進捗状況

既存研究で用いた単純ベイズモデルを階層ベイズモデルへと拡張した。階層ベイズモデルにおいて情報量基準(WAIC)を用いて最適化したパラメータを一様分布と比較を行うことでその有効性が示された。

(5) まとめ

数値解析を有効に用いるためにはその妥当性が保証されなければならない、ベイズ推定など統計的手法を用いた不確定性の低減が望まれる。本研究では段ボールを例に挙げのライナと中芯の弾性係数の不確定性の低減を行った。不確定性の低減には階層ベイズモデルを構築し情報量基準(WAIC)を用いて最適化を行ったパラメータを導入することで推定精度が大きく向上しており不確定性の低減が可能となる結果が得られ、情報量基準によるパラメータ最適化の有効性が示された。

参考文献

- [1] Watanabe, S. , Asymptotic Equivalence of Bayes Cross Validation and Widely Applicable Information Criterion in Singular Learning Theory, Journal of Machine Learning Research, Vol.14 (2010), pp.3571-3591.
- [2] 寺田賢二郎, 菊池昇, 均質化法入門, 丸善出版 (2003).
- [3] Harrysson, A. and Ristinmaa, M., Large strain elasto- plastic model of paper and corrugated board, International Journal of Solids and Structures, Vol.45 (2008), pp.3334-3352.
- [4] 松原望, ベイズ統計概説, 培風館 (2010), pp.4-47.
- [5] Shimamura, S., Ezawa, Y., Tamura, Y., Takashimizu, S. and Satou, D., High Accurate Analysis by Experiment and Simulation Using Bayesian Inference for Corrugated Cardboard, Transactions of JSME, Mechanical Engineering Journal, Vol.3, No.4 (2016)
- [6] 久保拓弥, データ解析のための統計モデリング入門, 岩波書店 (2012), pp.170-191.

3.1.4. オープン CAE による接触解析の精度・妥当性検証

(1) 目標・計画

製造業の設計現場をはじめとして広く用いられている固体の有限要素解析に対する「解析の品質確保」の重要性は広く認識されている通りである。企業でよく使用されている商用ソルバでは、ソルバ開発元によるソフトウェア品質管理とユーザ支援によってある程度の品質確保が図られており、ソースコードの秘匿化により、ユーザ自身がアルゴリズムを確認することはあまりない。近年、利用が広がりつつあるオープン CAE ^{注)} の場合は、ソースコードが公開されているためユーザ自身が確認、改変ができる一方で、ソフトウェア品質とユーザ技量の両方の検証がユーザに委ねられるため、V&V における新たな課題が提起されている。ただし、ソースコードが公開され、無償であることからアクセス性が高く、オープン CAE が商用ソルバよりも社会的受容性に優れている側面もある。

本研究では、固体の有限要素解析に対する精度検証の方法と事例を蓄積し、公開する上で、商用ソルバと並んでオープン CAE を取り上げることで、より幅広いユーザが自ら取り組み得る V&V 活動の実例として提示する。

注) Open Source CAE と呼ぶのが一般的であるが、ソースコード以外の知識情報やユーザコミュニティを含めた広義な概念として「オープン CAE」と呼んでいる[1]。

(2) 意義・国際社会との比較

無償で利用できるオープン CAE を取り上げることで、市民目線での検証が可能になり、精度検証の客観性、計算力学に対する社会的受容性が高まる。安価な検証手段を提示することで新興国や小規模企業での普及にも貢献し得る。また、形状モデルデータや可視化ツールを製品開発・製造のための共通プラットフォームとしての利用が可能であることから、ものづくりのグローバル化に寄与する。ユーザ自身に対して高い技術力を要求することから、意欲のあるユーザの自己研さん(結果的に解析の品質確保につながる)のための利用でも有利になる。

(3) 研究内容

オープン CAE の一例としてフランス電力(EdF)が開発した Salome-Meca [2] を取り上げ、精度・妥当性検証を行う。2015 年度は引張試験を例題として材料非線形問題を取り上げ[3]、2016 年度は文献情報をもとに非定常熱応力による熱疲労問題を取り上げた[4]。2017 年度は、実用上重要な接触解析に関連して、ボルトで締結した平板試験片を用いた引張試験を行い、Salome-Meca による解析との比較を行った。商用 CAE ソルバ MSC.Marc [5] とも比較した。

(4) 平成 29 年度進捗状況

(a) 試験片および試験方法

試験片は図 1 にアセンブリモデルを示す 2 枚の SS400 製平板の中央に直径 14 mm の穴をあけ、M12 のボルト 1 本で締結したものである。平板試験片の形状、寸法は図 2 に示す通りである。本試験片は文献[6]で行われた試験を参考に設計したが、学内試験機(島津製作所製オートグラフ AGS-H, 最大荷重 10,000 N)に合うように掴み部を狭くしている。

試験片には、文献[6]を参考に、図 3 に示す 8 箇所ではずみゲージによるひずみ計測を行った。試験では、3000 N まで負荷した状態で保持し、ひずみ分布を計測した。

(b) 解析方法

解析には Salome-Meca 2015.1 に内包されたソルバ Code_Aster Ver. 11.7 を使用した。解析モデルと要素分割、境界条件を図 4 に示す。接触解析を行う都合から、使用要素は四面体線形要素とし、10630 要素、3814 節点とした。

解析方法は、柴田による文献[7]を参考に設定した。試験は弾性範囲で行われたため、弾性接触を想定し、SS400 を再現するよう、ヤング率を 206 MPa, ポアソン比を 0.3 とした。

(c) 解析結果

解析結果の一例として、荷重方向のひずみ分布のコンター図を図5に示す。また、ひずみゲージ計測の結果について、オープン CAE ソルバ、Code-Aster による解析と、商用ソルバ MSC.Marc による解析の結果を比較して図 6 に示す。図 6 から、オープン CAE ソルバによる解析結果は、試験および商用ソルバによる解析とよく一致した。

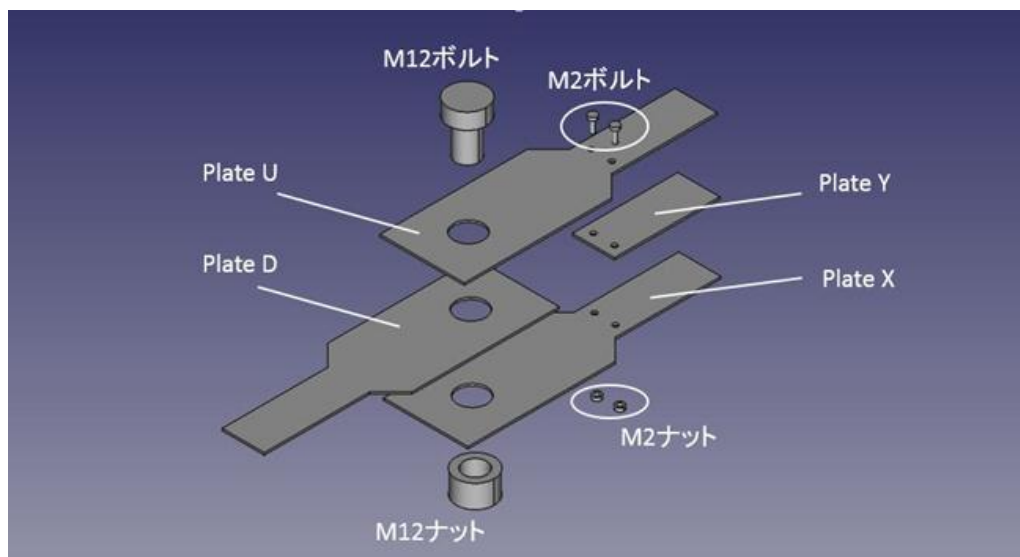
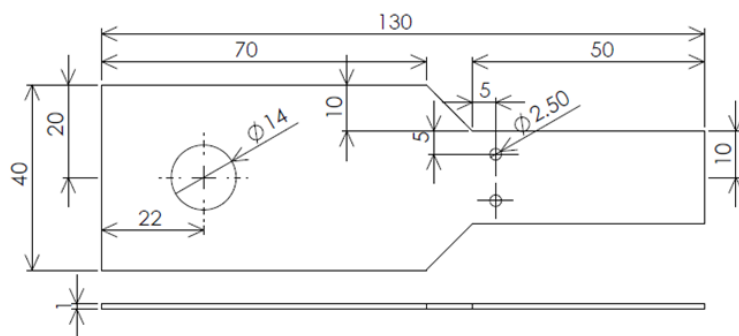
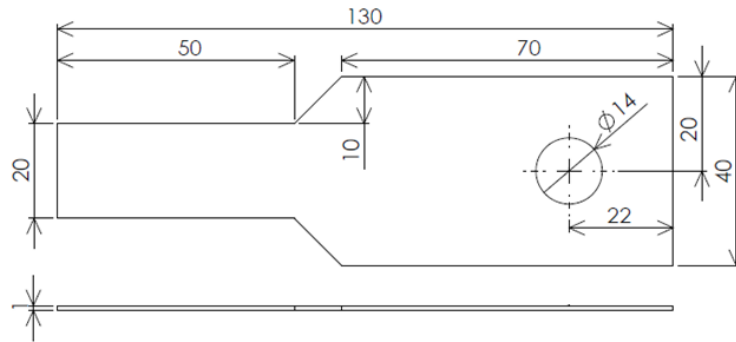


Fig. 1 Assembly model of the bolted joint plate specimen tested



(1) Plate U



(2) Plate D

Fig. 2 Dimensions and configurations of plates composing the bolted joint specimen

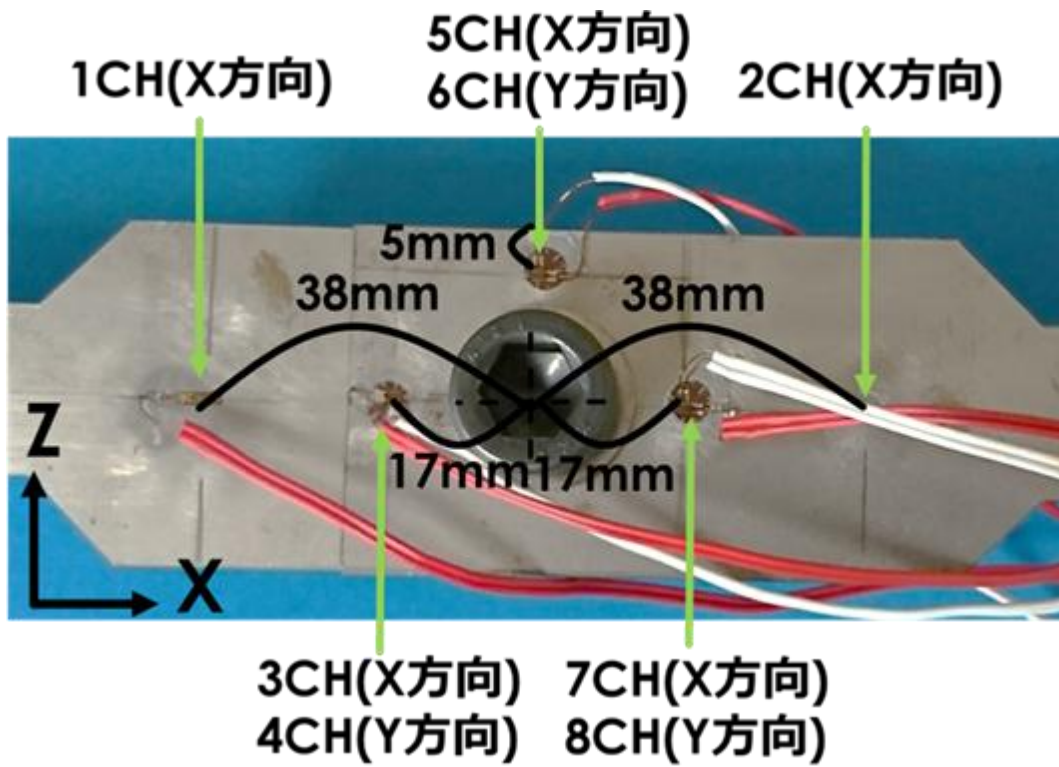


Fig. 3 Strain measurement points of the plates

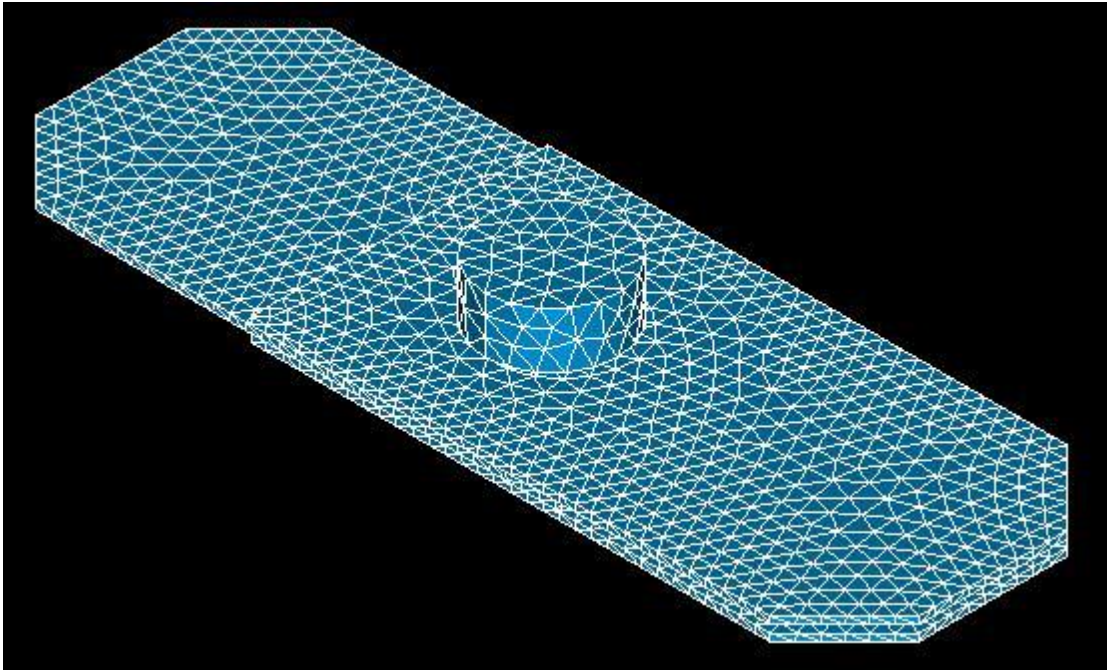


Fig. 4 Finite element subdivisions of the specimen

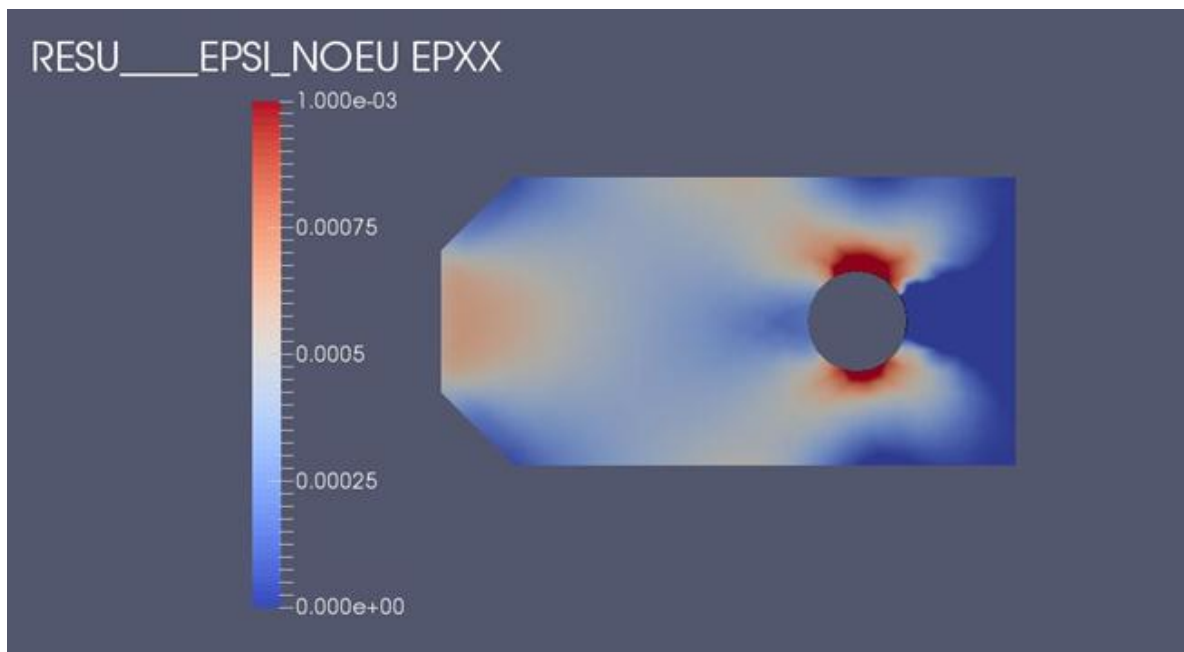


Fig. 5 Strain distributions on Plate D from FEA (strain in the loading direction)

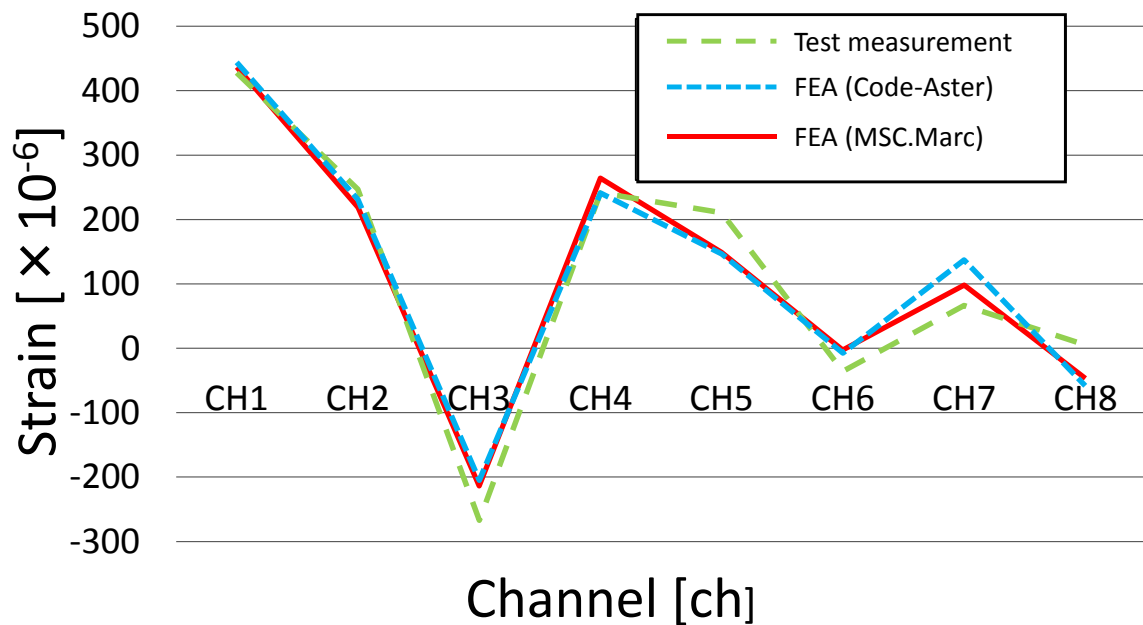


Fig. 6 Comparison between strain measurements and FEA results by Code-Aster and MSC.Marc

(5) まとめ

固体の有限要素法に基づくオープン CAE, Salome-Meca の接触解析機能について, 文献情報および学内試験機を用いた実験および商用ソルバとの比較による精度・妥当性検証を行った。引張試験機は工学系教育機関や自治体ごとに設置されている公設試験場にはたいがい導入されており, ひずみゲージ計測は安価であるため, 中小企業でも自社の解析技術力の検証や社員教育に利用でき, 計算力学技術の普及に資するものと見込まれる。

参考文献

- [1] (社)オープン CAE 学会, <http://www.opencae.or.jp/>, (2018 年 1 月 13 日閲覧)。
- [2] EdF, Code-Aster.org, <http://www.code-aster.org/>, (2018 年 1 月 13 日閲覧)。
- [3] 藤岡, 構造解析ソルバ検証用参照解の整備 (低合金鋼引張試験の Code-Aster による再現), オープン CAE シンポジウム 2015@富山, オープン CAE 学会, 富山, 2015.11。
- [4] 三浦, 藤岡, Salome-Meca を用いた熱疲労試験の再現解析, オープン CAE シンポジウム 2016@東京, オープン CAE 学会, 2016.11, 東京。

[5] MSC Software, <http://www.mscsoftware.com/>, (2018 年 1 月 13 日閲覧).

[6] 坂本他 6 名, ボルト締結体の構造解析精度向上に関する研究, 山梨県工業技術センター研究報告, No. 26, (2012), pp. 120-126。
https://www.pref.yamanashi.jp/yitc/kofu/documents/report-h23_25.pdf, (2018 年 1 月 13 日閲覧).

[7] 柴田, オープン CAE「Salome-Meca」構造解析―「弾塑性」「接触」解析編 (I・O BOOKS), 工学社, (2016)。

3.1.5. 大規模構造解析のための領域分割法に基づく並列 FEM ソルバーの性能最適化

(1) 目標・計画

近年マイクロプロセッサアーキテクチャのマルチコア化、あるいは今後のさらなるメニーコア化に伴い、スパコンをはじめとするHPC環境において新たな性能上の問題が生じている。これはスパコンにおける並列ソルバーの利用コア数に関して、数千・数万はもとより場合により百万単位のコアを用いた超高並列環境の登場を意味する。特に、スパコンを構成する各計算ノード内におけるマルチスレッド環境での並列性能が問題となってきた。本研究では領域分割法にもとづく大規模並列有限要素解析について検討する。

領域分割法 (Domain Decomposition Method : DDM) は有限要素解析の並列化、大規模化のための主要な方法の一つであるが、これに基づくFEMソルバーの設計において、部分領域ローカルFEソルバーの実装はDDMコード全体の性能を決定する重要部分であり、従来から計算上におけるホットスポットとなってきた。また、BDD前処理のために必要とされるコースグリッド修正のためのコース問題向けソルバーの実装もまた、近年の超高並列環境において性能上問題となっている。

そこで本研究では、ここ数年における計算機アーキテクチャの劇的な変化を踏まえ、領域分割法における部分領域ローカルFEソルバーおよびBDD前処理のためのコースソルバーの実装についてそれぞれ再検討を行う。

(2) 意義・国際社会との比較

計算機技術の発展に伴い、複雑形状を有する人工物の挙動を精緻に予測するために大自由度規模の三次元有限要素解析が用いられるようになってきた。このような大自由度規模の問題をスーパーコンピュータ等の先端計算機資源で効率よく解くためには並列計算が不可欠であり、領域分割法は有限要素法の並列計算手法のうち、最も有効なものの一つとして認知され、研究開発が進められてきた。

一方、プロセッサのマルチコア化に伴い浮動小数点演算性能が強化される一方で、メモリバンド幅向上がこれに追いついていけないこと、すなわちByte/FLOPS値（B/F値）の低下が懸念されている。その結果として、メインメモリをただ読み書きしているだけのアプリケーションはマルチコア環境においてスケールしなくなり、キャッシュメモリを有効に利用する工夫が必要となる。

こういった状況から、領域分割法ソルバーにおける部分領域ローカルソルバーおよびBDD前処理のためのコースソルバーの実装を再検討する必要性が生じているように思われる。より具体的には、部分領域サイズとして数千から数万自由度規模を想定し、これに対しキャッシュを有効利用し、かつスレッド並列化が容易なローカルソルバーおよびコースソルバー設計が望まれている。プロセッサのマルチコア化に伴い浮動小数点演算性能が強化される一方で、メモリバンド幅向上がこれに追いついていけないこと、すなわちByte/FLOPS値（B/F値）の低下が懸念されている。その結果として、メインメモリをただ読み書きしているだけのアプリケーションはマルチコア環境においてスケールしなくなり、キャッシュメモリを有効に利用する工夫が必要となる。

(3) 研究内容

DDMではまず、解析領域全体を複数の重ならない部分領域に分割する。続いて、部分領域についてそれぞれ適当な境界条件を設定したうえで独立に解析を行う。領域間境界におけるつり合いが取れるように境界条件を修正しながらこれを繰り返す。

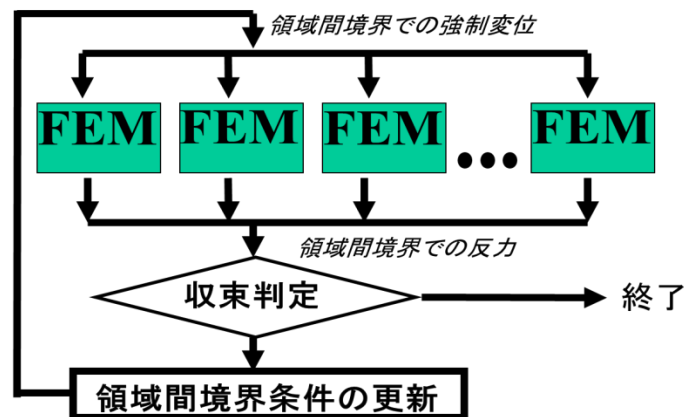


図1 領域分割法のフロー

領域分割法ソルバーにおけるこれまでの実装では、その部分領域ローカルFEソルバーにおける有限要素解析に関して、線形代数ソルバーとしては直接法ソルバーが用いられていた(DS-Sky)。まずDDMループの最初に、部分領域ごとの剛性行列を組み立て、行列分解しておく。以後DDM反復ごとに、すでに分解済みの行列データに対し前進後退代入(Forward and Back-Substitution : FBS)により解を求める。部分領域サイズの増大に伴い、このアプローチでは大量のメモリが必要となる。また、そのFBS部分がメモリバンド幅依存となり、マルチコア環境でのスケール性に劣る。

そこでDDMの部分領域ローカルソルバーについて、その線形代数ソルバーを直接法から反復法に切り替えることを考える。反復法ソルバーでは、本来疎行列である剛性行列の非ゼロ成分のみをコンパクトに利用することができるため省メモリである。さらに部分領域サイズによってはプロセッサのキャッシュ容量に収めることも可能であり、マルチコア環境においてスケールしやすい。よって反復法の前処理によっては、直接法ソルバーに拮抗する性能が得られる可能性がある。ここでは、三次元ソリッド構造解析を前提に共役勾配法(Conjugate Gradient : CG)ソルバーを用い、行列データを非ゼロ成分形式で保存するIS(Iterative Storage)型ローカルソルバーとして、対角スケーリング前処理を用いたIS-diag、およびSSOR(Symmetric Successive Over-Relaxation)前処理に高速化のためEisenstat技法を導入したIS-SSORの、二つのタイプの実装について考える。

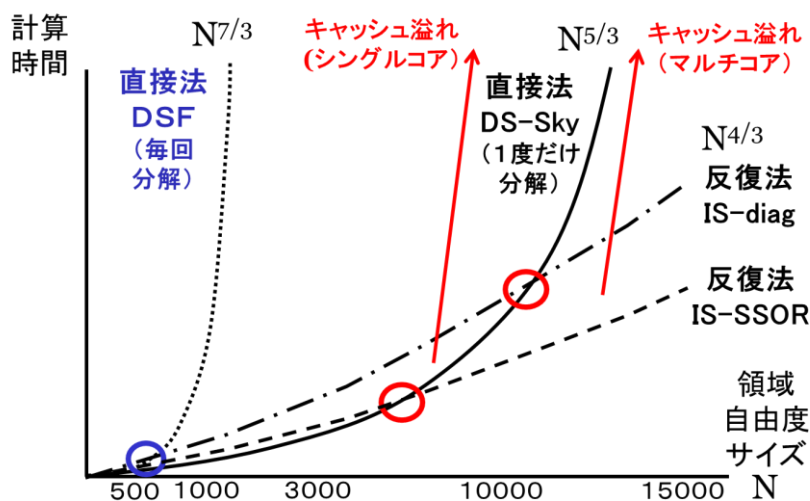


図2 部分領域ローカルソルバーにおける領域自由度と計算時間との関係

(4) 平成 29 年度進捗状況

ここでは、反復法ベースの部分領域ローカルソルバーの性能最適化のために、ローカルソルバーの内部におけるCGソルバーの収束トレランスを制御することを考える。

DDMでは領域間境界でのつり合いを求めるために繰り返し計算を行う。これはより具体的には、インターフェイス問題をCG法によって解くことを意味する。その結果、DDMにおけるCGループの各ステップにおいて、部分領域ごとにローカルソルバーが起動される。今回はこのローカルソルバーの中でさらに反復法ソルバーが用いられるため、DDM全体ではCGループがグローバルおよびローカルで二重にまわることになる。

外側ループのDDMにおけるCGの収束判定誤差について、工学的応用を考えて適当な値、例えば 10^{-6} 乗程度とすると、内側ループの部分領域ローカルソルバーにおけるCGでは経験上それより厳密な収束判定、例えば $10^{-10} \sim 10^{-12}$ 乗程度の収束判定誤差が要求される。

しかしながら、これはDDMが最終的に収束した時点において適用されるべきことであり、DDMループがまわっている途中の状況では、ローカルソルバーの収束判定をより甘めに設定することが可能である。これにより、ローカルソルバー内で実行されるCG反復のDDMを通したトータルでの累積回数を削減することができる。

具体的には、内側であるローカルソルバー内の CG 収束判定誤差を、その時点での外側 DDM-CG 収束状況に対し相対的に設定する。例えば、最終的に DDM-CG 収束判定誤差が -6 乗、それに対してローカルソルバー内 CG のものが -10 乗であるとすれば、その内外 4 乗の違いを常に DDM の途中段階でも維持するようにする。すなわち、外側の DDM-CG 収束計算のある時点で初期残差に対し -2 乗程度に収束しているのであれば、このステップにおけるローカルソルバーの CG 収束判定誤差を 4 乗だけスケールダウンして -6 乗程度に設定する。

(5) まとめ

領域分割法に基づく並列有限要素解析において、その部分領域ローカル FE ソルバーの実装に反復法ソルバーの導入を検討し、収束トレランスの制御による反復回数および計算量の削減を試みた。

3.1.6. 超音波治療用プローブの形状による音圧分布特性解析

(1) 目標・計画

近年、悪性腫瘍による死亡者は男女ともに年々増えており、2016 年における癌死亡者数は、約 37 万 3 千人であった。悪性腫瘍による死亡者数の増加の主な原因は人口の高齢化であるため、これからますます増加していくことが予測されている¹⁾。

悪性腫瘍の治療法として、患者に手術を施す外科療法、高エネルギーの放射線を照射して癌細胞を死滅させる事によって癌の増殖を阻止する放射線療法、患者に抗癌剤を投与する事によって癌治療を行う化学療法等があるが、近年、HIFU(High Intensity Focused Ultrasound)療法が注目されている。この治療法は、体外より照射した超音波を目的部位に集束させ癌組織を壊死させる方法である。この治療法を脳腫瘍に用いる際の問題として、骨などの人体組織における超音波の反射、屈折により、焦点位置が移動し、正常組織を傷付ける恐れがある。

このような状況に対し、より安全で効果的な HIFU 治療を行うためには、術前に超音波が生体内を伝搬する様子をシミュレーションする必要がある。本研究では、ハンドヘルド形式のプローブを有する小型の超音波治療装置を用いた際の音圧分布に関して FDTD (Finite-difference time-domain) 法を用いた解析を実施し、プローブ形状が超音波商社領域へ及ぼす影響について数値的検討を実施した。

(2) 意義・国際社会との比較

ハンドヘルド形式の簡便な超音波治療装置において、プローブ形状によって加温領域制御可能

となることで、患者個々の腫瘍形状に合わせた低侵襲治療を行うことができるようになり、癌の低侵襲治療分野へ及ぼす影響は大きいと考えられる。

(3) 研究内容

本研究では、Fig. 1 に示すような超音波プローブを直接幹部へ接触させ治療する小型の HIFU 治療システムを対象として、プローブの先端形状を変更した際の音圧分布制御の数値的検討を実施した。解析内で形状変更を行ったプローブの形状写真を Fig. 2 に示す。本プローブは取り外し可能なアクリル製のプローブキャップと超音波トランスデューサを含む本体とで構成されている。本研究では、この取り外し可能なプローブ先端パーツのテーパ角度を 60、70、80 [deg]とした解析モデルを作成し検討を行った。

(i) 解析モデル

本研究で作成した解析モデルであるプローブ形状を Fig. 3 に示す。本研究では先端形状の高さを一定として、テーパ部の傾きを3種類変更したモデルを作成した。また、今後の研究において実験結果との比較検討を行うために、アクリルキューブに超音波を照射した際を想定し、解析モデルの作成を行った。プローブ内部は Fig. 1 の実機より採寸したパーツを配置しモデル作成を行った。トランスデューサを含む本体部分に関しては、共通モデルである。プローブ内部は水で満たされた状態であり、プローブ周辺領域は空気層とした。



Fig. 1 HIFU device



Fig. 2 Ultrasound probe

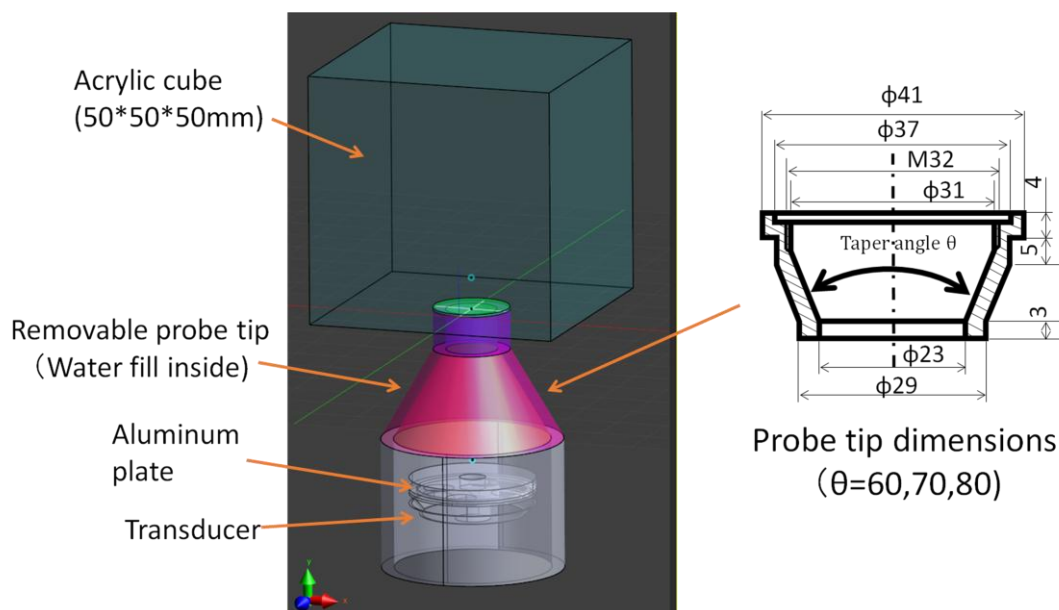


Fig. 3 Analysis model

(ii) 解析条件

本研究では FDTD 法を用いた音圧分布解析を実施した。使用した解析ソフトは ZMT(Zurich Med Tech) 社製の Sim4Life® 内の Acoustic Solver を用いた¹⁾。本解析モデルを構成する各材料の音響特性を Table 1 に示す^{2,3)}。また、トランスデューサーから発生する超音波の周波数は実機と同様に 800 [kHz]とした。解析モデル要素の一片の大きさは 0.15mmであり、総要素数は 348,397,000 であった。解析 PC は、CPU: Intel Core-i7 4770、memory: 32GB であった。

Table I. Material properties

Matrerial name	Mass Density [kg/m ³]	Speed of Sound [m/s]	Acoustic Impedance [Mrayl]
Aluminum	2700	5303	14.3235
Air	1.165	343	0.000399
Acrylic resin	1190	2730	3.2487
Water	994	1482.3	1.47346

(iii) 解析結果

Fig. 4 に解析モデル中央断面における超音波音圧分布解析結果を示す。この解析結果により、超音波プローブ先端の形状を変更することによって超音波の照射領域や深さを変更することができる可能性を示した。現段階では解析の初期過程であるが、今後、プローブの形状と照射深さおよび領域との関係についてまとめていくことを予定している。

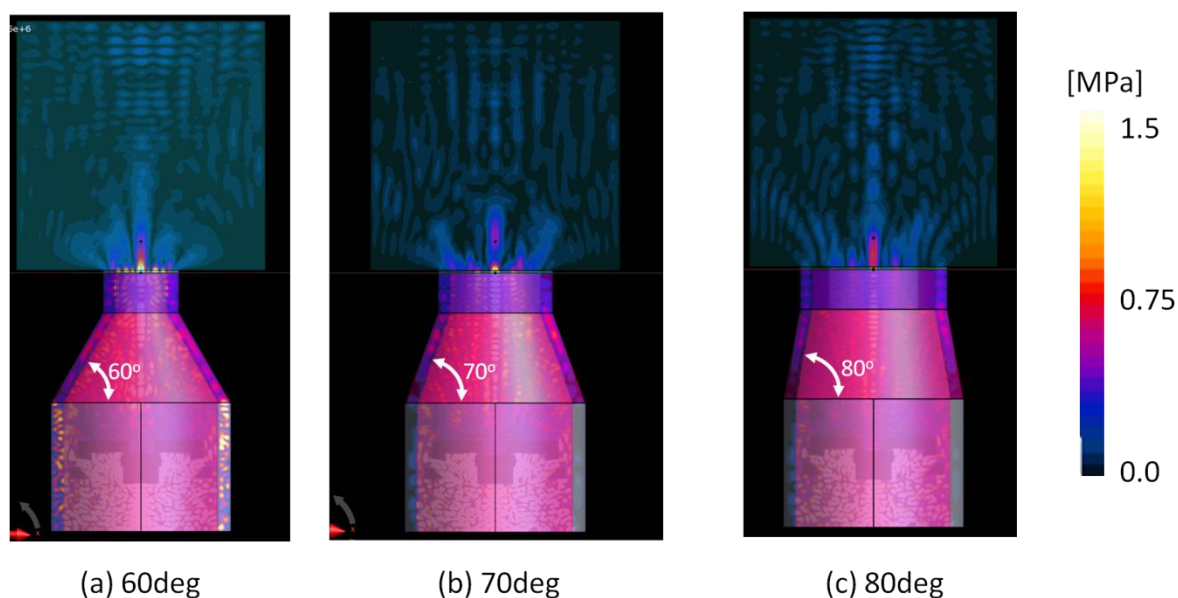


Fig. 4 Ultrasound Pressure distributions with each angles of probes

(4) 平成 29 年度進捗状況

本年度は新たに超音波治療装置のプローブ形状と照射領域との関係性について数値的に解明するべく、FDTD 法を用いた音圧分布解析を実施した。FDTD 法解析では立方体要素のため、要素数が膨大になることが予想されたが、現有の PC で解析を行うことに成功した。さらに現在、基礎的な解析を進めており、先行研究⁴⁾で行った、アクリルへの照射実験との比較検討を進めている。実験と数値解析の妥当性を検証後、プローブ形状のパラメータと照射領域の関係性について明らかにしていく。

(5) まとめ

本研究では、癌治療法の一つである集束超音波治療方法(HIFU)における、超音波照射領域制御の新たな手法の一つとして、プローブ先端形状を変更する方法を提案し、その基礎的な部分について FDTD 法を用いた数値解析を実施した。本解析により、プローブ内部および照射体内での超音波音圧分布を推定できる事を示した。また、プローブ形状を変更することで、照射深さ、領域の大きさを変更できる可能性を示した。今後さらに研究を進め、実験との比較件を行う予定である。

[参考文献]

- (1) 国立がん研究センター がん情報サービス 最新がん統計 : https://ganjoho.jp/reg_stat/statistics/stat/summary.html (2018/01/11 時点アクセス可能)
- (2) 大平克己, 非接触・空中伝搬超音波検査装置「NAUT21」に必要性和その応用, Eizo joho industrial 2013, p.69, (2013)
- (3) Cornelius T. Leondes: Biomechanical Systems, CRC Press, pp.(4-19)-(4-27), (2000).
- (4) Yasuhito Ichishima, Yasuhiro Shindo, Kazuo Kato, Akira Takeuchi: A Study of Controlling Ultrasound Irradiation Area and Focal Length by Changing HIFU Transducer, Proceedings of Life Science Conference 2017, pp.1-2, (2017).

3.1.7. 超大規模領域分割計算の高速化手法の統一的構築

(1) 目標・計画

A) 静磁場解析におけるインターフェース問題のBDD前処理の実装

磁場解析の分野ではこれまで約20年近く、東京大学の菊地文雄名誉教授が線形静磁場問題で確立した独創的な混合法的定式化を自然な形で3次元渦電流問題や3次元非線形静磁場問題に独自の工夫を加えて拡張し、ADVENTURE_Magneticを公開してきた。ごく最近部分領域問題を直接法で解くことにより1億実自由度や約5,000万複素自由度の大規模解析を可能にした魅力を次世代計算機で更に活かすためにはもう1桁程度の計算速度の改善が望ましい状況がある(速ければ速いほど、実際の設計に用いる計算モデルを更に詳細化できる)。本研究では、この高速化に対応する研究を行い、もう1桁高速化したソフトウェアを公開していく。ここに述べた手法に基づく磁場解析ソフトウェアは、国産市販ソフトウェアは言うまでもなく国際的に見てもあまり例がない。また現在数百万自由度規模程度で留まっている電磁場解析の規模の拡大にとって現時点ですでにブレークスルーを引き起こした研究になっている。実際、大規模解析では我々の現時点のレベルを目標にする研究チームもいくつか現れているが、本研究では得意とする大規模化に更に高速性を加味することにより、追随者の上を行くPerfect Only Oneを目指す。

B) 熱対流解析コードの機能強化

非圧縮性粘性流解析・熱対流解析の分野では現時点のADVENTURE_sFlowをもとに計算サービスを行っているベンチャー企業も現われている。ADVENTURE_sFlowでは磁場解析や構造解析と同様な手法で計算しているので、高速化の検討を共通の課題として行え、

入力データの共有化がしやすく連成解析が行いやすいという特長がある。低炭素社会向けシミュレーション技術に応用分野を特化し解析機能を限定してでも、この特長を早く引き出したいと考えている。

(2) 意義・国際社会との比較

3次元電磁場の有限要素解析はこれまでやや試行錯誤的に行われており、信頼のおける数値解法が未だ十分確立されていない状況にある。このようななかで、我々は菊地理論をベースに、工学的応用を展開するという形を採っており、国際的に見ても極めてユニークな注目すべき研究を展開している。これまでに開発されてきた文部科学省支援研究による電磁場解析ソフトウェアの骨格を一貫して提供してきたという自負もある。今後の低炭素社会に向けて電気自動車の利用が推進されているが、電磁環境適合性(EMC)のためにも電磁場解析の有用性は増している。非圧縮性粘性流・熱対流や固体力学の大規模解析も統一的な手法で研究を進めているので、それらとの連成解析が有利に行えるという利点も持っている。

(3) 研究内容

A) 静磁場解析におけるインターフェース問題のBDD前処理の実装

3次元磁場の有限要素法による解析、特に3次元渦電流解析(複素自由度4,355万の問題が32台のPCクラスタを用い5時間弱で解けている)並びに1億自由度を最近可能にした3次元非線形静磁場解析に対しては、領域分割法を用いる際の数値計算上の諸問題を以下の更なる高速化に関する課題に焦点を絞って研究する。

「離散化に伴い生じる超大規模(1億自由度以上)の疎な対称連立1次方程式と連立非線形方程式に対する領域分割法を意識した効率的な数値解法を確立し、特にもう1桁の高速化を可能にする前処理方法を確立する。」

B) 熱対流解析コードの機能強化

3次元非圧縮性粘性流解析についてはこれまでの内容を発展させた新アルゴリズムの導入を図る。2006年7月に公開したモジュールADVENTURE_sFlowはその後水素利用社会向けシミュレーション技術でも応用があったので、熱対流解析の基本機能が非定常解析機能も含めて追加され、前処理機能の強化による高速化が実現されたため、実用レベルの有効性をチェックする段階になっている。非定常解析機能ではStokes問題のみならず、Navier-Stokes問題に対しても特性曲線法の活用により対称な連立1次方程式ソルバーを活用できることがポイントになっている。

(4) 平成 29 年度進捗状況

A) 静磁場解析におけるインターフェース問題の BDD 前処理の実装

2014 年度から BDD 前処理の実装実現のために 1 コア処理に限定して三つの課題を設定した。一つはシュアコンプリメント行列 S とベクトル p の積 q を計算する部分を独立して利用可能にすること、二つ目はノイマンノイマン前処理を実装させること、三つ目はコース行列を作成し、それを既存の平行ソルバーで解くことである。この三つが実現できれば、BDD の実装はほとんど実現できると言ってよいほどの重要な 3 項目になる。ノイマンノイマン前処理は 2005 年に一度成功した実績があるが当時の記録が紛失しており、新たな開発を行うことになった。現時点ではコードの骨格はできたが、残念ながら効果が全く出していない。部分領域数が大きくなると手法自体の特徴として効果が出ないのか、何かミスをしているのかを見極める必要がある。予想外に時間がかかったのは最初の $q=Sp$ の計算であり、いくつか試みた結果、2015 年度から 2016 年度にかけて LexADV の TryDDM を適用することにより、ようやく 1 コアの BDD 前処理に見通しをつけることができた。ただし本来の BDD 前処理は内蔵しているノイマンノイマン前処理ともども依然として効果がでておらず、唯一 BDD 前処理を簡易化した BDD-DIAG 前処理のみが収束する。前述のとおり LexADV の TryDDM を適用したので、自由度規模が 100 万以内に抑えられている。この程度の規模では BDD-DIAG 前処理の効果は芳しくなく、ADVENTURE_Magnetic のデフォルト前処理になっている簡易対角スケーリング前処理(diag)の反復回数を減らすことができない状態である。2017 年度も現在に至るまで、いくつかのベンチマーク問題で BDD-DIAG 前処理の効果をいろいろな視点からテストしているが、いずれの場合もほぼ同様な事情になっている。2017 年度は特にマルチコアでの処理を可能とし、シュアコンプリメント行列 S を陽に作成しないアプローチを可能にしつつある。3 番目のコース行列作成部分は当初、既存技術の適用で問題がないと思っていたが、出発点になっている静磁場問題の不定性を反映して、コース問題にも特異性があることが判明し、2016 年度はこのコース問題を反復法で解くことを試みた。ここでも前処理なしの CG 法を利用しているが、相対残差が落ちるまで収束させるより、初めの 10 回で強制的に終了させる CG(10)が ADVENTURE_Solid 等で用いられている不完全分解に対応して有効であることが数値的に確認できた。今後、問題を変更しても 10 回で良いのか等の確認が必要である。また、2017 年度はこのコース問題を直接法の系統で解けないかということも検討した。計算時間の短縮のためにどうしても必要であるからである。

B) 熱対流解析コードの機能強化

このテーマは 2014 年度からの課題として公開用ドキュメントの整備以外に以下の 4 課題

を設定した。すなわち ADVENTURE_sFlow への機能強化として

- ・熱方程式部分への DDM フレームワークの適用
- ・熱流束境界条件入力機能の追加
- ・熱伝達境界条件入力機能の追加
- ・BDD 前処理における通信処理改善の検討

を図るものである。最初の DDM フレームワークの適用は開発ライブラリのプロトタイプ (LexADV の TryDDM) のテストを兼ねたものであり、一応利用可能になった。2 番目、3 番目のテーマは 1 番目のテーマが可能になった時点で、DDM フレームワークでの実現が可能になった。4 番目は派生した問題を解決しながら検討を続けた結果、これも可能になった。以上の成果を踏まえて ADVENTURE_sFlow の Ver.1.0 を公開した。2015 年度は自動販売機内の熱対流計算での実践を通して、Ver.1.0 の信頼性をチェックすると同時に、燃料電池自動車の市場投入に同期させて水素漏洩時の拡散現象を熱対流のアナロジーで解く試みを本格化させる準備を行った。2016 年度は水素漏洩時の拡散現象を中国の中山大学の Yao 准教授の協力で実際に計算することができた。今後の課題は静磁場解析同様、熱解析の部分が LexADV の TryDDM を使っているための 100 万自由度の壁を突破することと ADVENTURE_Thermal を参考にしながらの BDD 前処理を導入することである。これらの課題をクリアしていくことにより、自動販売機の熱対流解析、燃料電池自動車からの水素漏洩時の拡散解析を核にして ADVENTURE_sFlow の産業界での応用を促進していく。2017 年度は全精力をサブテーマ A に注いだため、サブテーマ B の課題は 2018 年度以降に持ち越された。

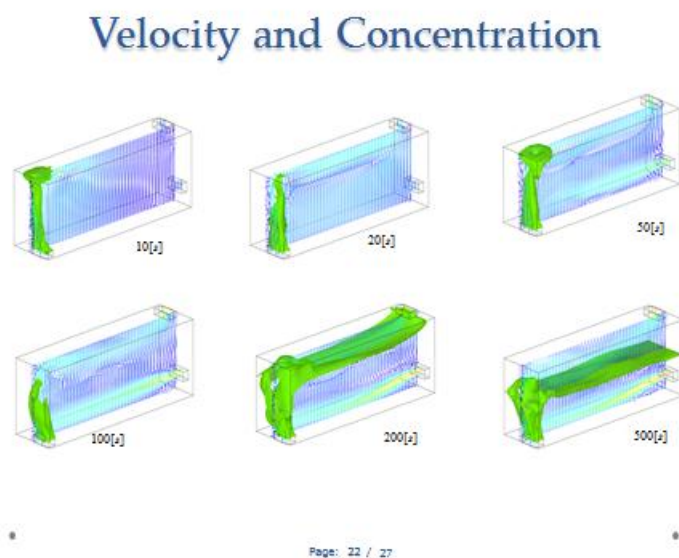


Fig.2 Time Histories of Velocity and Concentration in Hydrogen Dispersion.

(5) まとめ

両テーマとも、2017(平成 29)年度までの成果をブラッシュアップし、更なる展開を図る予定である。

3.1.8. 石灰岩地盤の溶解・生成シミュレーション

(1) 目標・計画

カルスト地形で多く見られる石灰岩地盤の溶解・生成シミュレーションを実施する。石灰岩の溶解現象は、Sinkhole 等の地盤陥没現象をもたらす、我々の生活に直接的な影響を与える。例えば、Sinkhole に関しては、数十メートルを超える大きな地盤陥没が、前兆もなく突然に発生した事例も数多く存在しており、石灰岩溶解プロセスの解明および予測技術の開発は工学上極めて重要な課題となっている。さらに、石灰岩の陥没孔には多くの鍾乳石が存在している。すなわち、石灰岩地盤は溶解と生成を繰り返しながら、新しい地盤環境を作り出しているのである。しかしながら、石灰岩におけるこれらの現象を実験的に観察することは、時間的制約や現象自体の複雑さから極めて困難であり、現地調査などに頼らざるを得ない現状がある。このような現状を考慮すると、石灰岩の溶解・生成現象を解明していくにはシミュレーション技術が有効であると考えられる。

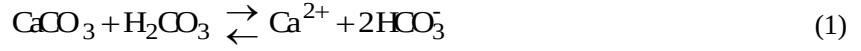
そこで本研究では、石灰岩の溶解・生成過程を移流反応拡散システムにて数値モデル化し、その化学的・物理的・形成プロセスを計算機上で再現することを目指す。前年度までに、地盤の化学的風化現象と地下水流れを考慮したシミュレーション技術を構築した。今年度は、石灰岩の生成シミュレーションを実施し、鍾乳石の生成解析に成功した。

(2) 意義・国際社会との比較

Sinkhole 現象に関しては、アメリカ合衆国やアラブ首長国連邦、大韓民国等の都市部においても多くの被害が確認されており、特に、フロリダ半島においては、半島全体を覆う石灰岩が全体的に溶出した影響で、多数の Sinkhole が発生しており、物理的な被害のみならず人的な被害も発生していることから、緊急な対策が必要とされている。しかしながら、本現象は力学的な理論のみでは解決することが困難な問題であり、また、時間的な制約も重なって、明確な解決の緒は未だ見つかっていない。数値解析的な検討については、石灰岩上部層の力学的挙動に関する若干の先行研究があるものの(これに関してもダルシー則等の単純化されたモデル)、石灰岩における化学反応作用を直接考慮した研究は見当たらない。また、移流反応拡散システムを用いた石灰岩生成シミュレーションに関する研究は報告者の知る限り存在しない。したがって、本研究の国際社会における意義は大きい。

(3) 研究内容

石灰岩の溶解は次式にて表すことができる。



したがって、石灰岩中の地下水流れを加味した反応拡散方程式は次式にて表すことができる。

$$\frac{\partial[A]}{\partial t} = -k_1[A][B] + k_2[C][D]^2 \quad (2)$$

$$\frac{\partial[B]}{\partial t} = -k_1[A][B] + k_2[C][D]^2 + \nabla(D_B \nabla[B]) - \nabla(\mathbf{v}[B]) \quad (3)$$

$$\frac{\partial[C]}{\partial t} = k_1[A][B] - k_2[C][D]^2 + \nabla(D_C \nabla[C]) - \nabla(\mathbf{v}[C]) \quad (4)$$

$$\frac{\partial[D]}{\partial t} = 2(k_1[A][B] - k_2[C][D]^2) + \nabla(D_D \nabla[D]) - \nabla(\mathbf{v}[D]) \quad (5)$$

ここで、A: CaCO_3 , B: H_2CO_3 , C: Ca^{2+} , D: HCO_3^- , k_1 : 反応速度定数（正反応） k_2 : 反応速度定数（逆反応）, t : 時間, $\mathbf{v}$: 地下水流れの流速を意味する。また、 $D_{A \sim D}$ は各物質の拡散係数を意味する。

次に、 $k_1 < k_2$ の時に直方体領域の上部にのみ炭酸カルシウムを敷き詰め、モデル上部から水の流れ（流速：0.0001 m/s）を仮定した場合のシミュレーション例を図-1.1.1-1（拡散係数小： $1.0\text{e-}9$ ）と図-1.1.1-2（拡散係数大： $1.0\text{e-}6$ ）に示す。これらの図より、拡散係数の大小によって生成される鍾乳石の形状が全く異なることが明らかになった。なお、実際の鍾乳石には大小様々な形状が観察される。したがって、今後は地下水流れの速度と拡散係数、反応速度係数のパラメトリック解析が必要である。

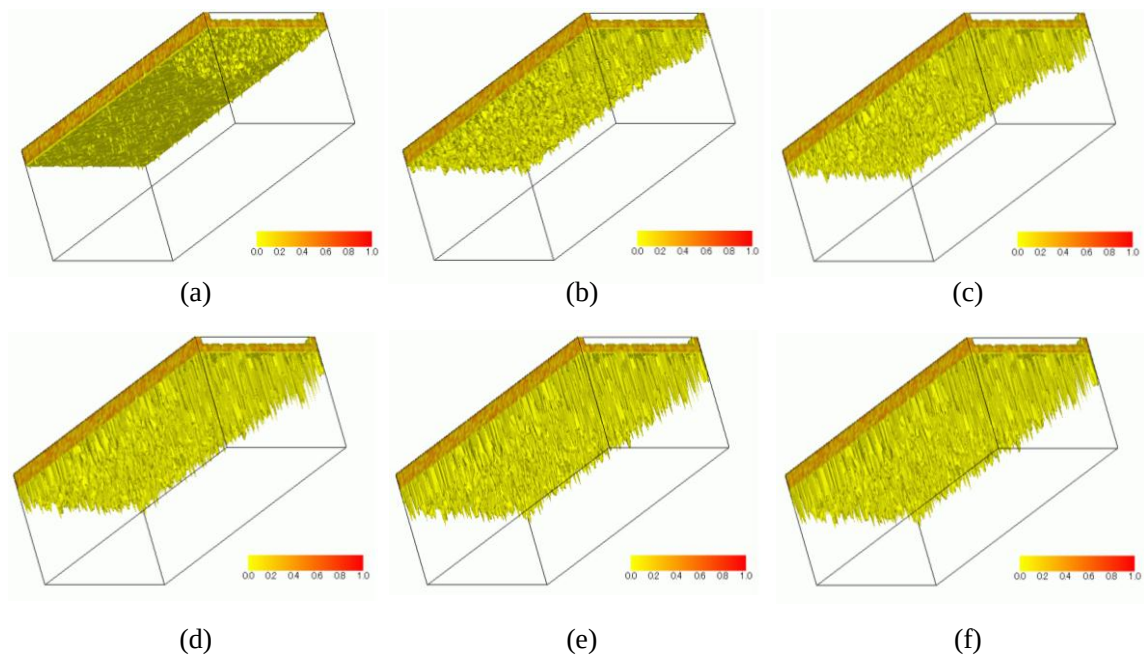


図-1.1.1-1 鍾乳石生成シミュレーション（拡散係数小：1.0e-9）

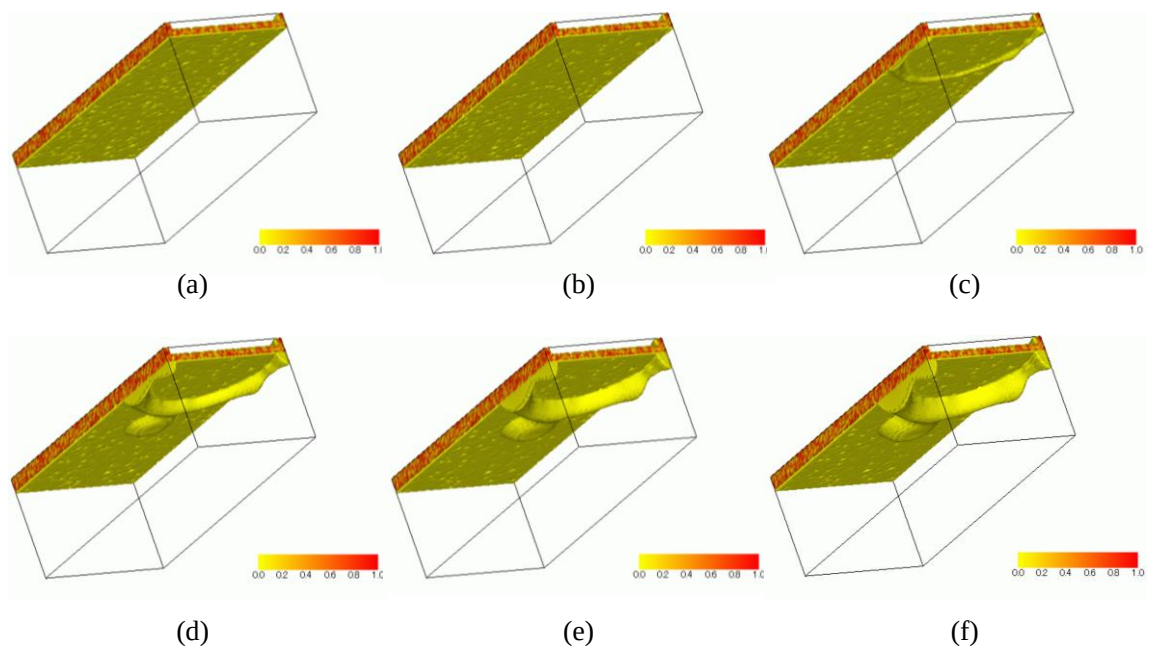


図-1.1.1-2 鍾乳石生成シミュレーション（拡散係数大：1.0e-6）

鍾乳石の生成現象は既存の石灰岩が雨水等の染み込みによって炭酸カルシウムが 3 次元的に形成・進行していく現象であることが知られているが、鍾乳石の 3 次元的な形成過程や岩盤全体の巨視的な動態挙動を数値解析によって示した例はない。現在までに、具体的な化学反応速度定数を用いたシミュレーションを実施するまでには至っていないが、このような問題は

超大規模なシミュレーションが必須となることから、今後は大規模解析へと発展させていくことが望ましい。これについては今後の課題としたい。

(4) 平成 29 年度進捗状況

今年度は、岩内部における移流反応拡散現象に伴う石灰岩生成現象に対して、昨年度に構築した数理モデルを用いたシミュレーションを実施した。その結果、鍾乳石の生成シミュレーションに成功した。したがって、当初の目標は十分に達成したと考えている。

3.1.9. コンクリート構造物の 3 次元塩害劣化予測シミュレーターの開発

(1) 目標・計画

コンクリート構造物は、社会基盤を支え、人々の安全・安心な生活を守る重要な役割を担う。例えば、物、人を陸路で移動するための道路、橋梁、トンネル、空路、航路で移動するための空港、港湾、利水・治水のためのダム、地すべりなどを防ぐ擁壁、津波、高潮を防ぐ防波堤など、その他多くの社会基盤設備としてコンクリート構造物が使用されている。これらコンクリート構造物を健全で長期に供用するためには、コンクリート構造物の経年劣化を予測し、最適かつ効果的な対策を講じる必要がある。本研究開発では、コンクリート構造物の経年劣化のなかで特に問題となっている塩害に着目し、環境作用(ここでは飛来塩分のみ)を考慮した 3 次元塩害劣化予測シミュレーターの開発を目標とする。なお、本研究では、コンクリート橋を対象に検討している。

飛来塩分の 3 次元シミュレーションとしては、すでに Adventure_Fluid とランダムウォーク法(以下、RW 法)による 3 次元飛来塩分シミュレーターの開発が進んでおり、飛来塩分の構造物への付着分布まで解析が可能である。今回の開発では、その付着分布を入力データとした塩分のコンクリート内部への拡散解析まで行うことを計画している。

(2) 意義・国際社会との比較

コンクリート構造物の劣化予測を数値解析的に行っている研究は多くあるが、3 次元かつ飛来塩分を粒子で扱い、それらを風による輸送および構造物への付着分布まで検討した例は少なく、さらに今回の開発では、その付着分布を入力データとした塩分のコンクリート内部への拡散解析まで行うことから、高精度な劣化予測が可能となると考える。また、塩害劣化が問題となっている国は多くあることから、本研究は国際的にも意義のあるものである。

(3) 研究内容

飛来塩分の 3 次元シミュレーションとしては、上記で示したようにすでに開発が進んでおり、Fig.1 に示すようにメゾ塩害環境(飛来塩分の構造物の部材・部位への付着分布)のシミュレーションまで

可能となっている。風速場の計算は, Adventure_Fluid を採用し, 粒子の拡散・付着にはランダムウォーク法(RW 法)を採用している。Fig.1 にあるように本解析結果は, ガーゼ拭き取り法による実橋梁の付着塩分分布を精度良く再現していることがわかる。

ランダムウォーク法による解析結果は, Fig.2 に示すように構造物表面に付着した粒子分布である。コンクリート表面に付着した塩分のコンクリート内部への拡散解析を実施するためには, その粒子の分布を 3 次元塩分濃度拡散解析の境界条件として, 等価節点塩分濃度に変換する必要がある (Fig.3)。本研究開発では, いくつかの手法を検討する予定である (Fig.4)。

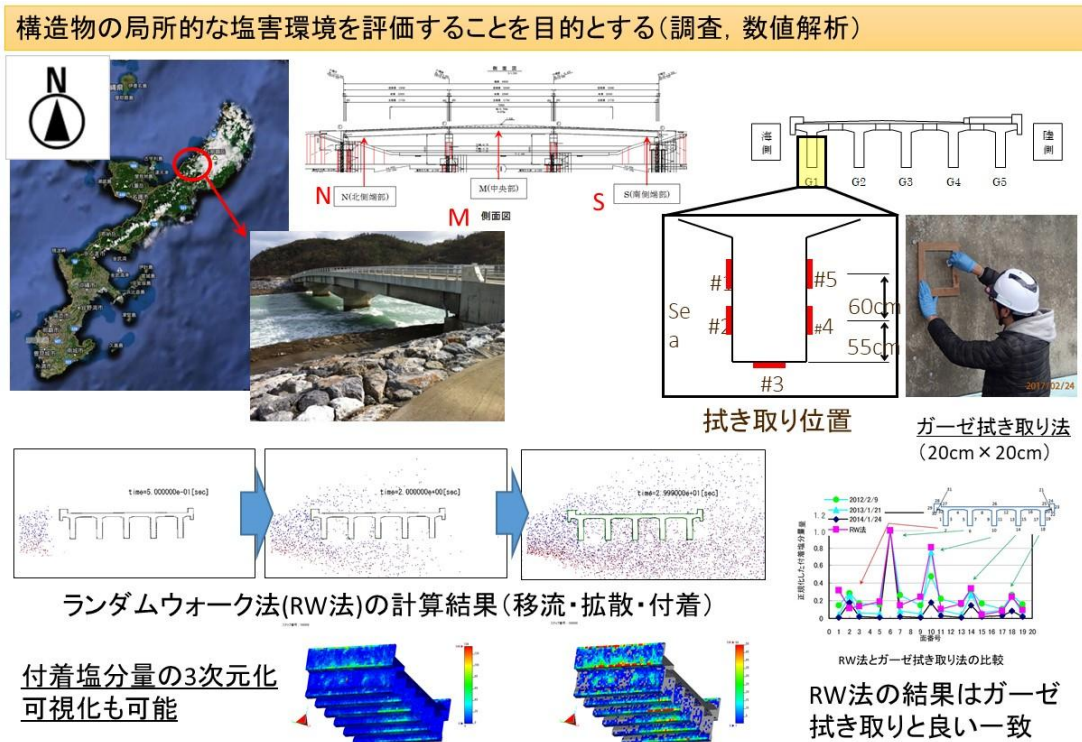


Fig.1 Airborne Chloride simulation for mezzo chloride attack condition

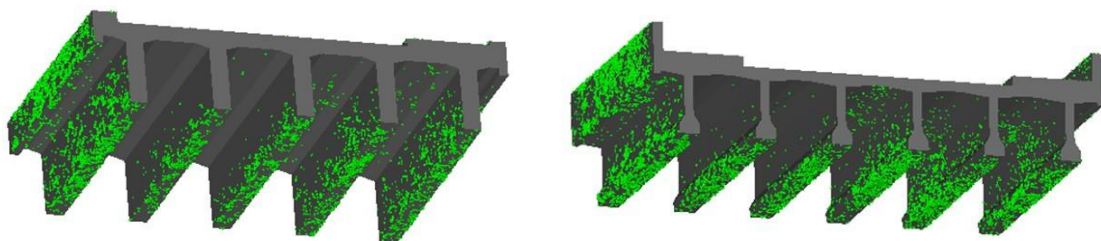


Fig.2 Adhesion chloride particles on surface of structures obtained by RW method

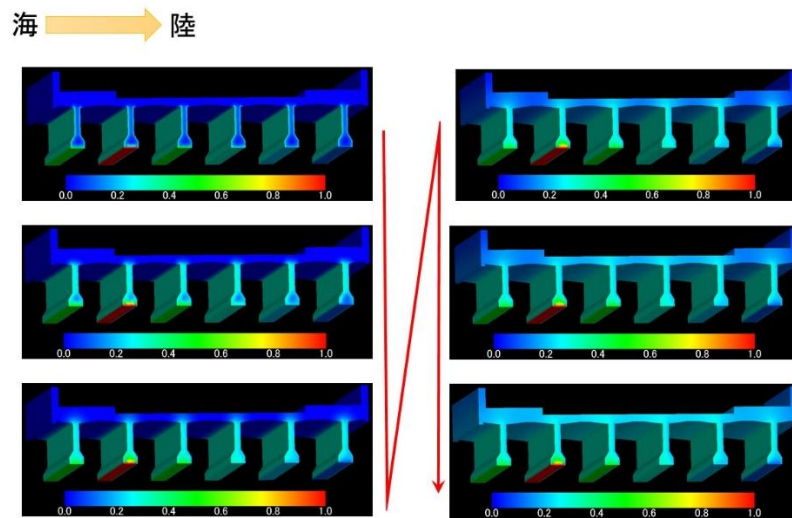


Fig.5 An examples of analytical results

(5) まとめ

本研究開発では、飛来塩分の3次元シミュレーションとしては、すでに Adventure_Fluid とランダムウォーク法(以下、RW法)による3次元飛来塩分シミュレーターの開発が進んでおり、飛来塩分の構造物への付着分布まで解析が可能である。今回の開発では、その付着分布を入力データとした塩分のコンクリート内部への拡散解析まで行うことを計画し、現状では、3次元拡散解析まで可能である。将来的にはコンクリート内部の鉄筋腐食状況・速度まで予測可能な塩害劣化予測シミュレーターの開発を行う予定である。

なお、本研究は、新潟大学佐伯研究室および株式会社インサイトとの共同研究として実施している。

3.1.10. 粒子法による粒子間インタラクションに着目した大規模数値シミュレーション

(1) 目標・計画

粒子法(MPS法)による大規模数値シミュレーションを用いて、物体と流体の相互作用(FSI)の問題を解いている。コップの縁から流れ落ちる液だれの現象について、実験にり液だれの解消の問題について観察を行い、さらに大規模数値シミュレーションによりさまざまな流体・個体の性状を考慮した数値計算を行い、本問題の解決を行う。

(2) 意義・国際社会との比較

食器や調理器具等の製品の注ぎ口は液だれの解消を目的に様々な形状が考えられてきた。やかんやドレッシングの注ぎ口は滑らかなカーブに続き尖った先端をもつことが多い。本研究は、食器関係だけでなく医療や化学、精密機器、土木といった分野で用いられる定量に流体を吐出する用途で使用される器具も対象である。これまでの研究には、ティーポットの口から流れ落ちる流体の観察、容器口の超撥水性コーティングや静電制御による液だれ防止などがある。しかし、これまでに開発された液だれ防止をみこんだ液体吐出口の形状は必ずしも万能ではなく、対象となる液体や容器の材質に応じてその形状は個別に開発する必要がある。

(3) 研究内容

カッシーやウェンゼルによる液体 - 個体面における接触角の理論によると、壁の表面を粗くし接触角を大きくすることで液だれが防げる期待が持てることが分かる。本研究では、容器口の周辺に細かな溝を刻み、表面の細かな凹凸を付けることで液だれが防止できることを確認するために右図のような溝を付けた容器を作成して検証実験を行った。



Fig.1 Channel on edge of cup

容器は、3D プリンタを用いて内径 60mm で 4mm の厚さのコップを 3D プリンタで作成した。コップの材料としてプラスチック素材の PLA 樹脂(ポリ乳酸)を用いた。コップをスタンドに設置し、角度(setting angle)はそれぞれ 0 度、10 度、30 度で検証を行った。スポイトを用いて一定量(3ml/sec)で水道水を注ぎ、4 秒間 12ml 注いだ後に注入をとめた。この実験を真横からハイスピードカメラで 1000 コマ/秒で撮影した。

実験結果については、Fig.2 のように溝を刻まない場合(a)に比べ、溝を外側に刻んだ(b)ことで大きく液だれが解消された。試行回数はそれぞれ 10 回であるが、溝なしでは 10 回とも液だれが発生したが、溝ありでは液だれは 0 回であった。

この実験より、容器の液体吐出部に溝を刻むことによる液だれの低減が期待できることが分かる。

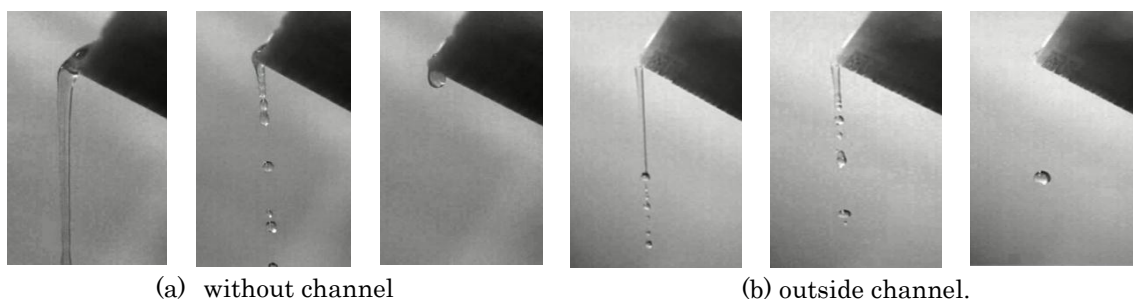


Fig. 2 Adhesion of water drop on rectangular edge without channel (a) and with channel outside(b)

(4) 平成 29 年度進捗状況

現段階では、実験による評価が行われ、液体の粘性や容器との接触角の違いによる検証が必要な段階である。なお、数値計算による液体および個体の性状の違いのシミュレーションを検討している。Fig.3 のように、実験に合わせた容器と水の流れ落ちるモデルを作成し、接触角モデルを導入して、いくつかの接触角による流れの違いを検証してる段階で、詳細な観察はまだこれからである。

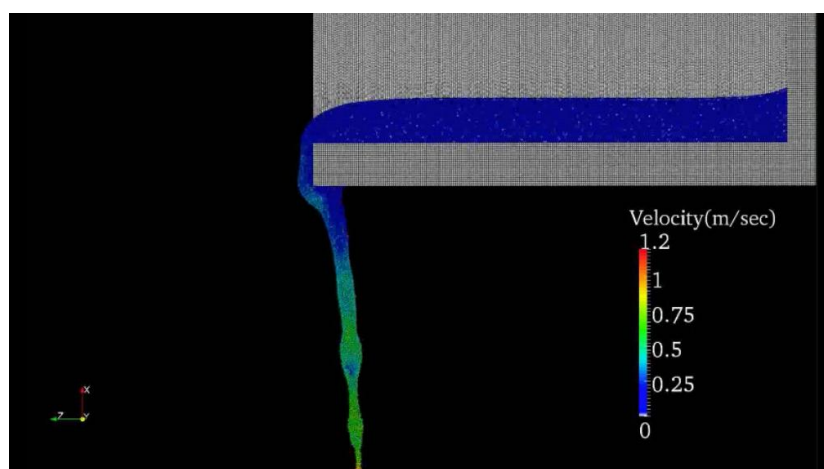


Fig.3 Water drip and adhesion on cup by MPS method (Contact angle = 60.7 degrees)

(5) まとめ

液だれの解消に向けて、実験による観察と粒子法による大規模数値シミュレーションを行っている。現在は数値計算と併用した現象の解明を進めている。

3.1.11. 最適化アルゴリズムに関する研究

(1) 目標・計画

量子コンピュータ上で動作する遺伝的アルゴリズムを開発することを目標として研究を進める。現在、商用化に成功している量子コンピュータ(ASIC)は D-Wave 社の QA[D-Wave]のみである。一方この QA は焼きなまし法(SA)に特化しているため、QA 上で遺伝的アルゴリズム(GA)を動かすには SA と GA の関係を明らかにすることが必要条件である。SA と GA の間には多くの相違点があるため、本研究では証明支援系 Coq を用いることを考えている。

(2) 意義・国際社会との比較

1. 量子コンピュータの商用化

カナダの D-Wave 社が量子焼きなまし法に特化した量子コンピュータ(ASIC)を開発し[大関&西森], 従来の焼きなまし法(SA)と比べて1億倍高速[Denchev et al. 2016]な最適化手法を実現・商用化させたことで、量子コンピュータ関連の研究・開発に注目が集まっている[Wikipedia]。

2. ベイズ法の浸透

新材料の物性値同定[Shimamura et al. 2016]から週間天気予報[気象庁]に至るまで、20世紀末からスタートしたベイズ法のブームは現在も続いている。本研究はベイズ確率・ベイズ決定に依っている。

3. 形式的証明手法の発展

マイクロソフト社の Gonthier が4色定理を証明支援系 Coq 上で証明したこと[Gonthier 2008]を始めとして、ファイト・トンプソン定理の形式的証明[Gonthier et al. 2013], 検証済み C コンパイラ[Leroy 2009]や検証済みオペレーティングシステム[Klein et al. 2009]の完成などにより、形式的証明手法が盛んに用いられている。本研究はその1つである Coq 上で全てを行う。

(3) 研究内容

1. GA と SA の関係を調査するための枠組み

ベイズ法の枠組みの中で GA と SA の関係を Coq で調査するには、事後期待損失やベイズの定理を Coq で表現する必要があり、それには実数体と確率(連続・離散)を操作する必要がある。

2. 実数体に関する形式的証明

公理の実数や構成的実数の Coq ライブラリは複数存在する(cf. [Boldo et al., 2016])が、本研究では Coq のアドオン Mathematical Components[Microsoft-Inria]を証明のプログラミングに用いるため、これに対応した実数体公理系ライブラリ coq-alternate-reals[Strub&Mahboubi]を用いる。

3. 確率に関する形式的証明

Coq で確率を扱うライブラリは[Audebaud&Paulin-Mohring 2009]を先駆として幾つかの既存研究が存在する(cf. [Rand&Zdancewic 2015])。またベイズ法に関しては[Adams&Jacobs 2015]があり、本

研究ではこのアプローチをとる。

4. QA 上の GA

量子モンテカルロ法(QMC)で QA を古典コンピュータ上でエミュレートできることが知られており [Andriyash&Amin 2017], 本研究ではこのアプローチをとる(cf. [Jacobs 2012][Leifer et al. 2013])。

(4) 平成 29 年度進捗状況

進捗は以下の通りである。

- Mathematical Components[Microsoft-Inria]上での実数体の操作に関する調査(cf. [Boldo et al., 2016])
- 確率を操る形式的証明手法の調査(cf. [Audebaud&Paulin-Mohring 2009][Rand&Zdancewic 2015])
- ベイズの定理に関する形式的証明手法[Adams&Jacobs 2015]のライブラリの開発
- Canonical GA[Holland 1975]の Coq 実装

参考文献

[大関&西森]大関 真之 and 西森 秀稔. 量子コンピュータが人工知能を加速する. 日経 BP 社. 2016.

[気象庁]埼玉の週間天気予報. 気象庁. <http://www.jma.go.jp/jp/week/317.html>

[Adams&Jacobs 2015]Adams, Robin, and Bart Jacobs. "A type theory for probabilistic and Bayesian reasoning." arXiv preprint arXiv:1511.09230 (2015).

[Andriyash&Amin 2017]Andriyash, Evgeny, and Mohammad H. Amin. "Can quantum Monte Carlo simulate quantum annealing?." arXiv preprint arXiv:1703.09277 (2017).

[Audebaud&Paulin-Mohring 2009]Audebaud, Philippe, and Christine Paulin-Mohring. "Proofs of randomized algorithms in Coq." Science of Computer Programming 74.8 (2009): 568-589.

[Boldo et al. 2016]Boldo, Sylvie, Catherine Lelay, and Guillaume Melquiond. "Formalization of real analysis: A survey of proof assistants and libraries." Mathematical Structures in Computer Science 26.7 (2016): 1196-1233.

[Denchev et al. 2016]Denchev, Vasil S., et al. "What is the computational value of finite-range tunneling?." Physical Review X 6.3 (2016): 031015.

[D-Wave]D-Wave Systems. Measuring Quantum Physics in a Quantum Annealer. Youtube. 2016. <https://www.youtube.com/watch?v=kq9VqR0ZGNc>

[Gonthier 2008]Gonthier, Georges. "Formal proof—the four-color theorem." Notices of the

AMS 55.11 (2008): 1382-1393.

[Gonthier et al., 2013]Gonthier G, Asperti A, Avigad J, Bertot Y, Cohen C, Garillot F, Le Roux S, Mahboubi A, O'Connor R, Biha SO, Pasca I. A machine-checked proof of the odd order theorem. InInternational Conference on Interactive Theorem Proving 2013 Jul 22 (pp. 163-179). Springer, Berlin, Heidelberg.

[Holland 1975]John H Holland. "Adaptation in natural and artificial systems. An introductory analysis with application to biology, control, and artificial intelligence". In: Ann Arbor, MI: University of Michigan Press (1975).

[Jacobs 2012]Jacobs, B. "New directions in categorical logic, for classical, probabilistic and quantum logic. See arxiv.org/abs/1205.3940, 2012." Logical Methods in Computer Science.

[Jacobs&Zanasi 2016]Jacobs, Bart, and Fabio Zanasi. "A predicate/state transformer semantics for Bayesian learning." Electronic Notes in Theoretical Computer Science 325 (2016): 185-200.

[Klein et al., 2009]Klein G, Elphinstone K, Heiser G, Andronick J, Cock D, Derrin P, Elkaduwe D, Engelhardt K, Kolanski R, Norrish M, Sewell T. seL4: Formal verification of an OS kernel. InProceedings of the ACM SIGOPS 22nd symposium on Operating systems principles 2009 Oct 11 (pp. 207-220). ACM.

[Leifer et al. 2013]Leifer, Matthew S., and Robert W. Spekkens. "Towards a formulation of quantum theory as a causally neutral theory of Bayesian inference." Physical Review A 88.5 (2013): 052130.

[Leroy 2009]Leroy, Xavier. "Formal verification of a realistic compiler." Communications of the ACM 52.7 (2009): 107-115.

[Microsoft-Inria] Microsoft Research-Inria Joint Centre. Mathematical Components. GitHub. <https://github.com/math-comp/math-comp>

[Rand&Zdancewic 2015]Rand, Robert, and Steve Zdancewic. "VPHL: A verified partial-correctness logic for probabilistic programs." Electronic Notes in Theoretical Computer Science 319 (2015): 351-367.

[Shimamura et al. 2016]Shimamura, S., Ezawa, Y., Tamura, Y., Takashimizu, S. and Satou, D., High Accurate Analysis by Experiment and Simulation Using Bayesian Inference for Corrugated Cardboard, Transactions of JSME, Mechanical Engineering Journal, Vol.3, No.4 (2016), DOI: 10.1299/mej.16-00072.

[Strub&Mahboubi]Pierre-Yves Strub and Assia Mahboubi. coq-alternate-reals. GitHub. 2017. <https://github.com/strub/coq-alternate-reals>

[Wikipedia]Wikipedia. Timeline of quantum computing. https://en.wikipedia.org/wiki/Timeline_of_quantum_computing

3.2. AI グループ

計算力学研究センターに本年度より設置された AI グループは、近年流行している深層学習や機械学習を始めとした種々の人工知能関連技術を計算力学分野に応用することを目的としている。

よく知られているように、近年流行している AI 技術は Convolutional Neural Network (CNN) を用いて画像認識を行ったり、Recurrent Neural Network (RNN) または Long-Short Term Memory (LSTM) を用いて音声認識を行ったりと、所謂メディア情報分野に特化して研究開発が先行されている。このような状況に対して、本グループでは従来行われてきた計算力学分野の様々な研究分野に対して AI 技術を融合してより高度なシステムを構築することを目指している。本年度は主に以下の 4 テーマについて研究活動を行った。

1. 人工知能技術を用いた数値解析結果予測の開発
2. Variational Autoencoder を用いた人物動作生成モデルの構築
3. 物性データ・数学的知識交換のためのデータ表現形式の開発
4. 深層学習による計算力学の高度化

これらのうち、1. のテーマは従来負荷の高い数値計算によって得られていた数値流体力学の計算結果を AI 的手法により極めて低コストで求めるというものであり、現時点ではまだまだ精度が不十分であるが、この技術が確立されたら計算力学分野全般に与えるインパクトは絶大なものになると予想される。

3.2.1. 人工知能技術を用いた数値解析結果予測の開発

(1) 目標・計画

本研究では、人工知能分野で注目されている Deep Learning の技術を用いて、数値解析結果を解析なしに予測する技術の開発を目指す。Deep Learning は画像認識や音声認識では既存の認識アーキテクチャの性能を超え、現在では将棋や碁などのゲームでも人間に勝る予測や推論が可能となっている^{[1],[2],[3]}。この技術は主に画像認識で用いられる CNN(Convolutional Neural Network) のブレイクスルーがあったからこそ、非常に強力な推論が可能となっている。また、LSTM(Long Short-Term Memory)^[4] と呼ばれる RNN(Recurrent Neural Network) 時系列データを逐次入力し、ネットワーク内部の記憶とともに未来を学習することで、音声認識の精度を飛躍的に向上させた。数値解析では計算領域を離散的な格子に分割して、静解析でない場合 1 時刻先の解を得る。そのため、数値解析モデルの学習は CNN との相性が非常に良く離散空間を畳み込みより

特徴を抽出し、LSTM を用いれば時系列データを加味した解析結果を予測することが可能であると考えられる。

本年度は数値解析予測のための学習器の作成とその検証を行った。学習は前述の CNN をシーケンシャルに扱えるように拡張した Convolutional LSTM^[4]を構築し、ベンチマーク問題と数値解析結果を学習させた。

(2) 意義・国際社会との比較

人工知能は情報処理分野で自動車の自動運転や、顔認証、音声認証/認識、チャットボットなどに組み込まれることが多い。しかし、計算工学、計算力学の分野ではまだまだ解析等の中に組み込まれていない。これは、計算モデルが確率していて、計算さえできれば解が得られるからである。しかし近年、複雑化した計算モデルでは、1 ケース解くのに数日かかることもしばしばである。そこで、人工知能に初期値を入力して少し待つと解きたかった問題の解が得られれば、解析時間の短縮になったり、想定外の解析も試みたりすることができ、新たな発見や見たい減少をピンポイントで細かく解析するための足がかりにもあると考えられる。

本研究では Convolution LSTM を用いて画像認識技術を用いて数値解析結果の予測を行うという試みは、全く新しいものであり、学術的かつ実用的な側面を兼ね備えており、国際社会においても重要な位置づけとなる研究のひとつであると考ええる。

(3) 研究内容

本研究では、Deep Learning を用いた解析結果予測を最終目標として、ある解析時刻の状態から次の時刻の状態を予測するネットワークを構築する。数値解析では、解析結果は物理量を節点上に持つため、空間的な意味合いが非常に重要である。そのため、従来の LSTM では取り扱えていなかった空間情報を考慮した学習モデルである Convolutional LSTM(ConvLSTM)を用いる。ConvLSTM は動画像から未来の画像を予測するために開発されたネットワークであるが、ここでは空間情報を節点情報とし、物理量は Convolutional 層の入力チャンネルとして対応させることで解析結果の予測を行うことが可能であると考えられる。本研究では、数値解析結果予測のために ConvLSTM を用いることを提案する。今回は解析結果を予測することが可能であるかを検討するため、解析結果を可視化した画像を用いて学習を行う。可視化画像を用いることで解析結果の物理量の一部を表現することができ、コーディングの単純化と学習の高速化が図れる。学習済みモデルを用いて解析結果を予測し、正しい画像と比較し、提案方法の有用性を示す。

時間的な状態情報をもとに未来の状態を推定する方法の一種に LSTM がある。LSTM は従来 1 次元の特徴量情報を再帰的に呼び出し、予測時の入力情報として入力データとマージして扱う。ConvLSTM では 1 次元の特徴量情報を 2 次元の Convolutional 層に拡張し、空間情報として過去の入力情報を記憶することができる。つまり、シーケンシャルに空間情報を追跡することが可能となる。ConvLSTM の各ゲート及び活性化関数を式(1)に示す。

$$\begin{aligned}
i_t &= \sigma(W_{xi} * X_t + W_{hi} * H_{t-1} + W_{ci} \circ C_{t-1} + b_i) \\
f_t &= \sigma(W_{xf} * X_t + W_{hf} * H_{t-1} + W_{cf} \circ C_{t-1} + b_f) \\
C_t &= f_t \circ C_{t-1} + i_t \circ \tanh(W_{xc} * X_t + W_{hc} * H_{t-1} + b_c) \\
o_t &= \sigma(W_{xo} * X_t + W_{ho} * H_{t-1} + W_{co} \circ C_t + b_o) \\
H_t &= o_t \circ \tanh(C_t)
\end{aligned} \tag{1}$$

ここで、 X は入力群、 H は隠れ層状態、 C は cell の出力を表し、 i, f, o はそれぞれ input, forget, output のゲートを表す。これらの変数は 3 次元のテンソルであり、時刻 t と 2 次元の空間情報(row, column)を有する。計算記号である “*” は畳込み積, “ $\circ$ ” はアダマール積を表す。この手法を用いることで、シーケンシャルに解析結果を追跡することができ、数ステップの解析を行うことで、次ステップ以降の解析結果を予測することが可能となる。

深層学習やニューラルネットワークの学習には大量の学習データが必要となる。一般的に ConvLSTM は画像データを入力し、画像データを出力する。本研究で用いる入力データも同様に解析結果を可視化した画像とし、出力データも解析結果を可視化した画像を用いる。この画像データを解析結果の物理量に置き換えることで、解析結果の物理量を予測することが可能であるが、簡単のため、今回は可視化画像データとする。

解析モデルは 2 次元円柱周りの流体解析であり、計算領域を 1250×800 の直交等間隔格子を用いて解析を行った。解析手法は疑似圧縮性法を用い、離散化に 3 次精度風上差分を用いた。解析条件は表 1 に示す。

Table 1 Analysis conditions

Cylinder Diameter	40
Reynolds number	1,000
Courant number	0.25

学習データは解析結果の渦度を可視化した画像データであり、100 ステップ毎に 1 枚の画像を生成し、300 枚の画像を収集した。画像サイズは 512×476 ピクセルで、グレースケールで表現することで、Convolutional 層のチャンネルを 1 としている。画像は円柱と円柱後流の流れ場が捉えられるように 200×100 のサイズでトリミングを行った。本稿では過去 4 フレーム分の入力を与え、1 フレーム後の未来の画像を予測するように学習データを生成した。

本研究であつかうネットワークを以下に示す。画像サイズ(200, 100)と入力チャンネルはグ

レースケール(1)であり、入力ベクトルは(200, 100, 1)となる。本ネットワークは入力層から ConvLSTM を 4 層積層させ、最上層では 3 次元の Convolutional 層を配置した 6 層のネットワークを構築した(Fig.1)。ConvLSTM のカーネルサイズはすべての層で(3×3)とし、3 次元 Convolutional 層の入力は(20, 4, 200, 100)となり、カーネルサイズは(3×3×3)とした。ストライドはすべての層で(1, 1)と(1, 1, 1)とした。損失関数はクロスエントリー、最適化には Adadelta を用い、誤差逆伝搬法に従って学習を行った。

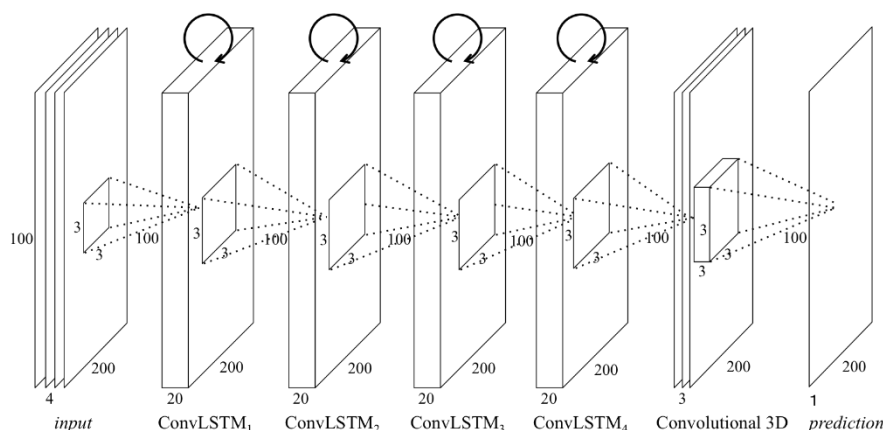


Fig. 1 Convolutional LSTM network structure

学習の入力にはフレーム数 $t=0$ から $t=69$ までの 70 枚の画像データの直近の過去 4 フレームを与え、出力には 1 フレーム後の画像を用いて 10,000 回学習を行った。学習済みモデルを用いて、学習データに用いた画像を入力に与え、予測画像を生成した。生成した画像を Fig.2 に示す。Actual は正しい画像(解析結果の画像)であり、学習時に使用した計算結果である。Known は既知データでの予測を示し、Unknown は未学習データである。それぞれの場合で、正しい画像を入力し続けた予測と、ネットワークが出力した画像を次ステップの入力に与え予測したものが、それぞれ Truth と Pred.である。

予測結果の Truth では学習済み、未学習データで共に良好な結果を得られた。これは未学習データでも学習済みデータ同等の予測が可能であることを示しているが、解析結果の後半はカルマン渦列が放出され、似たような画像が多く生成されるためでもある。また、Pred. では Known, Unknown とともに入力データの半数以上が予測データとなると予測画像のノイズが強くなり、予測をうまく行えていない結果となった。これは予測画像のノイズが蓄積され、予測精度に重大な影響を与えるためである。解決するには、学習時にノイズを含めた画像を与え、よりロバストな学習をさせることで解決できると考えられる。

Convolutional LSTM を用いることで解析結果を予測するうえで重要な、空間情報と時系列情報を同時に扱うことができることが確認できた。

今年度では、画像による定性的評価のみを行ったが、今後は定量的評価として、MSE や SSIM(Structural Similarity Index Measure)を取り入れる。また、解析対象を増やして、学習させたネットワークでの精度検証、物理量での予測等を行っていく。

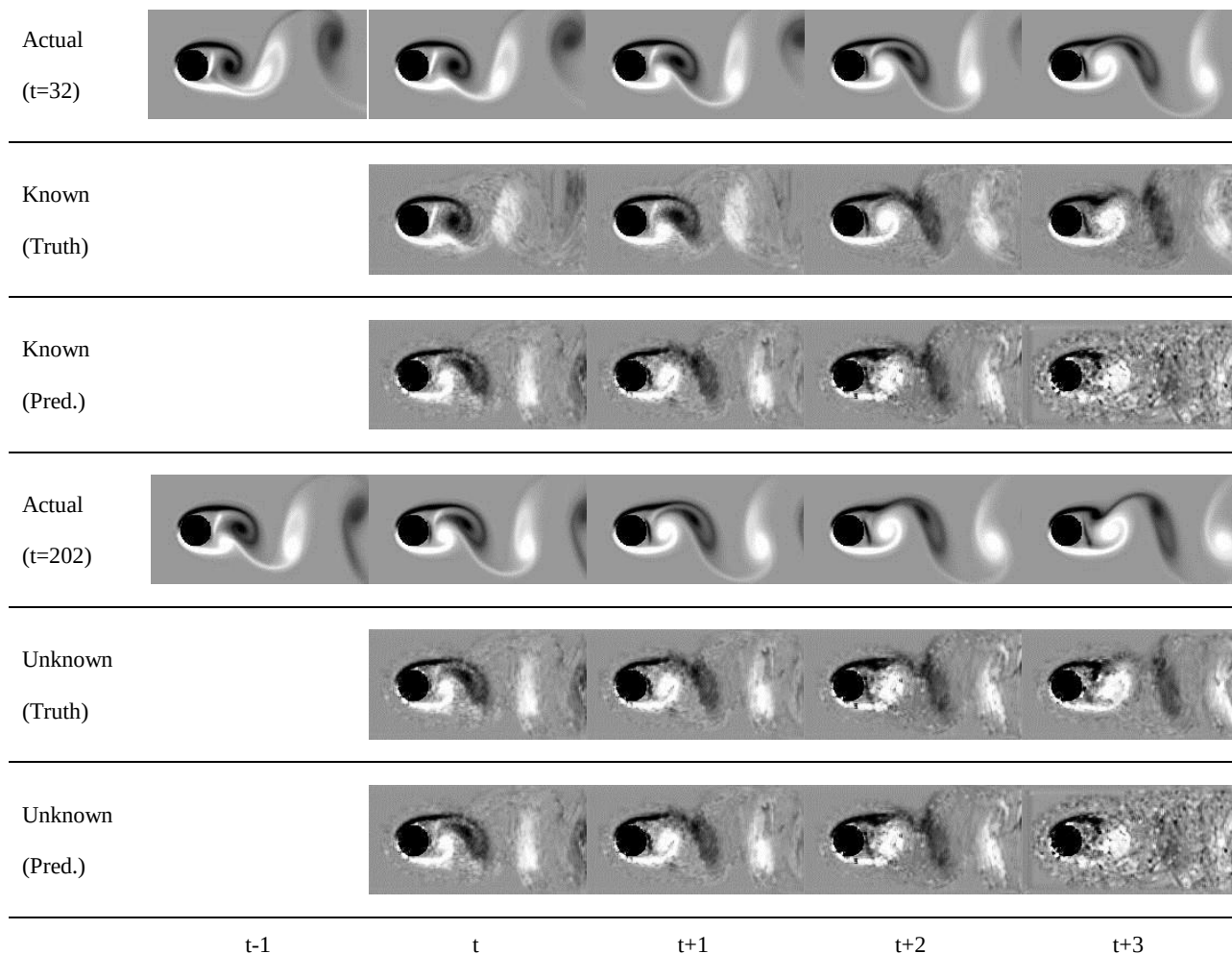


Fig. 2 Prediction of analysis results using Convolutional LSTM (t is a frame number, $t=32, 202$. “Actual” is truth results, “Known” is learned data (used for training), “Unknown” is unlearned data (not used for training), “Truth” is the result predicted using Actual data when predicting, and “Pred.” is the result of using network output for prediction.)

(4) 平成 28 年度進捗状況

Convolutional LSTM を用いて、数値解析結果を予測する方法を提案し、実際の解析結果を用いて検証を行った。精度は定性的評価に留まっているが、予測精度としてはネットワークのチュー

ニングや学習データの補填により十分将来性のある結果が得られたと考えられる。

(5) まとめ

本研究では、数値解析結果の予測を目標として、Convolutional LSTM を用いて予測器を構築し、その検証実験を行った。解析は2次元円柱周りの流れ解析であり、流れ場はカルマン渦列を放出する定常流れである。学習用と予測用に解析結果は渦度を可視化したグレースケール画像を用いた。学習には0~6900 ステップを100 ステップ毎に出力した画像を用いて、過去4ステップを入力に与え、時ステップ目の流れ場を予測した画像を出力する。このとき入力ベクトルに物理量を与えることで、格子上の物理量を予測できるが、今回は簡単のため解析結果の渦度をグレースケール化した画像を用いる。予測結果は学習済み、未学習データ共に同等の結果が得られた。しかし、入力データを時間経過と共に予測画像に更新していくと、予測誤差の影響で次第に予測画像のノイズが増大していくことが確認できた。これは学習データに予めノイズを付加したデータを与えるなどして、緩和できると考えられる。また、ネットワーク構成やハイパーパラメータをチューニングすることでも予測精度向上が可能であると考えられる。

以上より、Convolutional LSTM を用いることで、解析における空間情報と時間情報を加味した予測が可能であり、人工知能技術を用いて数値解析結果予測が可能であることが確認できた。

参考文献

- [1] Alex Krizhevsky, Ilya Sutskever, Geoffrey E. Hinton, “ImageNet Classification with Deep Convolutional Neural Networks”, NIPS2012, 2012.
- [2] Alex Graves, Abdel-rahman Mohamed, Geoffrey Hinton, “Speech recognition with deep recurrent neural networks”, IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing, pp.6645-6649, 2013.
- [3] Silver, David and Schrittwieser, Julian and Simonyan, Karen and Antonoglou, Ioannis and Huang, Aja and Guez, Arthur and Hubert, Thomas and Baker, Lucas and Lai, Matthew and Bolton, Adrian and Chen, Yutian and Lillicrap, Timothy and Hui, Fan and Sifre, Laurent and van den Driessche, George and Graepel, Thore and Hassabis, Demis, “Mastering the game of Go without human knowledge”, Nature, Vol.550, pp. 354–359, 2017.
- [4] Klaus Greff, Rupesh Kumar Srivastava, Jan Koutník, Bas R. Steunebrink, Jürgen Schmidhuber, “LSTM: A Space Odyssey”, arXiv:1503.04069, 2015.
- [5] Xingjian Shi, Zhourong Chen, Hao Wang, Dit-Yan Yeung, Wai-kin Wong,

Wang-chun Woo, “Convolutional LSTM Network: A Machine Learning Approach for Precipitation Nowcasting”, arXiv:1506.04214v2, 2015.

3.2.2. Variational Autoencoder を用いた人物動作生成モデルの構築

(1) 目標・計画

映画やゲームといった 3 次元コンピュータグラフィックスのコンテンツには人型のキャラクタが登場することが多く、キャラクタの動作を生成・制御・編集することは重要なタスクである。本研究の目的は、ニューラルネットワークを使用し、多様で自然な動作を生成することができるモデルを構築することである。

(2) 意義・国際社会との比較

3 次元コンピュータグラフィックスのキャラクタの動作を生成・制御・編集する手法は多数提案されており[1], その中でも、モーションキャプチャシステムで収録した動作データを使用する方法は自然な動作を生成することができるため、よく使用されている。近年、深層ニューラルネットワークを使用し、モーションキャプチャデータから学習することで動作を制御する手法が提案された[2],[3]。一方、深層ニューラルネットワークを用いた生成モデルである variational autoencoder[4],[5]や GAN(Generative Adversarial Networks)[6]が提案され、主に画像を生成する問題に適用されている。本研究では、convolutional autoencoder と variational autoencoder を使用し、モーションキャプチャデータから学習することで、多様で自然な動作を生成することができるモデルを構築する。

(3) 研究内容

本研究で使用したモーションキャプチャデータは CMU Graphics Lab MotionCapture Database[7]である。元データのフレームレートは 120fps であるが、本研究では 30fps にダウンサンプリングしたものを使用した。元データは、Fig.1 に示す 19 関節のローカル座標系における 3 軸方向の回転角度と、ルート関節(Hip)の 3 軸方向の平行移動量として表現されている。本研究では、これらを、ルート関節(Hip)を地面に垂直に投影した点を原点とし、右方向を x 軸、上方向を y 軸、正面方向を z 軸としたローカル座標に変換し、ルート関節(Hip)の y 座標とその他の 18 関節の xyz 座標と xz 平面における速度と y 軸中心の角速度の 58 次元ベクトルを動作データとして使用した。次に、各データを 60 フレーム(2 秒)ずつシフトし、120 フレーム(4 秒)の固定長データに変換し、14,122

個の動作データを得た．最後に，平均ベクトルを引き，標準偏差で割ることで，データの標準化を行った．

本研究では，多様な動作特徴量を抽出するために Fig.2 に示す構造の convolutional autoencoder を使用した． 120×58 次元の動作ベクトルを 15×58 の大きさの32種類のフィルタで畳込み，活性化関数 ReLU をかけ，時間方向に max pooling を行い， 60×32 次元の動作特徴ベクトルを得る．動作ベクトルを $\mathbf{x}$ ，畳込み演算子を $*$ ，map pooling operator を Ψ ，フィルタの重みを $\mathbf{W}$ ，バイアスを $\mathbf{b}$ とすると，convolutional encoder は次のように表される．

$$\Phi(\mathbf{x}) = \Psi(\text{ReLU}(\mathbf{x} * \mathbf{W} + \mathbf{b}))$$

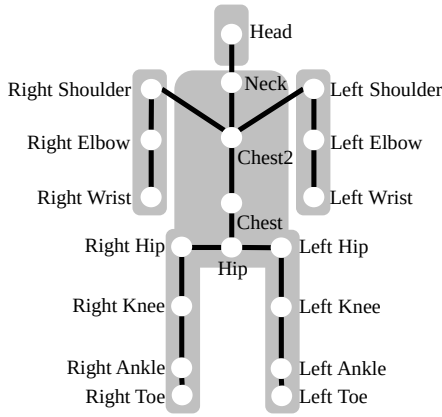


Fig.1 Joint structure in motion data.

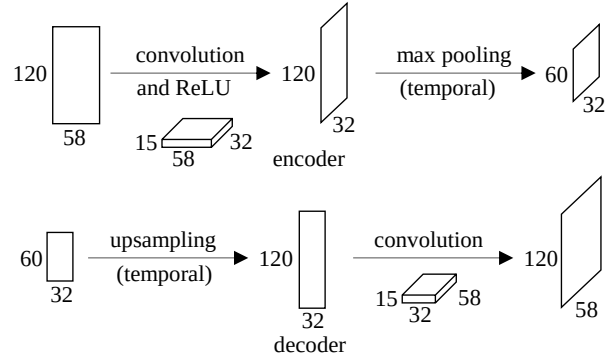


Fig.2 Structure of convolutional autoencoder.

60×32 次元の動作特徴ベクトルを時間方向にアップサンプリングし， 15×32 の大きさの58種類のフィルタで畳込み， 120×58 次元の動作ベクトルを得る．エンコードされた動作ベクトルを $\mathbf{y}$ ，アップサンプリングオペレータを Ψ' ，フィルタの重みを $\mathbf{W}'$ ，バイアスを $\mathbf{b}'$ とすると，convolutional decoder は次のように表される．

$$\Phi'(\mathbf{y}) = \Psi'(\mathbf{y}) * \mathbf{W}' + \mathbf{b}'$$

学習データセットを $X = \mathbf{x}^{(n)} (n = 1, \dots, N)$ とすると，入力ベクトルとパラメータ $\mathbf{W}, \mathbf{b}, \mathbf{W}', \mathbf{b}'$ を持つ convolutional autoencoder の出力ベクトルとの平均 2 乗誤差 $C(X; \mathbf{W}, \mathbf{b}, \mathbf{W}', \mathbf{b}')$ は

$$C(X; \mathbf{W}, \mathbf{b}, \mathbf{W}', \mathbf{b}') = \sum_{n=1}^N \|\mathbf{x}^{(n)} - \Phi'(\Phi(\mathbf{x}^{(n)}))\|^2$$

と表され，これを最小化するネットワークパラメータ $\mathbf{W}, \mathbf{b}, \mathbf{W}', \mathbf{b}'$ を推定する．学習データ数を 12,710，テストデータ数を 1,412 とし，バッチサイズを 100 として確率的勾配降下法を使用して学習を行った．学習のエポック数は 200 とした．

本研究では，動作特徴ベクトルを低次元の潜在空間に確率密度関数として表現するために variational autoencoder を使用した． $\mathbf{y}$ を動作特徴ベクトル， $\mathbf{z}$ を潜在変数ベクトルとする．本研究で

は、確率的 encoder $q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{y})$ と確率的 decoder $p_\theta(\mathbf{y}|\mathbf{z})$ をともに正規分布とし、encoder $q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{y})$ のパラメータ μ_ϕ, σ_ϕ^2 は重み W_ϕ のニューラルネットワークでモデル化し、decoder $p_\theta(\mathbf{y}|\mathbf{z})$ のパラメータ $\mu_\theta, \sigma_\theta^2$ は重み W_θ のニューラルネットワークでモデル化する。encoder と decoder は次のように定式化される。

$$q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{y}) = \mathcal{N}\left(\mathbf{z}|\mu_\phi(\mathbf{y}; W_\phi), \text{diag}\left(\sigma_\phi^2(\mathbf{y}; W_\phi)\right)\right)$$

$$p_\theta(\mathbf{y}|\mathbf{z}) = \mathcal{N}\left(\mathbf{y}|\mu_\theta(\mathbf{z}; W_\theta), \text{diag}\left(\sigma_\theta^2(\mathbf{z}; W_\theta)\right)\right)$$

encoder $q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{y})$ とdecoder $p_\theta(\mathbf{y}|\mathbf{z})$ をモデル化するニューラルネットワークの構造を Fig.3 に示す。

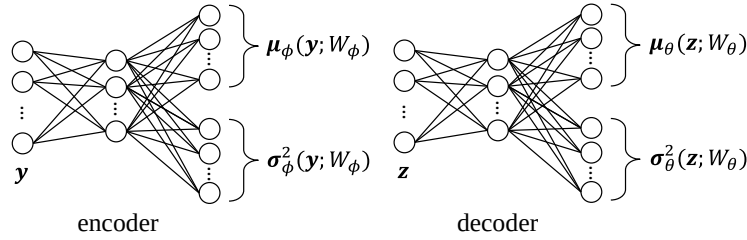


Fig.3 Neural network structure in variational autoencoder.

encoder をモデル化するニューラルネットワークは 1 層の隠れ層を持ち、入力層のユニット数は 1,920 個、隠れ層のユニット数は 256 個、出力層のユニット数は μ_ϕ と σ_ϕ^2 に対するものがそれぞれ 32 個である。各層の各ユニットは後段の層の各ユニットと結合しており、隠れ層の活性化関数は ReLU である。decoder をモデル化するニューラルネットワークは 1 層の隠れ層を持ち、入力層のユニット数は 32 個、隠れ層のユニット数は 256 個、出力層のユニット数は μ_θ と σ_θ^2 に対するものがそれぞれ 1,920 個である。各層の各ユニットは後段の層の各ユニットと結合しており、隠れ層と出力層の活性化関数は ReLU である。

学習データセットを $Y = \mathbf{y}^{(n)} (n = 1, \dots, N)$ とすると、再現誤差 $E(Y; W_\phi, W_\theta)$ は対数尤度を用いて以下のように表される。

$$\begin{aligned} E(Y; W_\phi, W_\theta) &= -\mathbb{E}_{q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{y})}[\log p_\theta(\mathbf{y}|\mathbf{z})] \\ &= -\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log \mathcal{N}\left(\mathbf{y}^{(n)}|\mu_\theta(\mathbf{z}^{(n)}; W_\theta), \text{diag}\left(\sigma_\theta^2(\mathbf{z}^{(n)}; W_\theta)\right)\right). \end{aligned}$$

また、 $q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{y})$ と事前確率 $p(\mathbf{z})$ との KL divergence $D(Y; W_\phi)$ は以下のように表される。

$$D(Y; W_\phi) = \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M \left(1 + \log\left(\left(\sigma_{\phi,m}^{(n)}\right)^2\right) - \left(\mu_{\phi,m}^{(n)}\right)^2 - \left(\sigma_{\phi,m}^{(n)}\right)^2\right),$$

本研究では、損失関数 $C(Y; W_\phi, W_\theta)$ を再現誤差と KL divergence の和とし、

$$C(Y; W_\phi, W_\theta) = E(Y; W_\phi, W_\theta) + D(Y; W_\phi)$$

これを最小化するネットワークパラメータ W_ϕ, W_θ を推定する. 学習データ数を 12,710, テストデータ数を1,412とし, バッチサイズを100として確率的勾配降下法を使用して学習を行った. 学習のエポック数は200とした.

構築した動作生成モデルを評価するための実験を行った. 具体的には, 標準正規分布 $\mathcal{N}(\mathbf{0}, I)$ から潜在変数ベクトル $\tilde{\mathbf{z}}$ をサンプリングし,

$$\tilde{\mathbf{z}} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, I)$$

それを variational decoder でデコードすることで, 動作データ $\tilde{\mathbf{x}}$ を生成する.

$$\tilde{\mathbf{x}} = \Phi'(\mu_\theta(\tilde{\mathbf{z}}; W_\theta); W', \mathbf{b}')$$

Fig.4 に, ランダムにサンプリングした 64 個の潜在変数ベクトルをデコードすることによって生成された動作データを示す. 自然で多様な動作が生成できることが確認できた.

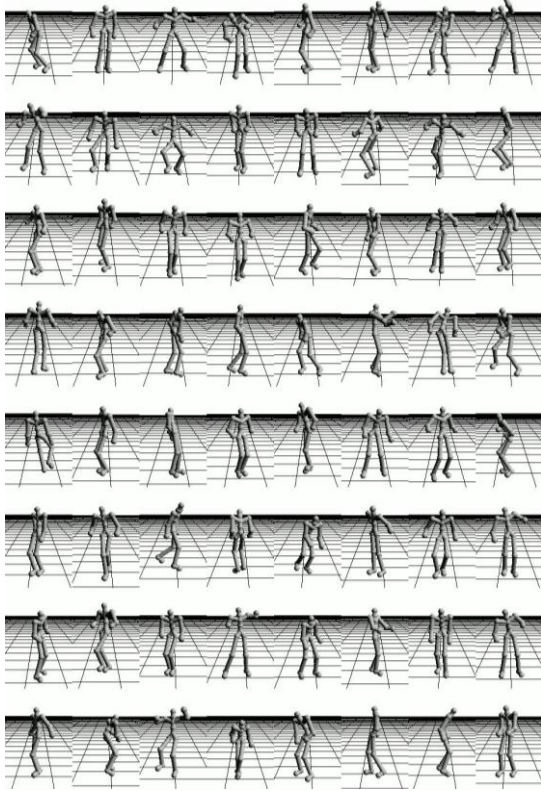


Fig.4 64 randomly generated motions.

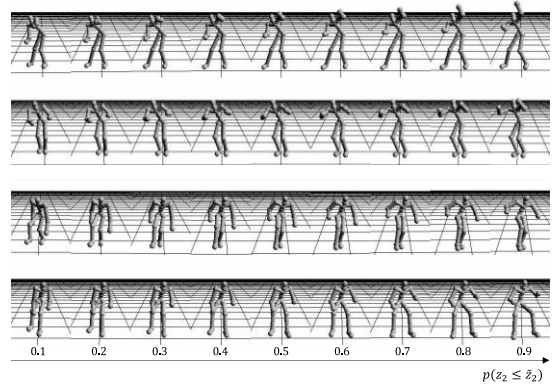


Fig.5 Controlled motions along the 2nd axis.

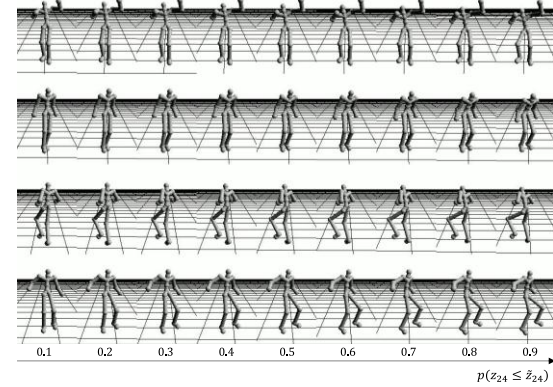


Fig.6 Controlled motions along the 24th axis.

次に, 32 次元の潜在変数ベクトル $\tilde{\mathbf{z}}$ をランダムにサンプリングし, ベクトルの i 番目の要素 $\tilde{z}_i$ を, 累積確率 $p(\mathbf{z}_i \leq \tilde{z}_i)$ が0.1から0.9となるようにステップ幅0.1で変更し, 変更した潜在変数ベクトル $\tilde{\mathbf{z}}$ をデコードすることで, 潜在変数空間の各軸がどのような制御に関係するかを確認した. Fig.5とFig.6に潜在変数ベクトルのある1つの要素(今回構築したモデルでは2番目と24番目の要素)を変更

した結果、得られた動作を示す。それぞれの図の各行には累積確率を9段階で変更した動作が示されている。Fig.5 の各行の動作から、肘や手首の位置が左から右に向かってだんだん高くなっていくことがわかる。Fig.6 の各行の動作から、膝の角度と足のスタンスが左から右に向かってだんだん大きくなることが確認できる。このように、潜在変数空間のいくつかの軸は腕や足の制御に関する特徴があることがわかった。

(4) 平成 28 年度進捗状況

Variational Autoencoderを使用してモーションキャプチャデータセットから学習を行い、32次元の潜在変数空間からサンプリングを行うことで動作を生成可能なシステムを構築した。実験の結果、多様で自然な動作が生成できることが確認できた。

(5) まとめ

本研究では、3次元コンピュータグラフィックスのキャラクタの動作生成を目的とし、Convolutional Autoencoderによりモーションキャプチャデータセットから動作特徴を学習し、Variational Autoencoderを用いて低次元の潜在変数空間に確率密度関数として動作特徴を表現することができるモデルを構築した。実験の結果、32次元の潜在変数空間からサンプリングを行うことで多様で自然な動作が生成できることを示した。

参考文献

- [1] X. Wang, Q. Chen, and W. Wang, “3D Human Motion Editing and Synthesis: A Survey,” Computational and Mathematical Methods in Medicine, 2014.
- [2] D. Holden, J. Saito, T. Komura, and T. Joyce, “Learning Motion Manifolds with Convolutional Autoencoders,” SIGGRAPH Asia 2015 Technical Briefs, SA'15, 18:1-18:4, 2015.
- [3] D. Holden, J. Saito, and T. Komura, “A Deep Learning Framework for Character Motion Synthesis and Editing,” ACM Trans. Graph., vol.35, no.4, 138:1-138:11, 2016.
- [4] D. P. Kingma and M. Welling, “Auto-Encoding Variational Bayes,” International Conference on Learning Representations 2013, 2013.
- [5] D. P. Kingma, D. J. Rezende, S. Mohamed, and M. Welling, “Semi-Supervised Learning with Deep Generative Models,” Proceedings of Neural Information Processing Systems 2014, 2014.
- [6] A. Radford, L. Metz, and S. Chintala, “Unsupervised Representation Learning with Deep Convolutional Generative Adversarial Networks,” International Conference on Learning Representations 2016, 2016.
- [7] CMU. Carnegie Mellon University - CMU Graphics Lab - motion capture library. <http://mocap.cs.cmu.edu>.

3.2.3. 物性データ・数学的知識交換のためのデータ表現形式の開発

(1) 目標・計画

近年各国において、物質・材料設計、また開発された材料の実用化に必要とされるリードタイムを短縮するためにデータ、異なったスケールのシミュレーション、過去の経験式などを総合的に活用しようという研究開発が活発化している。我が国では 2014 年度から内閣府戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)において、革新的構造材料プロジェクトが採択され、マテリアルズ・インテグレーション(MI)の分担者として複数の情報資源を連携させるためのデータ表現の開発、これに基づいたプロトタイプシステムの開発を進めている。MI プロジェクトは 2018 年度まで継続され、この間に Python を用いたデータ統合システムのプロトタイプとサンプルとなるデータベース、知識ベースを開発する。

(2) 意義・国際社会との比較

米国では 2011 年に材料開発に計算機シミュレーション、データを活用しようという研究を統合する形でマテリアルズ・ゲノム・イニシアティブ(MGI)が国策として推進されるようになった。これにより我が国でも材料のデータ・シミュレーションが注目され、2014 年には内閣府戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)では、テーマの一つである革新的構造材料分野が取り上げられた。物質・材料研究機構では測定装置などのデータを直接データベース化するなどデータプラットフォーム開発の取り組みが開始され、複雑な構造を持ち、動的に変化する材料のデータをどのように格納・管理するかについてが大きな課題となっている。

EU においては、EMMC(European Materials Modeling Council)が継続的に活動を行っており、材料のモデルに関するオントロロジーの設計などが進んでいる。中国では、やはり MGI の影響を受けた China MGI の活動が始まり、北京科学技術大学、上海大学に設置された MGI Institute などにおいて材料研究者、情報科学研究者などが連携して活発な活動を進めている。我が国においては芦野が 2006 年度に NEDO 知的基盤創成・利用促進基盤事業の採択を得て材料のオントロロジーを開発し、これを用いた材料情報の統合化プラットフォームの試作を行い、現在では海外の研究者からも先行した取り組みと認められているが、国内では大きく取り上げられることがなく、標準化の取り組みなどに関して遅れを取る結果となっている。

(3) 研究内容

セマンティック・ウェブの一連の規格である RDF (Resource Description Framework), OWL (Web Ontology Language), RIF (Rule Interchange Format), および数式の意味内容を記述する OpenMath など XML を用いた記法を用いて既にある程度知見の整備されている機械試験, クリープなどを例題として関連した経験式・推論規則・データを記述してリンクし, 検索言語 SPARQL (SPARQL Protocol and RDF Query Language)を用いて検索する.

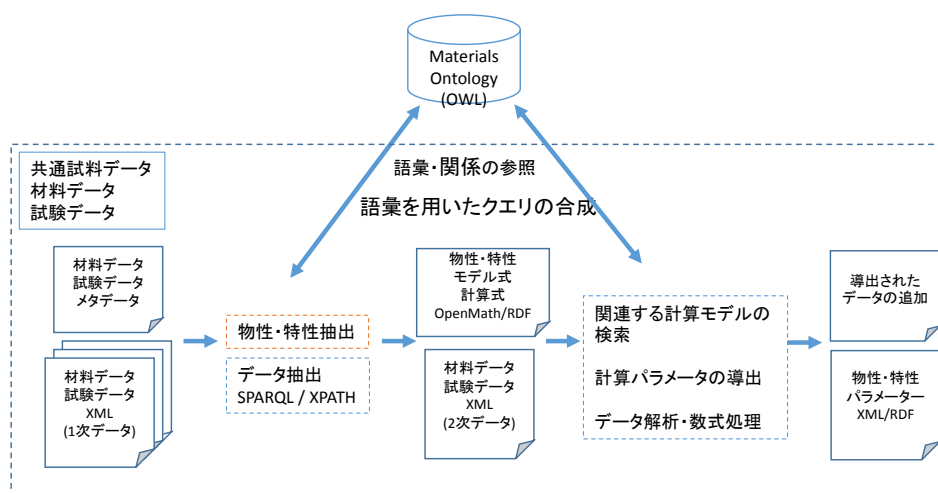


Figure 1. Application of the Semantic Web Framework for Materials Integration

これらの機能をスクリプト言語のプログラミング環境である Python を用いて呼び出すことを可能にすることで, 材料に関わるデータ・知識統合のためのプラットフォームのプロトタイプとする.

(4) 平成 28 年度進捗状況

プロトタイプの構築にはオープンソースの数式処理環境である SageMath を用いた. SageMath では Python インタプリタに多くの数式処理システムを組み込んでおり, SPARQL の呼び出し, XML データの処理, 可視化, OpenMath の解析など Python で開発されている多くのモジュールも利用が可能である.

本年度はこの環境を整備し, SIP 標準資料の機械試験データベースを SPARQL を用いて検索, 得られた XML のデータを処理し, OpenMath を用いて記述した構成方程式に最小二乗法を適用してパラメータをフィッティング, 可視化するとともに得られたパラメータセ

ットを SPARQL データベースに関連するメタデータとともに追加する作業を Python のスクリプトを用いて記述することを試みた。(Figure. 2)

環境を対話的プログラミング環境である Jupyter Notebook を用いて実行，ワークフローを研究者間で共有するデータ処理環境を構築できることを確認した。また，データベース・数式ライブラリなどに用いる語彙は共通のオントロジーから選択しているが，推論エンジンを用いて語彙を確認するといった処理は実現できておらず，最終年度の課題とした。



Figure 2. Materials data analysis workflow written in Python.

(5) まとめ

今年度は、昨年度までに開発したデータベースと数式のライブラリをサンプルとして Python プログラミング環境を用いて利用する対話的なデータ処理環境のプロトタイプを構築し，材料の性能の解析に用いられるデータ処理作業を自動化するためのワークフローの事例を Python スクリプトとして記述した。これらの結果は物質・材料研究機構の実施しているシステム開発に対して適時フィードバックを行っている。

3.2.4. 深層学習による計算力学の高度化

(1) 目標・計画

本研究では，計算力学のコア部分へ機械学習，特に深層学習 (Deep Learning) を導入し，従来の技術を凌駕する高速化・高精度化を達成する新しい手法の開発を目的としている。

これまで、計算力学における中心課題は微分方程式の数値解法であった。有限要素法(FEM)など計算力学の基盤を成す解法は、現象を数学的に表現する微分方程式に対して、解析対象を空間的に細分割する格子あるいは要素に基づいて離散化してできる連立一次方程式を解くという数値解法である。これらの解法は、格子あるいは要素の細かさが解の精度、すなわち解の正しさに直結するため、これまでの計算力学では、多くの研究リソースが、より大規模な連立方程式をより速く解くことに費やされてきた。

計算力学において大規模化・高速化を支えてきた計算機の驚異的な性能向上は、機械学習の進展をもたらした。ネットワーキング技術の進歩、IoT(Internet of Things)技術の広まりも、これまで考えられなかった規模の大量のデータが容易に収集できることになり、機械学習の重要性を増すこととなった。深層学習も、こうした大量データの分析処理の強力な手法として注目され、様々な分野に応用されつつある。

本研究は、従来の手法を根源から見直し深層学習の観点から再構築することにより、全く新しい数値解析手法を開発することを目指す。

今年度は、深層学習を用いた要素積分の高速化・高精度化手法を開発し、その結果について報告する。

(2) 意義・国際社会との比較

深層学習の基幹技術であるニューラルネットワークは、これまで計算力学の様々な分野に適用されてきた。関数近似能力を有する階層型ニューラルネットワークは、材料構成則の推定、非破壊評価、構造最適化など多様な用途に適用されているが、用いられている階層型ニューラルネットワークの規模、ニューラルネットワークの学習に使用するデータ数、学習回数はいずれも小規模である。これは、対象とする問題がそもそも比較的容易に近似可能である、あるいは問題の範囲を絞り込むことで容易に近似可能な問題に変換していることを意味する。こうした問題簡略化の動機は、階層型ニューラルネットワークの学習に必要な計算量の多さ、大量の学習データに対する学習の収束性の悪化であった。しかしながら、計算機の性能は着実に向上し、深層学習による研究の活発化により階層型ニューラルネットワークの学習に関するアルゴリズム、学習に用いるハードウェアの性能は急速に向上している。これにより、これまでは適用が不可能であったような対象についても適用が可能になりつつある。

本研究は、計算力学のコアとなる有限要素法など数値計算手法そのものへ深層学習を適用するものである。こうした階層型ニューラルネットワークの適用例は非常に少なく、本研究はユニークなものである。本研究は、深層学習を計算力学に適用する際のフレームワークを定義するとともに、今年度は、これまでに適用が試みられていない要素積分への深層学習の適用例を示す。要素積

分は、有限要素法のみならず、アイソジオメトリック解析やメッシュフリー法の領域積分にも適用され、その高速化・高精度化は実用的な価値が大きいものである。

(3) 研究内容

要素積分は有限要素法において重要な過程であり計算量も多い。このため、要素積分を高速化するために数々の研究が行われている。例えば、より簡潔な数値積分式による高速化、sum-factorization による高速化、GPU やマルチコアプロセッサによる高速化、さらには、群論に基づく数値積分法も提案されている。有限要素解析における要素積分では、2次元における正方形形状、3次元における立方体形状の要素においては少ない積分点数で高精度な積分値が得られるのに対し、要素形状が歪むと精度が低下し、精度を維持するためには積分点の個数を増やす必要のあることが知られている。本研究では、FEM、アイソジオメトリック解析、さらには Element-free Galerkin 法、Free Mesh 法など様々なメッシュフリー法における数値積分にも適用可能な、深層学習を用いた最適化数値積分法を提案する。

(3.1) 数値積分法

有限要素法における要素積分には数値積分法が用いられる。数値積分法では、積分点と呼ばれる複数の点(座標)における関数値と各積分点に対応する重みの積和で積分値を近似する。代表的な Gauss-Legendre 数値積分法では、関数 $f(x)$ の $[-1, 1]$ における積分は次式で表される。

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n f(x_i) \cdot H_i \quad (1)$$

ここで、 x_i は積分点座標、 H_i は積分点 x_i における重み、 n は積分点数である。Gauss-Legendre 積分の積分点座標および重みは Legendre 多項式と Lagrange 多項式を用いて定義される。 n 次 Legendre 多項式 P_n は、

$$P_n(x) = \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (2)$$

で定義され、

$$P_n(x) = 0 \quad (3)$$

は $(-1.0, 1.0)$ の範囲に n 個の異なる実数解をもち、その n 個の解 $\{x_1, x_2, x_3, \dots, x_{n-1}, x_n\}$ ($x_i < x_{i+1}$) が積分点座標となる。積分点の重みは、この n 個の解から構成される n 個の $n-1$ 次 Lagrange 多項式 $L_i^{n-1}(x)$,

$$L_i^{n-1}(x) = \frac{(x - x_1) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)} \quad (4)$$

を用いて次式で与えられる。

$$H_i = \int_{-1}^1 L_i^{n-1}(x) dx \quad (5)$$

n 個の積分点を用いた Gauss-Legendre 積分は、被積分関数を $2n-1$ 次多項式で近似し、その近似多項式の積分値を被積分関数の積分値の近似値とすることに相当する。2次元および3次元における Gauss-Legendre 数値積分法は、上記の 1次元における Gauss-Legendre 積分の自然な拡張として下記のように定義される。ここで、 n, m, l は各軸方向の積分点数である。

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(x, y) dx dy \approx \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m f(x_i, y_j) \cdot H_{ij} \quad (6)$$

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f(x, y, z) dx dy dz \approx \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^l f(x_i, y_j, z_k) \cdot H_{ijk} \quad (7)$$

(3.2) 要素積分

構造物の静的問題におけるつりあい方程式を空間離散化すると次式が得られる。

$$[K]\{u\} = \{f\} \quad (8)$$

ここで、 $\{u\}$ は変位ベクトルであり、 $[K]$ は(全体)剛性マトリックス、 $\{f\}$ は荷重ベクトルである。全体剛性マトリックスは、要素剛性マトリックスを重ね合わせて構築される。すなわち、

$$[K] = \sum_{e=1}^n [k^e] \quad (9)$$

ここで,

$$[k^e] = \int_{V^e} [B]^T [D][B] dv \quad (10)$$

であり, $[N]$, $[B]$ はそれぞれ次式で与えられる形状関数マトリックス, ひずみ - 変位マトリックスである.

$$[N] = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & & N_n & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & \dots & 0 & N_n & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & & 0 & 0 & N_n \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$[B] = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} [N] \quad (12)$$

ただし, $N_i = N_i(\xi, \eta, \gamma)$ は形状関数であり, n は 1 要素あたりの節点数である. $[D]$ は応力 - ひずみマトリックスであり, 弾性体の場合, ヤング率 E とポアソン比 ν で表される.

実空間 (xyz 空間) における式(10)の積分は通常, パラメータ空間 ($\xi\eta\zeta$ 空間) に写像した上で Gauss-Legendre 積分により数値的に積分される. 有限要素解析におけるアイソパラメトリック要素やアイソジオメトリック解析のように変位など物理量の基底関数と形状表現の基底関数が同じである場合, 式(10)の積分は次式のようになる.

$$[k^e] = \int_{V^e} [B]^T [D][B] dx dy dz = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 [B]^T [D][B] \cdot |J| \cdot d\xi d\eta d\zeta \quad (13)$$

ここで, $|J|$ は下記の Jacobi 行列の行列式(ヤコビアン)であり,

$$[J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \quad (14)$$

基底関数の xyz に関する微分値も, $\xi\eta\zeta$ に関する微分値と Jacobi 行列により次式で表される.

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix} = [J]^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix} \quad (15)$$

以上により, Gauss-Legendre 積分による要素積分は次式で表される.

$$[k^e] \approx \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^l \left([B]^T [D][B] \cdot |J| \right) \Big|_{\substack{\xi=\xi_i \\ \eta=\eta_j \\ \zeta=\zeta_k}} \cdot H_{i,j,k} \quad (16)$$

ここで n, m, l は各軸方向の積分点数であり,

$$H_{i,j,k} = H_i \cdot H_j \cdot H_k \quad (17)$$

は各軸方向の重みの積である. 積分点における被積分関数値とその積分点に対応する重み係数値との積の総和で積分を近似する. このため, 計算する積分点の個数に比例した計算量が必要となる.

有限要素解析における代表的な要素として, 2つの6面体アイソパラメトリック要素(6面体8節点1次要素, 20節点2次要素)を考える. 1次要素の基底関数は,

$$N_i(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{8}(1 + \xi_i \xi)(1 + \eta_i \eta)(1 + \zeta_i \zeta) \quad (18)$$

2次要素の基底関数は,

$$N_i(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{8}(1 + \xi_i \xi)(1 + \eta_i \eta)(1 + \zeta_i \zeta)(\xi_i \xi + \eta_i \eta + \zeta_i \zeta - 2) \quad i = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 \quad (19)$$

$$N_i(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4}(1 - \xi^2)(1 + \eta \eta)(1 + \zeta_i \zeta) \quad i = 9, 11, 17, 19 \quad (20)$$

$$N_i(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4}(1 + \xi_i \xi)(1 - \eta^2)(1 + \zeta_i \zeta) \quad i = 10, 12, 18, 20 \quad (21)$$

$$N_i(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{4}(1 + \xi \xi)(1 + \eta \eta)(1 - \zeta^2) \quad i = 13, 14, 15, 16 \quad (22)$$

である。ここで (ξ_i, η_i, ζ_i) は Fig. 1 における i 番目の節点の座標である。有限要素解析においては、各要素に同一の基底関数が用いられるため、単一材料を仮定すれば、要素積分の被積分関数は当該要素を構成する節点の座標のみで決定される。

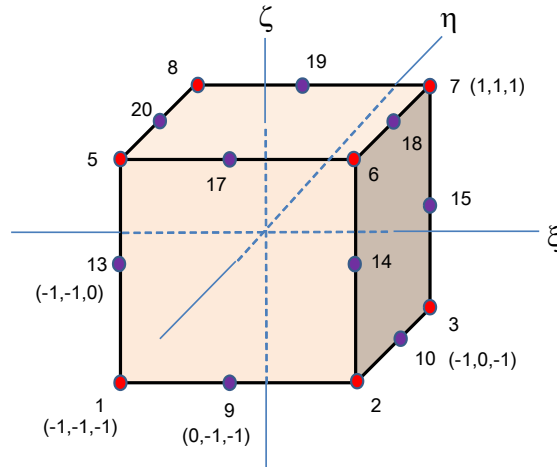


Fig. 1 3D Solid Element

式(13)による要素行列は、6面体1次要素では24行24列、6面体2次要素では60行60列となる。要素行列は多数の成分を含むため、要素積分の精度を議論する場合にはその精度に関する指標を導入する必要がある。簡単な積分であれば解析的に真の積分値が求められ、真の積分値との差を指標とすることができるが、様々な形状の要素について真の積分値を得ることは困難で

あるため、本研究では Gauss-Legendre 積分法により十分多くの積分点数を用いて算出した積分値を真値として用いる。本研究では、積分精度の相互比較のため、積分精度に関する単一の指標として下記の誤差(Error)を定義して用いた。

$$Error = \frac{\sum_{i,j} |k_{i,j}^q - k_{i,j}^{q_{\max}}|}{\max_{i,j} |k_{i,j}^{q_{\max}}|} \quad (23)$$

ここで、 $k_{i,j}^q$ は 1 軸方向積分点数 q で算出した要素行列の i 行 j 列の成分、 $q_{\max}$ は 1 軸方向あたり積分点数最大値であり、この積分点数で積分して得られた値を真値と見なしている。本研究では $q_{\max}$ を 30 (1軸あたり) とした。真値とみなす要素積分の 1 要素当りの総積分点数は 1 次元要素では 30, 2 次元要素では 900, 3 次元要素では 27,000 となる。

有限要素解析における要素積分の例を示す。Fig. 2(a) は立方体形状の 8 節点 1 次要素, Fig. 2(b) はその内の 1 辺の長さを 2 倍に (隣接する 2 辺は $\sqrt{2}$ 倍に) 伸ばした要素を示している。さらに各辺の midpoint に節点を追加し 20 節点 2 次要素も作成し、これらの要素について Gauss-Legendre 積分により要素積分を行った時の収束性を Fig. 3 に示した。横軸は 1 軸あたりの積分点数 (各軸方向の積分点数は同一), 縦軸は式 (4-24) で定義した誤差である。Fig. 3 において 1st-Regular, 2nd-Regular はそれぞれ Fig. 2(a) の 1 次, 2 次要素, 1st-Irregular, 2nd-Irregular はそれぞれ Fig. 2(b) の 1 次, 2 次要素の結果である。形状が正確な立方体である場合は次数によらず非常に収束が速い (すなわち少ない積分点数で正確に積分できる) が、節点の座標が変わり形状が歪むと収束が遅くなる (一定の精度を得るためにより多くの積分点を必要とする) ことがわかる。

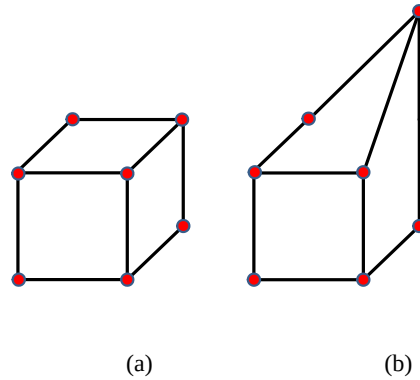


Fig. 2 Tested Elements

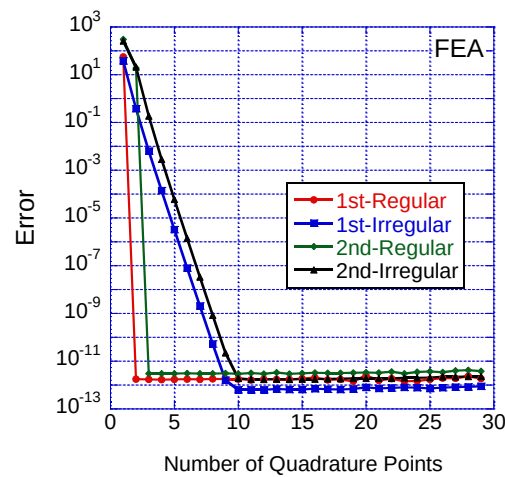


Fig. 3 Convergence of Element Stiffness Matrices (FEA)

(3.3) 要素積分への深層学習の適用

有限要素解析における要素積分は非常に限定された被積分関数の積分関数に関するものであり, 限られた既知の要素パラメータにより特定することが可能である. したがって, これらの要素パラメータに基づいて, 各要素ごとに最適な数値積分パラメータ(数値積分の積分点座標, 重み)を決定できる, あるいは, 同定した被積分関数の性質から予測される数値積分の収束性に基づいて最適な積分点数を決定できる. 本研究では, 要素パラメータに基づき深層学習により Gauss-Legendre 数値積分の最適積分点数(決められた精度を達成するために必要な最低限の積分点数)を求める手法を導入する.

最適な積分点数を求める手法は以下のとおりである. 要素を決定するパラメータ群(節点座標な

ど)を $\{e-parameters\}$ と表記する.

- (1) 多数の要素について, 1軸当り1個から $q_{\max}$ 個の積分点数を用いて要素行列を計算し, 式(23)により各積分点数における誤差を算出する. あらかじめ設定した誤差を下回る誤差で計算できた最も小さい積分点数 $\{n_{opt}, m_{opt}, l_{opt}\}$ を求める. これにより多数のデータ対 ($\{e-parameters\}$, $\{n_{opt}, m_{opt}, l_{opt}\}$) が得られる.

- (2) (1)で得られたデータ対により深層学習により分類器を構築する. 分類器の入出力は,

入力: $\{e-parameters\}$

出力: $\{n_{opt}, m_{opt}, l_{opt}\}$

である.

- (3) 構築した分類器を解析コードの要素積分過程に組み込み, 使用する. 個々の要素についてその $\{e-parameters\}$ を分類器に入力すれば最適積分点数 $\{n_{opt}, m_{opt}, l_{opt}\}$ が算出され, その積分点数を用いて通常のGauss-Legendre積分によりその要素の積分を行う.

数値例として, 8節点6面体一次要素の要素積分への適用例を示す. Fig. 4 に示す8節点6面体一次要素について, 様々な節点配置の要素を多数作成し, 各要素の要素積分の収束性を評価した. 要素の作成は, Fig. 4 に示した要素における各節点の配置については, 節点 A は原点に配置し, 節点 B は x 軸上, 節点 D は xy 平面上に配置した.

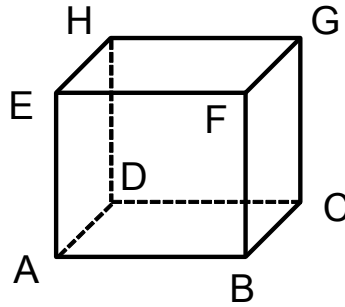


Fig. 4 8 noded Solid Element

本研究では, 単位立方体形状を各節点の基準配置とし, $[0,1]$ の一様乱数 r と(最大)変更量 d を用いて各節点の座標を以下のように変更することにより多数の要素形状を生成した.

$$A(0,0,0), B(1\pm rd,0,0), C(1\pm rd,1\pm rd,\pm rd), D(\pm rd,1\pm rd,0), E(\pm rd,\pm rd,1\pm rd), \\ F(1\pm rd,\pm rd,1\pm rd), G(1\pm rd,1\pm rd,1\pm rd), H(\pm rd,1\pm rd,1\pm rd)$$

変更量は $d = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ の5通りを設定した. 各節点の座標を独立に変更した場合, 著しい悪形状の要素や, 不適切な凹形状の要素も生成されることがある. こうした要素はメッシュ生成時に排除されるべきものであるため, 本研究では要素の形状に下記の制限を加えている.

- (1) 各辺の長さは 0.5 から 2.0 の範囲にある.
- (2) 隣接する面間の夾角は 60 度から 120 度の範囲である.

こうして生成した要素について, 式 (23) により収束性を評価した. 結果を Fig. 5 に示す. Fig. 5(a),(b),(c)はそれぞれ $d = 0.1$, $d = 0.3$, $d = 0.5$ の場合について式 (23) の *Error* が初めて 1.0×10^{-3} 以下となる積分点数の分布を示したものである. 形状の歪が大きくなると必要な積分点数も増えることがわかる.

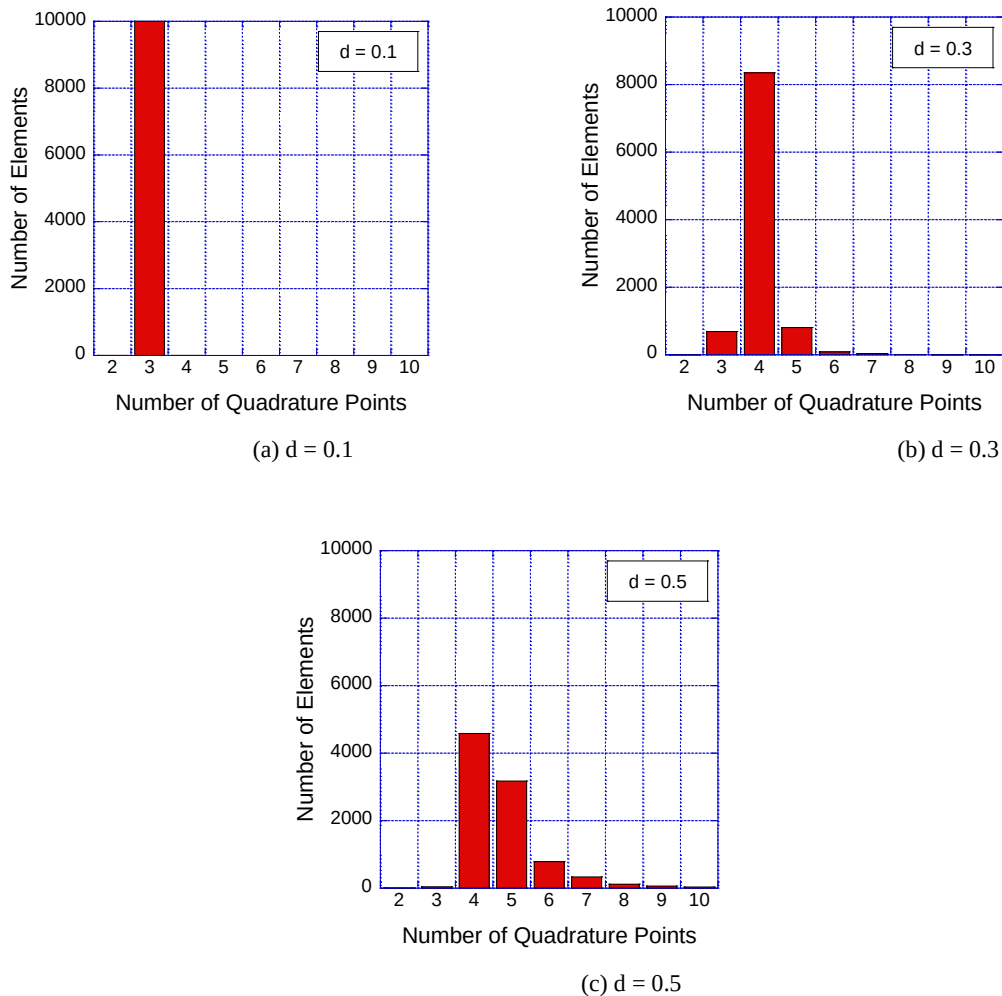


Fig. 5 Number of Quadrature points required

$d = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ として作成した要素各 2000 個, 計 10000 個のデータ(節点座標, *Error* が初めて 1.0×10^{-3} 以下となる積分点数)を用いて所要積分点数分類用階層型ニューラルネットワークを構築した. 階層型ニューラルネットワークの入力データ・教師データは,

入力データ:要素を構成する節点の座標(計 18 個:入力層ユニット数 18)

教師データ:式(23)の *Error* が初めて 1.0×10^{-3} 以下となる積分点数(各積分点数毎に出力ユニットを用意:当該積分点に対応するユニットの教師データは 1, 他のユニットの教師データは 0. 出力ユニット数 8)

である. 学習用パターンとして 5000 個を使用し, 残り 5000 個を汎化能力検証用とした. 様々な隠れ層数, 隠れ層ユニット数をもつネットワークに対して誤差逆伝播法により学習を行なった. 学習回数は最大 30000 回とし, 検証パターンに対する誤差をモニタリングし汎化能力最大(検証パターンに対する誤差最小)時点で学習を打ち切り, 正解率を比較した. 学習後の正解判定は, 最大値を出力した出力層ユニットに対応する積分点数をニューラルネットワークの推定値とし, 教師データと一致する場合を正解とした.

Table 1 Results of Classification by Neural Network

(a) Training Patterns

		Quadrature Points (Estimated By Neural Network)								
		2	3	4	5	6	7	8	9	Total
Quadrature Points (Correct)	2		5							5
	3		1553	9						1562
	4		7	2548	2					2557
	5			20	616					636
	6			5	2	153	2			162
	7			2	5	1	46	1		55
	8				5	1		15		21
	9				1	1				2

(b) Test Patterns

		Quadrature Points (Estimated By Neural Network)								
		2	3	4	5	6	7	8	9	Total
Quadrature Points (Correct)	2									0
	3	1430		123						1553
	4	135		2222	201	15	1			2574
	5	206			386	56	7	1	656	
	6	16			70	36	13	135		
	7	1			29	19	6	1	56	
	8				10	8	3	21		
	9				3	2	5			

Table 1 に、最も高い正解率を示した隠れ層ユニット数 50, 隠れ層数 3 のニューラルネットワークの学習パターンおよび検証パターンに対する推定結果を示す。正解率は学習パターンに対して 98.6%, 検証パターンでは 81.6%であった。不正解の場合においても、ニューラルネットワークの推定値は、多くの場合正解の近傍を示していることがわかる。学習パターンにおいて各カテゴリ(所要積分点数)間のパターン数に大きな差があり、検証パターンにおいてはパターン数の少ないカテゴリの推定精度が低くなっている。これに対しては、学習パターンにおけるカテゴリ間のパターン数の差を調整することで改善可能である。

以上のように、深層学習を用いることにより、一定の精度を得るために必要な最適積分点数を要素単位で事前に決定可能であり、精度の良い要素積分を効率化が可能であることがわかる。

(4) 平成 29 年度進捗状況

有限要素解析における要素積分への深層学習の適用に関し、多数の要素に対する要素積分の結果を深層学習することにより、要素パラメータ(節点の配置、基底関数など)に基づいて要素積分の収束性を予測することが可能であることを示した。なお、要素ごとに Gauss-Legendre 積分のパラメータ(積分点座標および重み)を修正し数値積分の精度を向上させる手法についても検討を行った。

(5) まとめ

有限要素解析における要素積分に深層学習を適用し、要素パラメータから要素単位で数値積分の収束性を推定することにより、要素ごとに最適な積分点数を用いて要素積分を行えることを示した。この手法は、有限要素法の主要な過程である要素積分過程に対する深層学習のユニークな適用例であるとともに、アイソジオメトリック解析など他の手法にも容易に展開可能であり、汎用性を有している。

4. 共同研究

4.1. JST CREST プロジェクト

平成 23 年 10 月より JST CREST 研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」において、研究課題名「ポストペタスケールシミュレーションのための階層分割型数値解法ライブラリ開発」が採択され、研究拠点を当センターに置き研究を実施し、平成 28 年 1 月からはドイツ DFG SPPEXA との共同研究が採択され、当初の予定より 1 年間研究期間が延長され、平成 30 年 3 月までの共同研究プロジェクトとして実施している。

4.1.1. 研究実施内容

ポストペタスケールシステムなど次世代の並列計算機アーキテクチャにおいて、大規模な数値計算データ処理を必要とする実アプリケーション・ソフトウェアが高い演算効率を得るためには、マイクロプロセッサやメモリなどハードウェアが持つ階層構造を考慮したプログラミングモデルを採用することが必要である。特に、入力データ生成や可視化などのプレ・ポスト処理から数値解析手法などのソルバー処理に至るまで、全ての処理がスパコン上で行われることを想定する必要がある。そこで本チームでは、次世代並列計算機上における大規模数値計算データ処理システムに関する基盤技術として、これまで主に数値解析手法向けに研究開発してきた階層型領域分割法(HDDM)の技術を応用した、HDDM による大規模数値計算データ処理システムの研究開発を行った。特に、学術研究・産業界で需要が高い有限要素法(FEM)と粒子法による連続体力学のシミュレーションに対象を絞ることで高性能が得られるアプリケーション特化型システムソフトウェア開発を行った。ターゲットとするアプリケーション・ソフトウェアは、本チームメンバーがこれまで開発に携わってきている、HDDM による大規模計算・超並列計算で実績があり、HPCI 戦略プログラムやポスト「京」重点課題でも利用されているオープンソース CAE ソフトウェア ADVENTURE とした。ただし、ADVENTURE にはこれまで粒子法に関連するソフトウェアは含んでいなかったため、粒子法ソルバーについては本研究による新たな開発アプリケーションとなる。

本研究は、「DDM 入出力ライブラリ」、「DDM ソルバーライブラリ」、「連続体力学向け DSL」、「連続体力学系シミュレータ」の 4 つの研究項目に分類して研究開発を行った。本研究の成果物であるソフトウェアは、ADVENTURE プロジェクトホームページ内のサブプロジェクトページ (URL; <http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/lexadv/>)にて一般に無料公開している。

DDM 入出力ライブラリでは、粒子法シミュレーションに対応した標準 I/O ライブラリ AdvIO2、多階層領域分割と並列メッシュ細分割機能を有し、かつ、MPI-OpenMP ハイブリッド並列処理やリスタート機能によって大規模データ生成を可能とするツール AdvMetis2、領域内部自由度

削除と多階層精度圧縮数値記録技術によって FEM や粒子法の計算データを圧縮する DDM 圧縮技術, 超高解像度シミュレーション向けに 10 万×10 万ピクセル超のオフライン可視化を実現し, かつ, メッシュと粒子の描画に対応した高可搬な LexADV_VSCG ライブラリ, DDM のデータ構造を活用した MPI-OpenMP ハイブリッド並列可視化と独自トーナメント方式による Z バッファ画像合成処理を行う LexADV_WOVis を開発した. また, 粒子法向けに, 隣接プロセス間通信を少なくするバケットベース 2 階層領域分割と Halo 通信パターン生成機能を持つ分散メモリ並列 MPS 陽解法ソルバーフレームワーク LexADV_EMPS を開発した. これにより, AdvMetis2 を用いることでポストペタスケールシステムにおいて想定する 1 兆自由度規模メッシュの生成に成功し, さらに, LexADV_EMPS を用いることで従来困難であった数千万から数億規模の粒子法シミュレーションが可能となった.

DDM ソルバーライブラリでは, 有限要素法シミュレーションコード開発者向けに領域分割メッシュと部分領域ごとにサブアセンブリした係数行列や右辺ベクトルを入力とし, 実対称系向けに CG 法や MINRES 法, 複素対称系向けに COCG 法や MINRES-like_CS 法などが利用可能, かつ, 「京」で 85%以上の高い強スケーリング性能を持つ反復法ライブラリ LexADV_IsDDM を開発した. LexADV_IsDDM を用いることで, 従来困難であった非構造メッシュによる 1 千億自由度規模の構造解析に成功した. また, 高速・高安定な収束性を持つ Scaled-BDD 法を開発し, 複数材料モデルにおいて反復回数・計算時間の削減に成功した. さらに, DDM 反復法のお試しや BDD 前処理の研究開発支援を目的として, 領域分割メッシュと全体係数行列・右辺ベクトルを入力とし, 全体 Schur 補元方程式を陽に構築する反復法ライブラリ LexADV_TryDDM も合わせて開発した. LexADV_TryDDM を用いることで, BDD 法と IC 分解や SSOR 前処理などとの比較検討が容易に行えるようになった. また, メッシュフリー向けには, 粒子法で現れる大規模な圧力ポアソン方程式に対して PA-AMG 法を用いることで高速化できることを示した.

連続体力学向け DSL では, 要素・セル・粒子に対する物理モデルを対象とし, LaTeX ベース数式記述からプログラムコードへのトランスレータ開発, 小規模行列やテンソル演算をマルチコア・メニーコアプロセッサや GPU などに最適化した LexADV_AutoMT ライブラリを開発した. トランスレータからは LexADV_AutoMT ライブラリをコールするプログラムが生成されるため, ユーザーは計算機アーキテクチャの違いを考慮する必要がなく, 高性能を得ることが可能となった.

連続体力学系シミュレータでは, DDM 反復法を用いた大規模電磁界シミュレータを開発し, 特にモーターなど移動体を含むモデル向け分散メモリ並列アルゴリズム開発による高効率化, 医療画像から構築された 3 次元ボクセルデータ向け異材境界平滑化技術開発による高精度化などを実現した. また, LexADV_EMPS ライブラリを用いた MPS 陽解法による大規模流体シミュレータを開発し, 特に流体剛体連成計算, 高次精度微分モデル, 表面張力モデルなどの機能の開発を行った. LexADV_EMPS を用いた津波遡上解析を実施し, 浸水領域による妥当性確

認によってその有効性を示した. Fig.4.1.1 に LexADV_EMPS を用いた津波遡上解析を行い, その流体圧力を地上構造物に与え, 構造 FEM ソフトウェア AdvSolid を用いて応力解析を行った結果を示す. Fig.4.1.1 中に流体剛体連成機能によりタンクが流されている様子が示されている. このように, 本研究成果により, 大規模分散メモリ環境で, 粒子法による流体解析と有限要素法による構造解析の連成解析が可能となった.

SPPEXA 共同研究では, EXASOLVERS チームの UG ソルバーを PC クラスタに移植し, ラプラス方程式ソルバーによる強スケーリング性能評価やポアソン方程式ソルバーにおける計算精度評価などを実施し, UG ソルバーとHDDMソルバーの相互評価を行う環境を整備した. また, C++ Boost ライブラリを利用する UG4 の移植作業を通し, ポストペタスケールシステムに向けたコンパイラの課題が明らかになった.

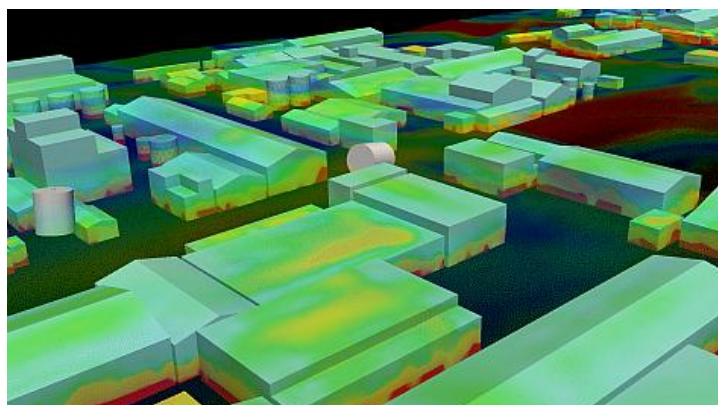


Fig. 4.1.1 LexADV_EMPS による流体解析と AdvSolid による構造解析の結果

4.1.2. 研究実施体制

(1) 「東洋大学」グループ

① 研究代表者：塩谷隆二（東洋大学総合情報学部，教授）

② 研究項目

階層分割型数値計算ライブラリの基礎研究並びに設計とその応用

(2) 「名古屋大学」グループ

① 主たる共同研究者：荻野正雄（名古屋大学情報基盤センター，准教授）

② 研究項目

階層型ソルバーライブラリの基礎研究とその応用

(3) 「東京大学」グループ

① 主たる共同研究者：越塚誠一（東京大学大学院工学系研究科，教授）

② 研究項目

階層分割型入出力ライブラリ並びに連続体力学向け問題領域専用言語の基礎研究とその応用

4.2. 原子力科学技術プロジェクト

平成 28 年 10 月より文部科学省 国家課題対応型研究開発推進事業「英知を結集した原子力科学技術・人材育成推進事業」において，研究課題名「構造健全性評価の信頼性向上に向けた計算科学基盤の構築と破壊挙動の解明」が採択され，研究代表機関である東京理科大学より再委託を受け，平成 31 年 3 月までの予定で研究を実施している．

4.2.1. 研究実施内容

本研究では，原子炉構造材料の延性-脆性遷移に焦点を絞り，延性-脆性遷移の基本的なメカニズムを解明するためのマルチスケール材料モデリングを基礎とする計算科学的基盤技術の構築を行っている．さらに，本研究で構築した計算科学的基盤技術によって得られる延性-脆性遷移のメカニズムに関連する情報と，これまでに蓄積されてきた実験的観察結果を統合することにより，工学的に必要なパラメータ（例えば破壊靱性値）を導き出すことを目指している．具体的には，延性-脆性遷移のメカニズム解明のための計算科学的アプローチを描き，それを実行可能とする分子動力学，転位動力学および有限要素法のコードを整備する．構築した計算科学的基盤技術を用いて，フェライト鋼に見られる延性-脆性遷移のメカニズムを解明する．さらに，延性-脆性遷移とき裂先端の力学場との関係を明らかにすることを目指す．

東洋大学グループでは，超大規模破壊靱性値計算と超大規模可視化を担当している．転位動力学法の可視化に対する要求は，転位の形状を表すだけではなく，転位が作る応力分布を可視化する必要がある．転位動力学法では，計算過程において転位線上の応力のみが計算されるため，空間に広がる応力分布の情報は通常計算されない．このような転位が作る応力分布の可視化について 2 つの方法を検討した．1 つ目の方法は，可視化する応力分布の面や空間を固定し，面や空間を格子に分割する．転位動力学法の計算過程において，その面や空間の格子点の応力を通常の転位動力学法における応力の計算方法で計算し，出力する方法である．可視化ソフトは，出力された応力を表示するのみとなる．一方，2 つ目の方法は，転位動力学法から出力された転位の情報を可視化ソフトが読み込み，可視化ソフト内で可視化の対象となる面や空間における応力を計算し可視化する方法である．この場合，可視化ソフトにおける計算量が問題となり，ディスプレイ

に応力を可視化するまでの時間が長くなってしまふ．この計算時間の対策として，解析対象全体を二次元あるいは三次元直交格子に分割し，転位線を格子の稜線で近似することで計算の高速化を行う方法を検討した．さらに可視化処理を計算の時間方向に（タイムステップで）分割し，各タイムステップの情報を並列計算環境下で分散させることにより，各タイムステップの応力の計算を並列に計算することで高速化を行う方法の検討も行なった．Fig.4.2.1 に，転位動力学シミュレーションの結果可視化の例を示す．

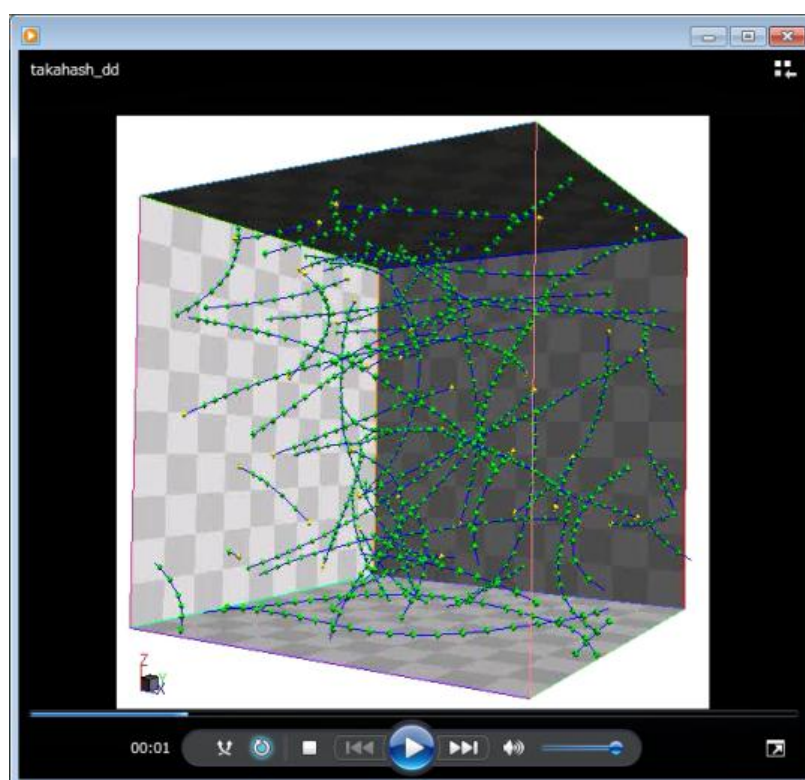


Fig. 4.2.1 転位動力学シミュレーション結果の可視化

4.2.2. 研究実施体制

(1) 「東京理科大学」グループ

① 研究代表者：高橋昭如（東京理科大学理工学部，准教授）

② 研究項目

混合転位のモデリング，き裂の数値解析手法の開発，破壊靱性値の計算・評価

(2) 「電力中央研究所」グループ

①再委託先機関事業責任者：野本明義（電力中央研究所，上席研究員）

② 研究項目

き裂先端の転位挙動と破壊靱性値の転位動力学計算，原子間ポテンシャルの開発，混合転位の数値計算

(3) 「東洋大学」グループ

① 再委託先機関事業責任者：塩谷隆二（東洋大学総合情報学部，教授）

② 研究項目

スパコンによる超大規模破壊靱性値計算，超大規模可視化

4.3. 「知」の集積と活用の中プロジェクト

平成 28 年 12 月より「「知」の集積と活用の中による革新的技術創造促進事業」（うち「知」の集積と活用の中による研究開発モデル事業）において，研究課題名「アミノ酸の代謝制御性シグナルを利用した高品質食肉の研究開発とそのグローバル展開」が採択され，研究代表機関である東京大学より再委託を受け，平成 33 年 3 月までの予定で研究を実施している．

4.3.1. 研究実施内容

栄養学的根拠に基づく食餌改良により、世界の消費者の嗜好にマッチした品質の食肉（霜降り肉や、柔らかい肉など）の安定生産を可能にし、様々な業種の企業との連携により、肉質の科学的評価系、トレーサビリティの向上を実現してバリューチェーンを確立し、海外産食肉と明確に差別化される高付加価値な日本産食肉のブランド力の強化を目指す．これまでのアミノ酸シグナルを用いた代謝調節に関する知見をもとに、飼料形態や給与法の工夫により、高付加価値食肉を安定生産し、肉質の評価系を確立、伊藤ハム株式会社の販路を活用してグローバルに消費者に届け事業創出することを目指している．

具体的には、筋肉内脂肪含量が高い霜降り豚肉を生産するには、低リジン飼料の給与が現実的であることをこれまでに確認している。しかし、飼料効率の低下や肥育期間の延長という課題が残された。また、筋肉内脂肪含量に焦点を定めて研究を進めたので、筋肉の硬さや色調などの物性、筋肉の遊離アミノ酸含量や脂肪酸組成など、味や脂肪の口どけに影響をおよぼす要因、さらに、官能特性については検討できなかった。本研究では、「ポーノポークぎふ」を生産するブタのリジン要求量を再検討し、そのうえで高温期用の低リジン飼料を開発することで、年間を通して安定して霜降り豚肉を生産する技術を開発する。このことにより、「ポーノポークぎふ」の認定基準である筋肉内脂肪含量 5%を 70%の LW ポーノがクリアできる技術の確立を目標とする。さらに、物性、

遊離アミノ酸組成と脂肪酸組成、官能特性の解析を通して、脂肪交雑のある豚肉をわかりやすく消費者にアピールする指標の取得を目指す。

東洋大学チームでは、モデル動物（ラット）および他の共同研究機関から供給されるブタの血中アミノ酸濃度、血中中間代謝物濃度、血中ホルモン濃度、筋肉切片の脂肪交雑量から、機械学習（ニューラルネットワーク）や自己組織化マップ(SOM)を行い、血中のアミノ酸とホルモンの濃度から筋肉内脂肪含量を予測する人工知能プログラム(AI)を作成する。さらに、血中のアミノ酸とホルモンの濃度の変化を予測する AI も作成する。この 2 つの AI を使えば、飼料中のリジン濃度→血中のアミノ酸とホルモン濃度→筋肉内脂肪含量と予測できるようになる。モデル動物（ラット）の筋肉中の脂肪前駆細胞の量を測定、脂肪細胞分化の筋肉の脂肪交雑への寄与率を決定することを目指す。

4.3.2. 研究実施体制

(1) 研究コンソーシアム

代謝制御性アミノ酸シグナルを利用した高品質食肉開発コンソーシアム

(2) 研究代表者：高橋伸一郎（東京大学大学院農学生命科学研究科，教授）

(3) 構成員

伊藤ハム株式会社、株式会社ゼンショーホールディングス基盤技術研究所、日本農産工業株式会社畜産技術センター、株式会社リバネス、株式会社塚原牧場、中濃ミート事業協同組合、秋田県畜産試験場比内地鶏研究部、学校法人麻布獣医学園麻布大学獣医学部獣医学科栄養学研究室、学校法人明治大学機能性食品開発基盤研究所、学校法人東洋大学計算力学研究センター、公益財団法人 未来工学研究所、ネットスマイル株式会社

5. 成果の広報および普及活動

5.1. 台湾龍華科技大學にて合同ワークショップ開催

2017 年 11 月 29 日(水)～12 月 2 日(土)にわたり，台湾の龍華科技大學を訪問し，龍華科技大學，東京理科大学，近畿大学，工学院大学，東洋大学による 5 大学合同学生ワークショップを開催した．ワークショップの後で，龍華科技大學の学内を見学し，懇親会で親睦を深めた．ワークショップのプログラムは次の通りである．

5.1.1. プログラム

Name	Organizer	Title
Ryosuke Koga	Tokyo University of Science	S-version finite element analysis of embedded cracks with high aspect ratio
Tomonari Watanabe	Tokyo University of Science	Influence of hydrogen on dislocation behavior in palladium
Ryohei Aoki	Toyo University	Analysis of material characteristics of magnetic elastomer for fluid force control
Kazuya Suzuki	Toyo University	Development of application for directing next shot direction of Billiards
Ryuta Hoshi	Toyo University	Development of the software that observes constellation at any angle
Shota Kouno	Toyo University	Development of application to support of scoring management for ballroom dance
Fumiya Nakamaru	Toyo University	Development of application to improve operability of smartphone using sensor
Kosuke Karasawa	Toyo University	Development of application to improve operability of smartphone using sensor
You-Hao Jin	Lunghwa University of Science and Technology	SiO _x with super transparent and hydrophobic behaviors deposition on the PC materials
Shau Wei Hsu	Lunghwa University of Science and Technology	Comparisons between Taguchin method and Response surface method for the optimizations
Yun Bin Yang	Lunghwa University of Science and Technology	Studies on the vascular blood phenomena for Acupuncture and moxibustion surgery using Laser Doppler

Keitaro Takahashi	Kogakuin University	How combine two effective approaches of high performance factors for Lithium-Sulfur batteries?
Minori Inoue	Kogakuin University	Ionic conduction mechanisms of solvent-free polymer electrolytes for next-generation battery
Kanae Endo	Kogakuin University	Electrochemical corrosion behavior of skutterudite-type material for thermoelectric devices
Tomohito Yashiro	Kogakuin University	3-dimensional displacement measurement using priori information of image patterns



学生の発表の様子



懇親会の様子

6. 学術活動

2017 年 1 月から 2018 年 1 月までの業績を掲載する.

6.1. 論文投稿

1. A.M.M.Mukaddes, Masao Ogino, Ryuji Shioya, Hiroshi Kanayama, Treatment of Block-Based Sparse Matrices in Domain Decomposition Method, International Journal of System Modeling and Simulation, Vol 2(1), pp.1-6, (DOI:10.24178/ijssms.2017.2.1.01) 2017
2. Hongjie Zheng, Ryuji Shioya, Verifications For Large-Scale Parallel Simulations of 3-D Fluid-Structure Interaction using Moving Particle Simulation (MPS) and Finite Element method (FEM), International Journal of Computational Methods, Vol.15, No.3, 1840014, pp.1-13, (DOI:10.1142/S0219876218400145) 2017
3. Yasuhiro Shindo, Kenji Takahashi, Futoshi Ikuta, Yuya Ikuta, Kazuo Kato, Improved Deep Thermal Rehabilitation System with Temperature Measurement Function Using Ultrasound Images, Thermal Medicine, vol.33, No.3, pp. 91-101, 2017
4. Yasuhiro Shindo、Kenji Takahashi, Futoshi Ikuta, Yuya Iseki, Evaluating Microwave Diathermy Results Using Robotic Arm Guided Temperature Measurement System, FERMAT (Forum for Electromagnetic Research Methods and Application Technologies) , Vol.22, Article 1, pp. 1-7. 2017
5. Yuya Iseki, Daisuke Anan, Takahiro Saito, Yasuhiro Shindo, Futoshi Ikuta, Kenji Takahashi, Kazuo Kato, Non-Invasive Measurement of Temperature Distributions During Hyperthermia Treatments using Ultrasound B-mode Images, Thermal Medicine, Vol. 32, No. 4, pp.17-30.2017
6. 横山真男、矢川元基、スプラッシュ現象の数値シミュレーション、シミュレーション、36、pp.105-109、2017
7. A. Oishi and G. Yagawa, Computational Mechanics Enhanced by Deep Learning, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 327, pp.327-351, 2017
8. An Evaluation of Microwave Diathermy Systems Using Temperature Increase Distributions Produced by Ultrasound Imaging Techniques, Yasuhiro Shindo, Kenji Takahashi, Futoshi Ikuta, Yuya Iseki, Kazuo Kato, 2017 IEEE International Ultrasonics Symposium (IUS2017), Wshington D.C.
9. Visualization of Thermal Fatigue Damage Distribution with Simplified Stress Range Calculations, Junya Miura, Terutaka Fujioka, Yasuhiro Shindo, ASME Pressure Vessels &

Piping Conference (PVP), Hawaii. 2017

10. Kosaburo Hirose and Hitoshi Matsubara, “Mechanisms of mudcrack formation and growth in bentonite paste”, ASCE Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 2017
11. 川上凌梧, 松原仁, “移流反応拡散系理論に基づいた 3 次元陥没孔形成シミュレータの開発”, 環境地盤工学シンポジウム発表論文集, pp. 477-480, 2017
12. 大城勇人, 廣瀬孝三郎, 松原仁, “石灰岩の形成過程で見られる微細なネットワーク構造の SEM 画像解析”, 環境地盤工学シンポジウム発表論文集, pp. 369-372, 2017
13. 崎山浩考, 廣瀬孝三郎, 岩崎竜馬, 松原仁, “第四紀琉球層群に見られる特徴的な侵食形態とその物理学的・化学的特徴”, pp. 377-382, 2017
14. 岩崎竜馬, 廣瀬孝三郎, 崎山浩考, 松原仁, “砂岩表面に見られる微生物による剥離状風化とその特徴”, 環境地盤工学シンポジウム発表論文集, pp. 383-386, 2017

6.2. 学会発表

1. An Evaluation of Microwave Diathermy Systems Using Temperature Increase Distributions Produced by Ultrasound Imaging Techniques, Yasuhiro Shindo, Kenji Takahashi, Futoshi Ikuta, Yuya Iseki, Kazuo Kato, 2017 IEEE International Ultrasonics Symposium (IUS2017), Wshington D.C.
2. Visualization of Thermal Fatigue Damage Distribution with Simplified Stress Range Calculations, Junya Miura, Terutaka Fujioka, Yasuhiro Shindo, ASME Pressure Vessels & Piping Conference (PVP), Hawaii. 2017
3. 横山真男, 平山晴花, “脳波の可視化および可聴化による即興的マルチメディアコンテンツ”, 映像表現・芸術科学フォーラム 2017, 2017.3
4. 深野拓馬, 横山真男, “バイオリン木材の加工処理と音響特性の変化”, 日本音響学会音楽音響研究会(MA)3 月, 2017.3
5. 井上恵太, 横山真男, “J-POP におけるヒット曲の構造分析”, 情報処理学会第 79 回全国大会, 2017.3
6. 篠崎雅和, 瀬田陽平, 横山真男, “ネットワーク型バーチャルプラネタリウムにおけるポインティング UI の評価”, 情報処理学会第 79 回全国大会, 2017.3
7. 宗宮麻衣子, 宮沢芽衣, 横山真男, “巨匠バイオリニストによるビブラート解析”, 音学シンポジウム 2017 (第 115 回 音楽情報科学研究会), 2017.6
8. 横山真男, “バイオリン演奏家のビブラートの運動解析”, 可視化情報シンポジウム 2017, 2017.7

9. Yong-Ming Guo, Genki Yagawa, "The nonlinear analysis by using the sub-domain meshless method", ICCM2017, July 25-29, 2017, Guilin, Guangxi, China
10. 東京電力福島第一原子力発電所において発生した事故事象の検討（続報）、松岡 猛、澤田 隆、矢川 元基、関村 直人、柘植 綾夫、成合 英樹、白鳥 正樹、宮野 廣、吉田 至孝、原子力学会春の年会、2017
11. Koki Tazoe, Hiroto Tanaka, Masanori Oka and Genki Yagawa, An analysis of half elliptical surface crack propagation phenomenon with smoothed particle hydrodynamics method, 5th International Conference on Particle-based Methods, Hannover, 2017.9
12. M. Yokoyama, Y. Seta and G. Yagawa, Explicit moving particle simulation method for milk crown and water drip, 5th International Conference on Particle-based Methods, Hannover, 2017.9
13. 田添広喜, 田中浩登, 岡正徳, 矢川 元基, “表面半楕円き裂進展の SPH 解析および疲労き裂進展試験による検証”, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会, 大阪, 2017.9
14. 鄭宏杰, 塩谷隆二, 河合浩志, “大規模並列計算システム—UG 4 フレームワークと ADVENTURE システムの反復ソルバの比較”, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会, 大阪, 2017.9
15. 淀薫, 塩谷隆二, 河合浩志, 荻野正雄, 三好昭生, “多階層領域分割法への BDD 前処理適用方法の検討”, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会, 大阪, 2017.9
16. 河合浩志, 杉本振一郎, “歴史シミュレーション：日本における稲作に基づく農業経済の再現”, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会, 大阪, 2017.9
17. 岡田裕, 長嶋利夫, 藤本岳洋, 河合浩志, 和田義孝, “破壊力学とき裂の解析・き裂進展シミュレーション”, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会, 大阪, 2017.9
18. 大石篤哉, 山本健斗, 加藤正大, “深層学習を用いた要素積分最適化のための学習データ作成”, 第 30 回計算力学講演会, 大阪, 2017.9
19. 加藤正大, 山本健斗, 大石篤哉, “Isogeometric 解析における局所接触探索への深層学習”, 第30回計算力学講演会, 大阪, 2017.9
20. 山本健斗, 加藤正大, 大石篤哉, “Isogeometric 解析における要素積分への深層学習の適用”, 第30回計算力学講演会, 大阪, 2017.9
21. 増田正人, 中林靖, 田村善昭, “深層学習を用いた数値解析結果の予測”, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会, 大阪, 2017.9
22. 伯野史彦, 増田正人, 中林靖, 西宏起, 山中大介, 高橋伸一郎, 塩谷 隆二, “自己組織化マップを用いた食餌中アミノ酸濃度、血中アミノ酸濃度、肝臓脂肪量の関係分類”, 日本機械学会第 30 回計算力学講演会, 大阪, 2017.9

23. 青木亮平, 藤松信義, 流体力制御に向けた磁性エラストマの材料特性の解析, 2018 年度日本実験力学学会年次大会, 岡山, (2018).
24. Ryohei Aoki, Nobuyoshi Fujimatsu, Analysis of Material Characteristics of Magnetic Elastomer for Fluid Force Control, 2017-c-16, 31th ISTS, Ehime, (2018).

6.3. 招待講演

1. 矢川元基, “我が国における原子力利用の将来に関するコメント”, 日本学術会議原子力総合シンポジウム, 2017.6
2. 矢川元基, “ポスト福島事故の原子力安全を考える”, 日本溶接協会原子力研究委員会創設 60 周年シンポジウム, 2017.7
3. 矢川元基, “計算力学の過去、現在、未来 ～30 年前にどのような未来を描いていたか～”, 日本機械学会計算力学講演会第 30 回記念座談会, 大阪, 2017.9

6.4. 受賞

1. 矢川元基, 瑞宝中綬章, 2017 年 4 月
2. 塩谷隆二, 日本計算工学会川井メダル, 2017 年 5 月
3. 河合浩志, Jacm Fellow Award, 2017 年 7 月
4. 新藤康弘, 日本ハイパーサーミア学会研究奨励賞受賞, 2017 年 9 月

7. 終わりに

本報は、2017 年度の活動を取りまとめたものである。なお、2017 年度末に予定されているセンター外部評価委員会に間に合わせるために原稿締め切りを 2018 年 1 月とした。したがって、それ以降のデータについては掲載されていないことをお断りしたい。

今日、計算力学は製造業のみならず、社会の安心・安全をはじめさまざまな分野に大きく広がりをみせている。より広い視点で計算力学の発展に資するようセンター研究員一同、今後とも努力していきたい。