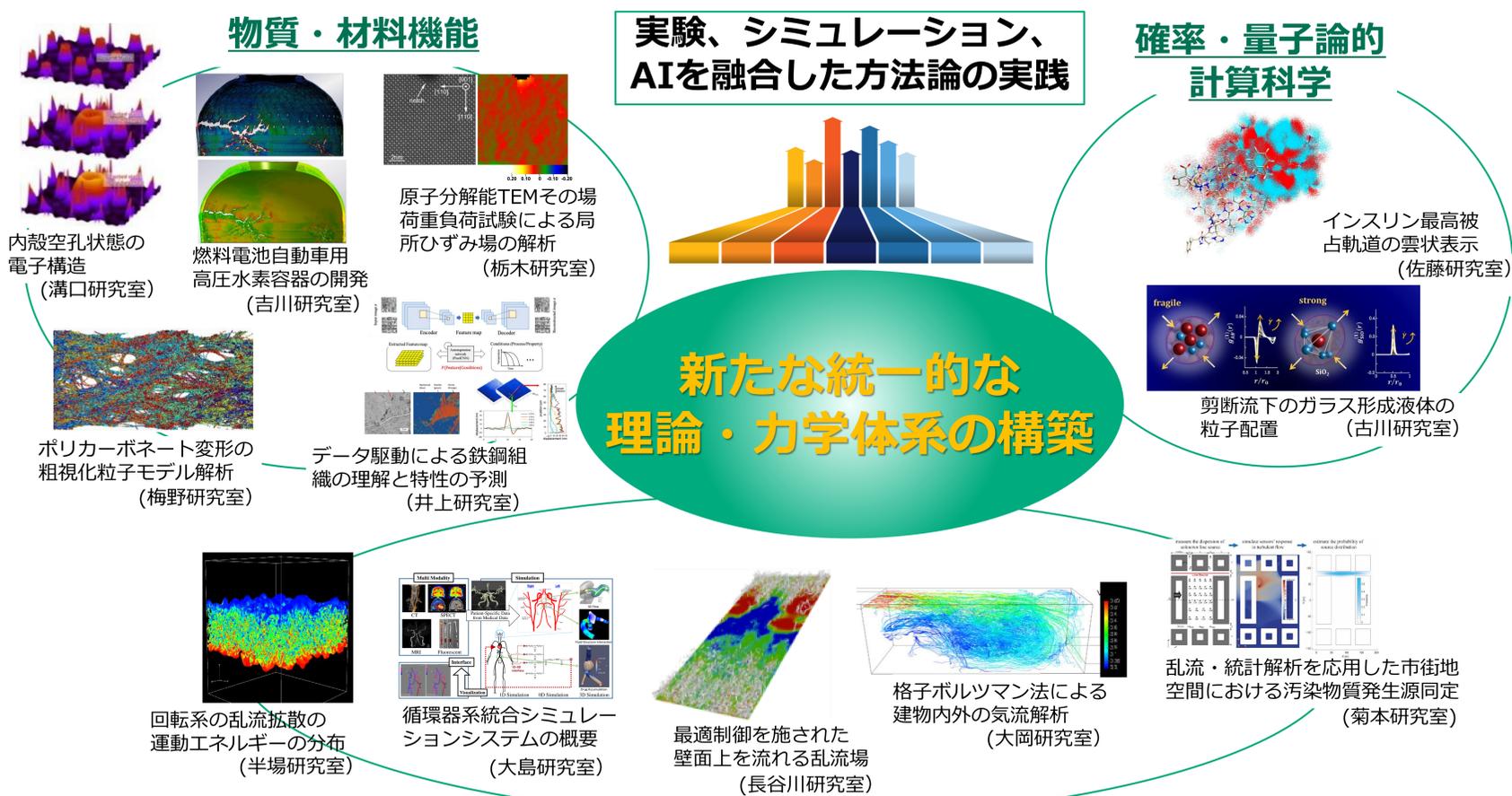


研究室紹介

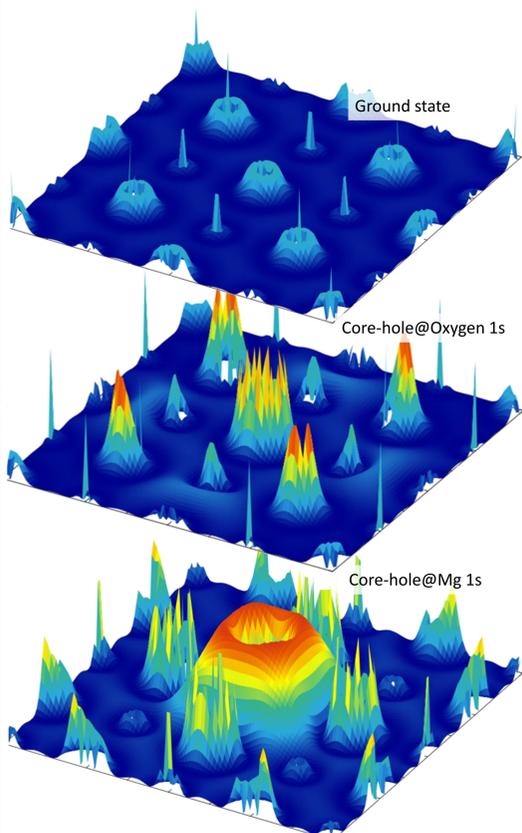


原子と電子の役割を知る

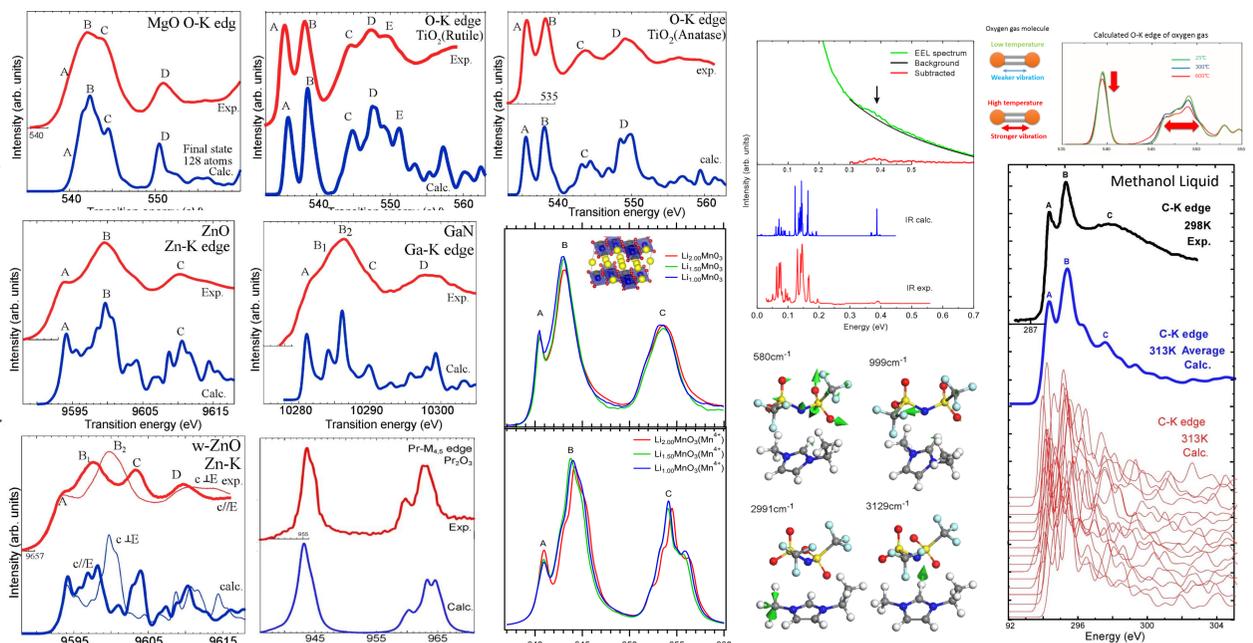
- 一粒子・二粒子・多粒子計算法による内殻電子励起スペクトル(ELNES/XANES)の精密シミュレーション
- 機械学習を用いたデータ駆動型界面構造探索

一粒子・二粒子・多粒子計算法による内殻電子励起スペクトル(ELNES/XANES)の精密シミュレーション

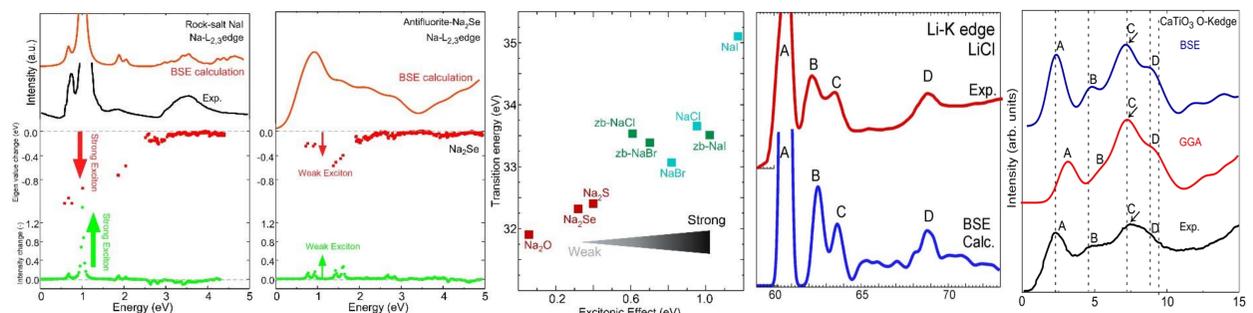
内殻空孔状態の電子構造



一粒子・二粒子・多粒子効果, 振動効果, van der Waals力効果のシミュレーション



エキシトン効果の定量理解→リチウムイオン, ナトリウムイオン電池解析を高精度化



ELNESおよびXANESは内殻電子励起スペクトルであり、物質科学の分野で広く利用されている分析手法です。一方でスペクトルを理論計算することはこれまで困難でした。本研究室では一粒子・二粒子・多粒子理論に基づき、スペクトルを定量的に解釈するための手法を開発しております。我々のシミュレーション法を活用することで、電池や触媒、磁性材料や光学材料の解析精度が格段に向上します。

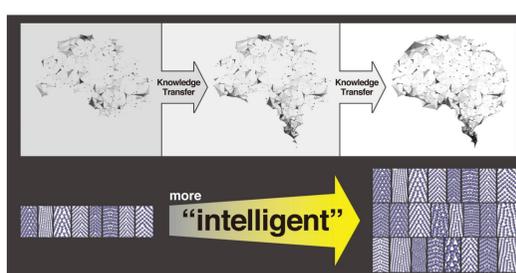
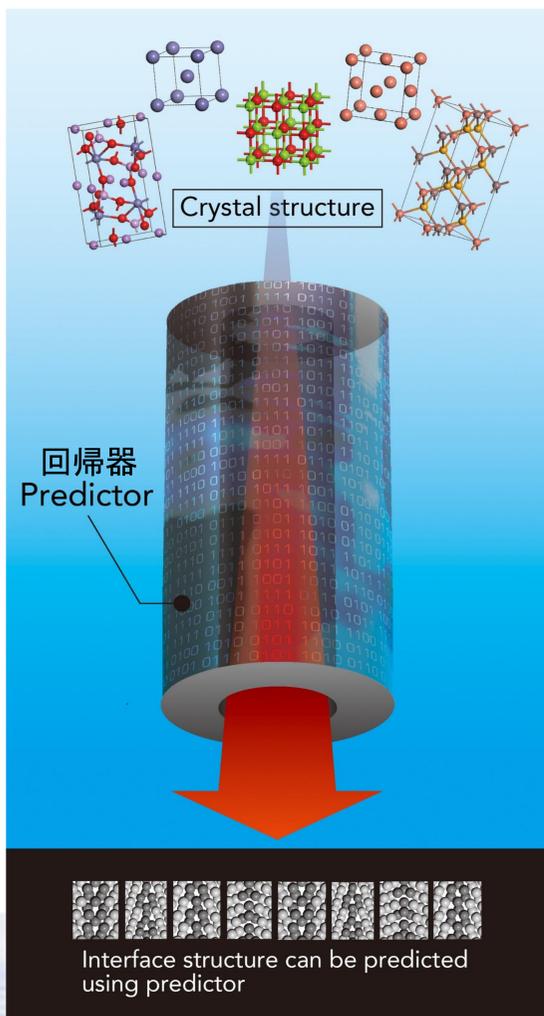
機械学習を用いたデータ駆動型界面構造探索とスペクトル解析

情報科学手法を活用することで、構造決定、構造探索のためのスピードを高速化

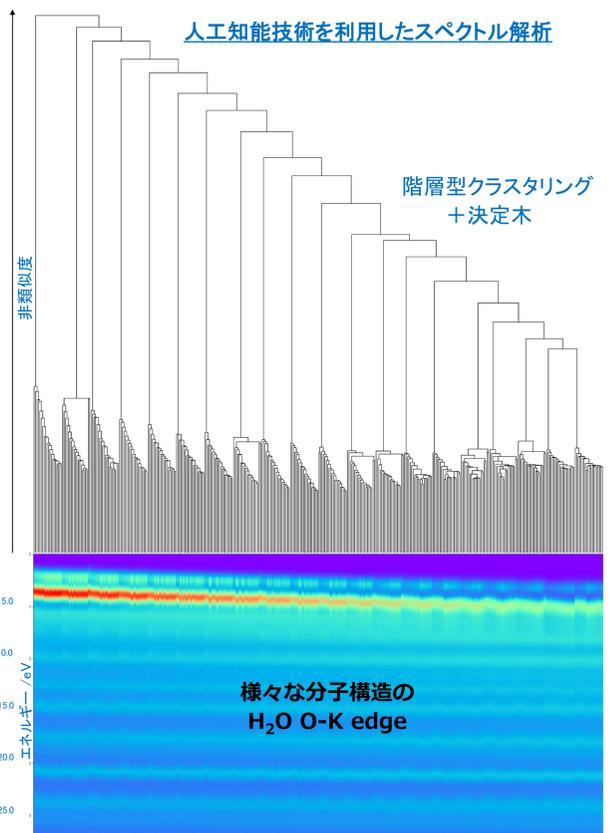
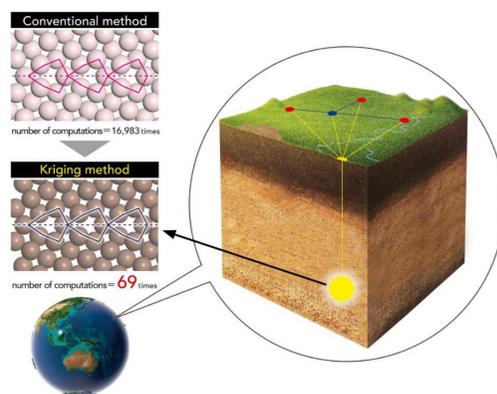
人工知能技術を活用することで
界面構造を決定するスピードを高速化

転移学習により人工知能が過去の経験を学習

人工知能技術を利用したスペクトル解析



資源探索分野における人工知能技術を利用することで
界面構造を高速かつ高精度に決定



第一原理計算により空孔、界面、転位などの格子欠陥の形成挙動とダイナミクスを調べ、網羅的計算により得られた結果を情報科学手法(インフォマティクス)により処理することでHigh through-put screeningと物質設計を実現することができます。さらに、人工知能技術とスペクトル計測との融合研究も実施しています。人工知能技術を利用することで専門的な知識を必要とすることなくスペクトルを解釈することが可能になります。

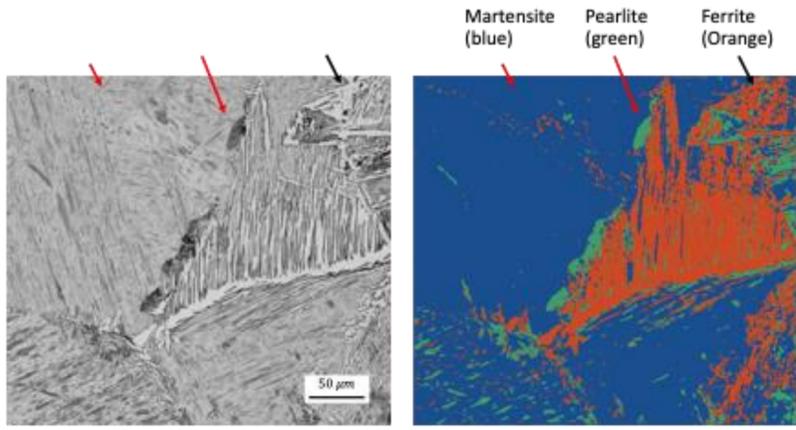
S. Kiyohara et al., J. Phys.: Materials, 2 (2019) 024003
H. Oda et al., J. Phys.: Materials, 2 (2019) 034005
S. Kiyohara et al., Scientific Reports, 8 (2018) 13548
S. Kiyohara and T. Mizoguchi, J. Chem. Phys. 148 (2018) 241741
S. Kiyohara et al., Physica B, 532 (2018) 9.
S. Kikuchi et al., Physica B, 532 (2018) 24-28
H. Oda et al., J. Phys. Soc. Jpn (Letter), 86 (2017) 123601
S. Kiyohara et al., Science Adv. 2 (2016) e1600746.
S. Kiyohara et al., Jpn. J. Appl. Phys. 55 (2016) 045502-1-4.
T. Yamamoto and T. Mizoguchi, Appl. Phys. Lett., 105 (2014) 201604.
H. Yamaguchi et al., Appl. Phys. Lett., 104 (2014) 153904.

鉄鋼材料のプロセス・組織・特性を理解する

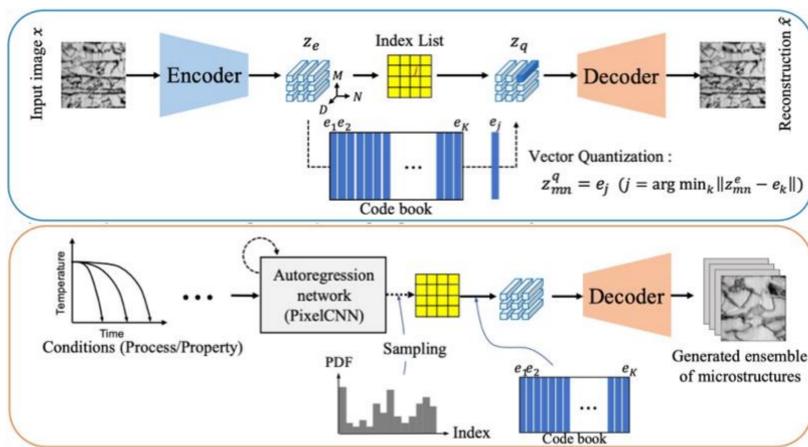
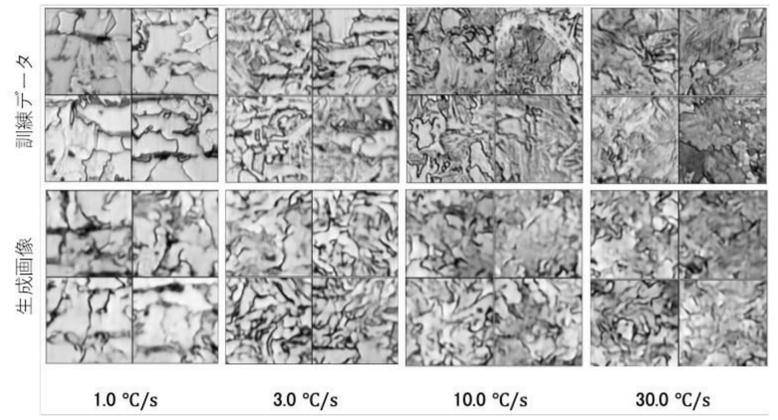
- 鉄鋼複雑組織の空間秩序を自動抽出し自動生成する深層学習モデルの開発
- PINNポテンシャルの開発と鋼の特異的な変形機構の解明
- スパースモデリングと冶金学モデルの融合

材料組織の幾何学的特徴量の自動抽出

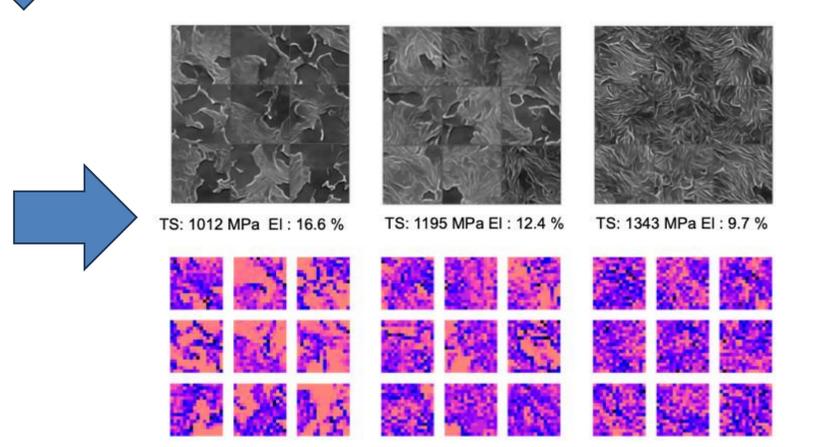
鉄鋼の構成相を教師なしで自動認識



プロセス条件に対応した鉄鋼組織を自動生成



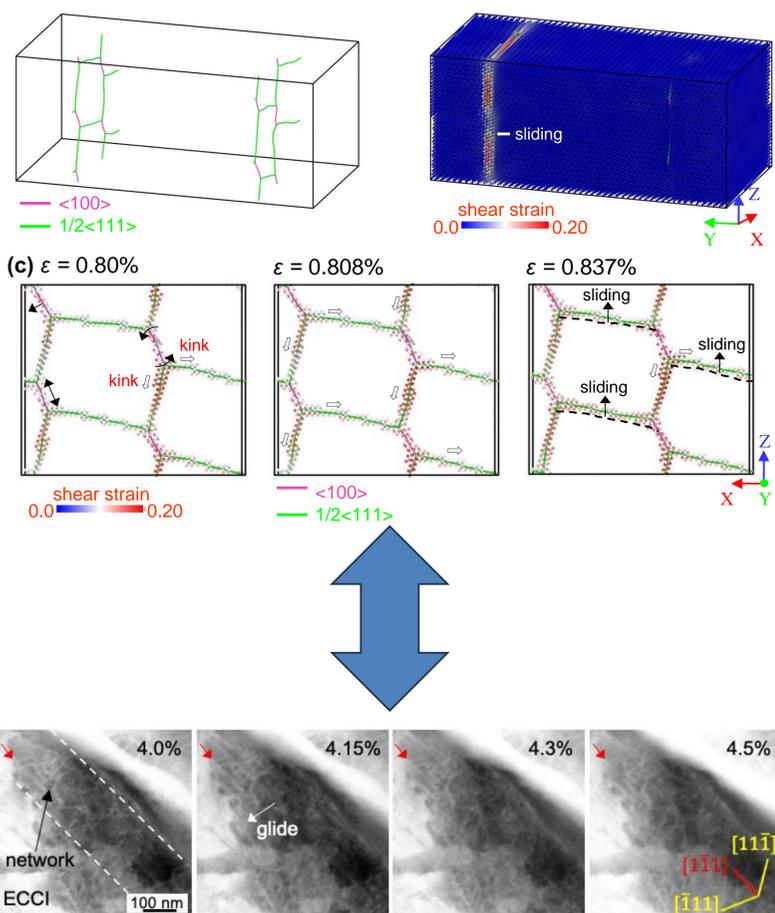
鉄鋼屋の思考過程を模した深層学習モデル



力学特性を満たす鉄鋼組織像を自動生成

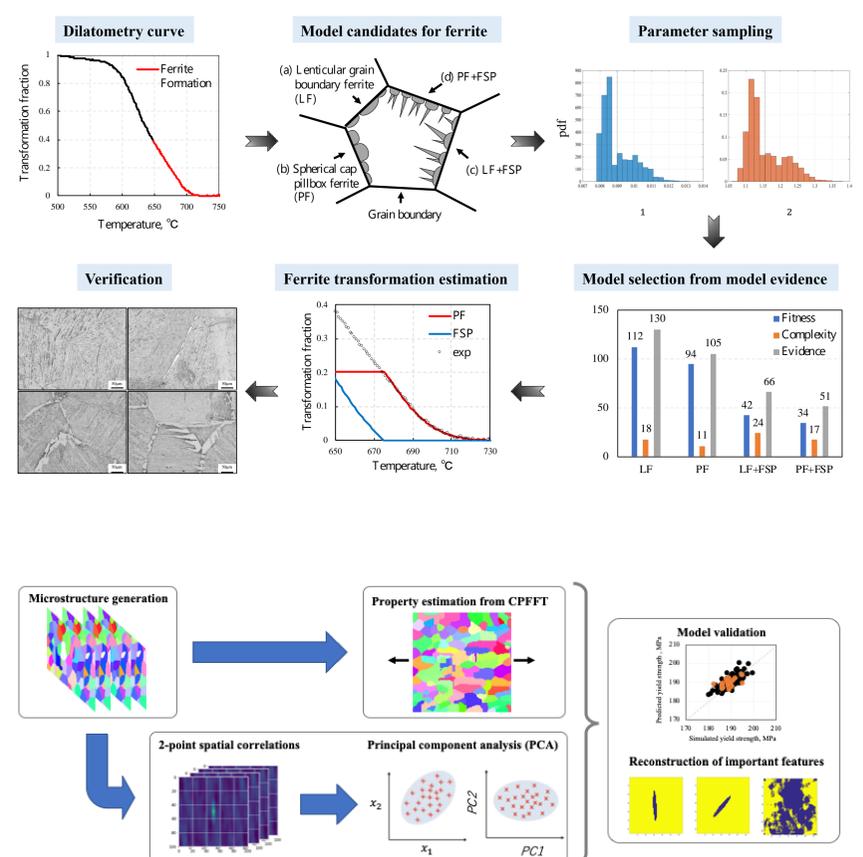
計算材料科学とデータ駆動科学の融合

PINNポテンシャルによる界面すべり現象の再現



ECCI法による転位のその場観察

RCMCMC法による変態挙動の支配的因子の抽出



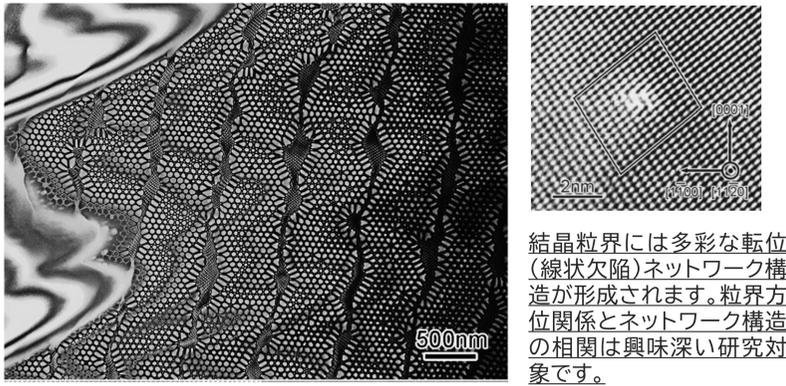
結晶塑性有限要素法とスパース学習によるDP鋼の力学特性の組織因子の抽出

結晶格子欠陥の構造解析による材料物性の理解

- 透過型電子顕微鏡観察による結晶格子欠陥の構造解析
- その場透過型電子顕微鏡荷重負荷試験法を用いた結晶格子欠陥の動的挙動観察
- 原子分解能その場荷重負荷試験システムの開発

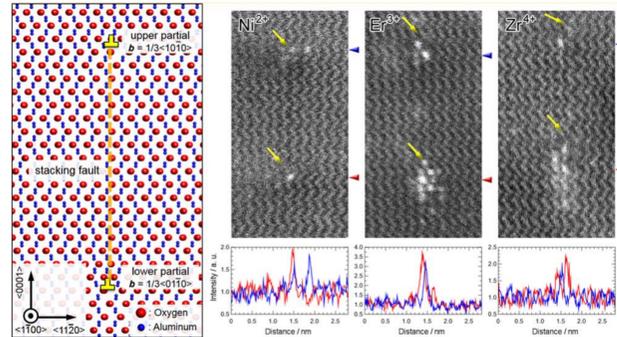
結晶格子欠陥の構造解析

◆ α - Al_2O_3 中の転位ネットワークと転位コア構造



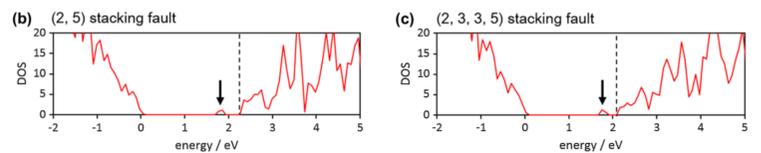
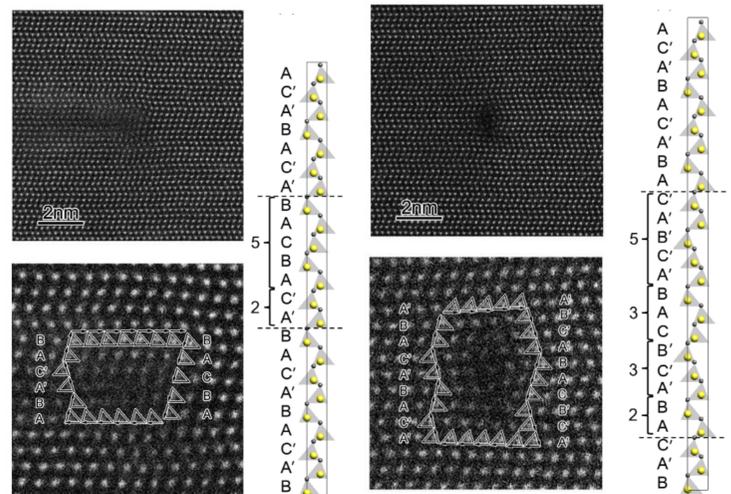
結晶粒界には多彩な転位(線状欠陥)ネットワーク構造が形成されます。粒界方位関係とネットワーク構造の相関は興味深い研究対象です。

◆ α - Al_2O_3 中の転位コアへの異種元素偏析



転位は結晶中の異種元素と強く相互作用することが知られています。本結果はイオン性結晶における転位の異種元素偏析を直接観察したもので、転位の電荷と異種元素のイオン価に依存した偏析挙動が見られています。

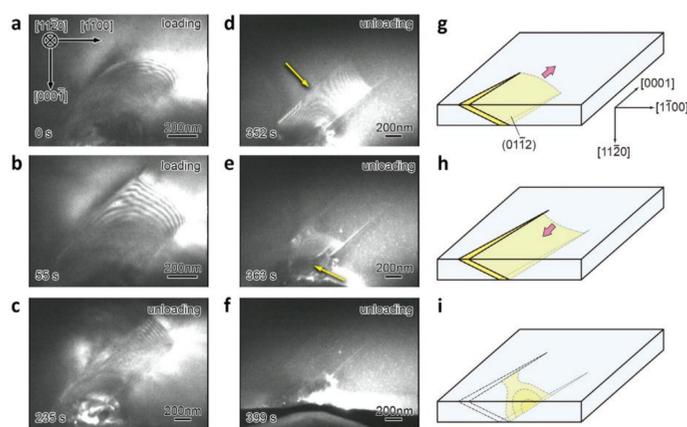
◆ 4H-SiC中の積層欠陥構造の解析



4H-SiCはワイドギャップ半導体として電子デバイス応用が期待されています。しかし、底面上に様々な面欠陥(積層欠陥)が形成され、電気特性に種々の影響を与えます。本結果は、4H-SiC中に形成された2種類の積層欠陥について解析したもので、それぞれバンドギャップ中に欠陥準位を形成することが明らかとされました。

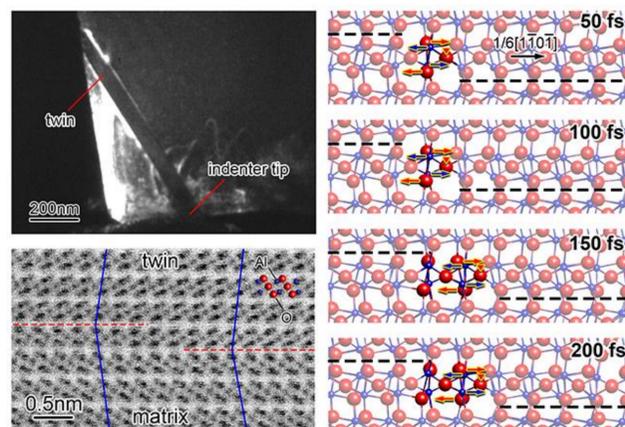
その場荷重負荷試験法を用いた格子欠陥の動的挙動観察

◆ 変形双晶の消失過程の観察



変形双晶は結晶質材料の代表的な変形モードです。本結果は、その場透過型電子顕微鏡ナノインデンテーション法により α - Al_2O_3 中の変形双晶の消失過程を捉えたものです。

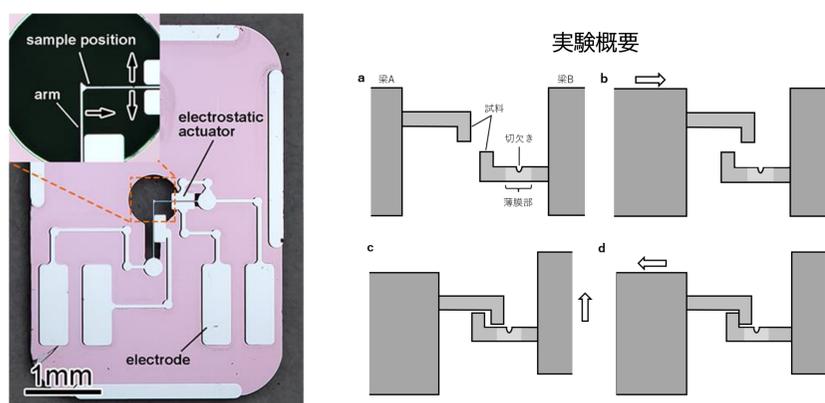
◆ 変形双晶の界面原子構造と界面移動の原子シミュレーション



変形双晶の母相/双晶界面の原子構造を観察した結果、界面にはステップ構造が形成されていることが分かりました。第一原理分子動力学シミュレーションの結果、5つの原子からなる原子グループが協調的に変位することでステップの移動が生じることが示され、この協調的な変位が変形双晶の素過程であることが明らかとなりました。

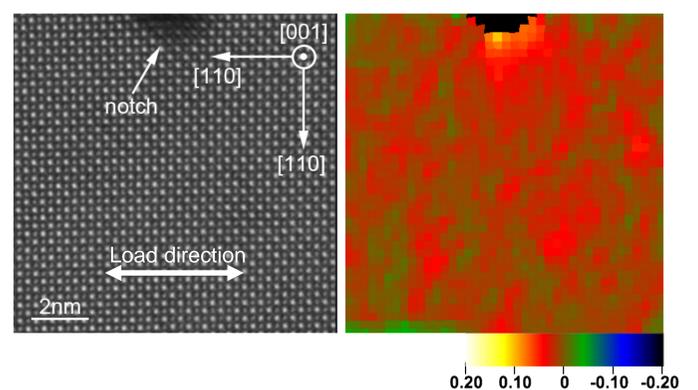
原子分解能その場荷重負荷試験システムの開発

◆ 透過型電子顕微鏡内荷重負荷試験用MEMSデバイス



透過型電子顕微鏡によるその場荷重負荷試験は格子欠陥の力学挙動を直接観察するための有効な実験手法ですが、原子レベルの実験は困難でした。当研究室では微小電気機械システム(MEMS)技術を活用し、原子分解能その場荷重負荷試験システムを開発しています。

◆ 荷重負荷時の原子像とひずみマップ



本結果は当該実験システムを用いて荷重負荷中に撮影した原子像(SrTiO_3)と原子変位に基づいて評価したひずみマップ(ϵ_{xx} , x: 水平方向)を示しています。切欠き部を中心とした引張りひずみが可視化されており、応力集中が生じていることがわかります。

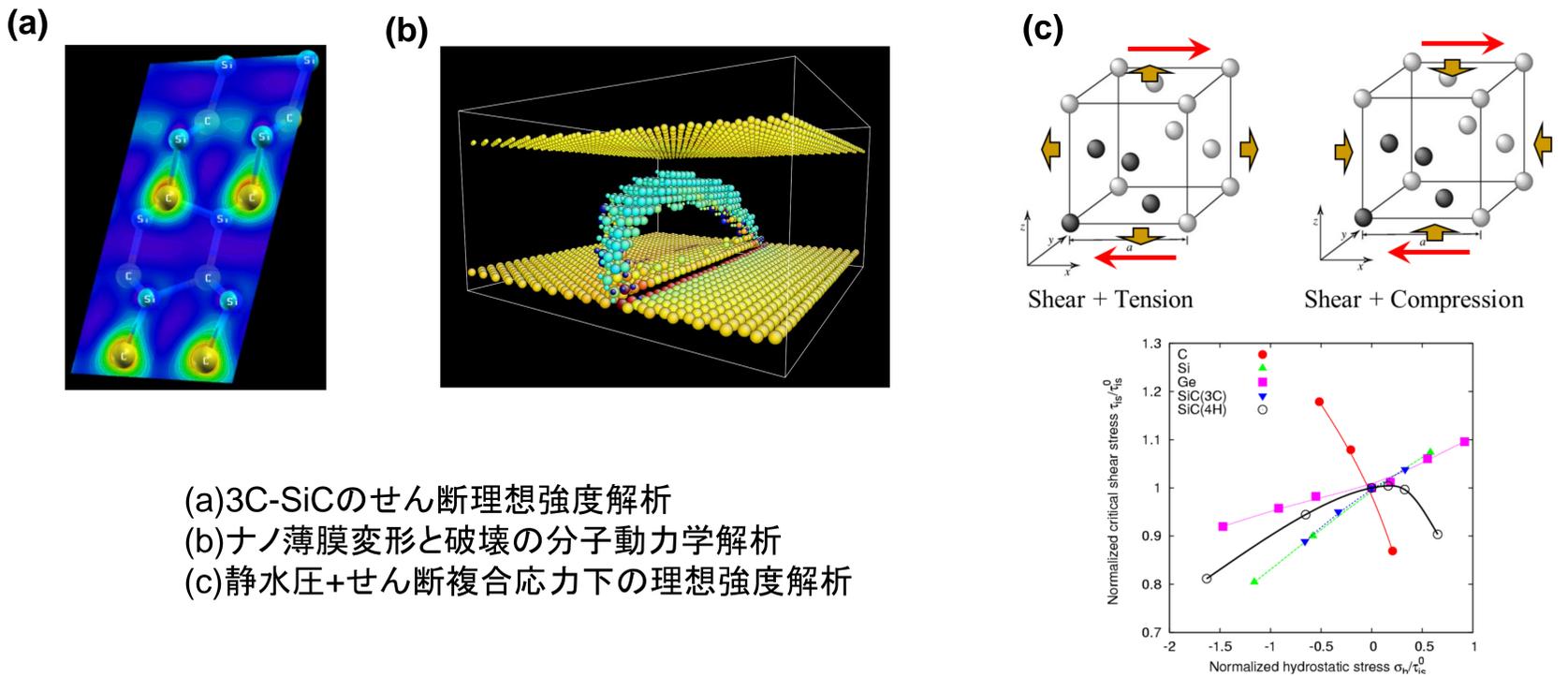
References

- E. Tochigi, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, *Crystals* **8**, 133-1-14 (2018).
- E. Tochigi, Y. Kezuka, A. Nakamura, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, *Nano Lett.* **17**, 2908 (2017).
- E. Tochigi, H. Matsuhata, H. Yamaguchi, T. Sekiguchi, H. Okumura, Y. Ikuhara, *Philos. Mag.* **97**, 657(2017).
- E. Tochigi, B. Miao, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, *Acta Mater.* **216**, 117137, (2021).
- T. Sato, E. Tochigi, T. Mizoguchi, Y. Ikuhara, H. Fujita, *Microelectro. Eng.* **164**, 43 (2016).
- E. Tochigi, T. Sato, N. Shibata, H. Fujita, Y. Ikuhara, *Microsc. Microanal.* **25**, S2, 770 (2019).
- E. Tochigi, T. Sato, N. Shibata, H. Fujita, Y. Ikuhara, *Microsc. Microanal.* **26**, S2, 1838 (2020).

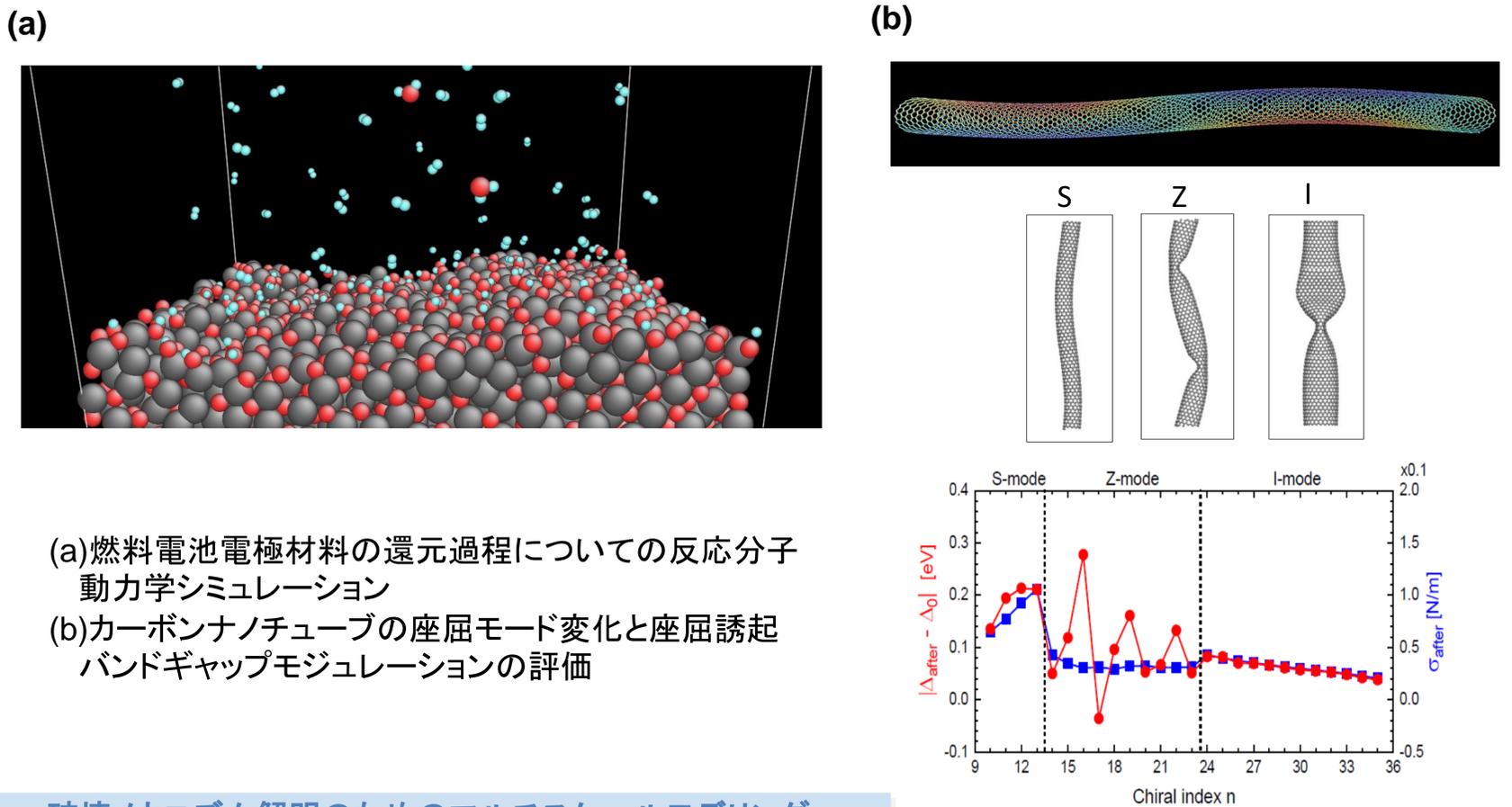
ナノ・マイクロ域の機械物理とマルチスケール解析

- 電子・原子・分子モデルシミュレーションによるナノ・マイクロスケールの強度および物性解析
- 粗視化粒子モデルおよび有限要素法シミュレーションによるポリマー材料の破壊メカニズム解明
- 深層学習を用いたマルチスケールモデリングと疲労メカニズムの解明

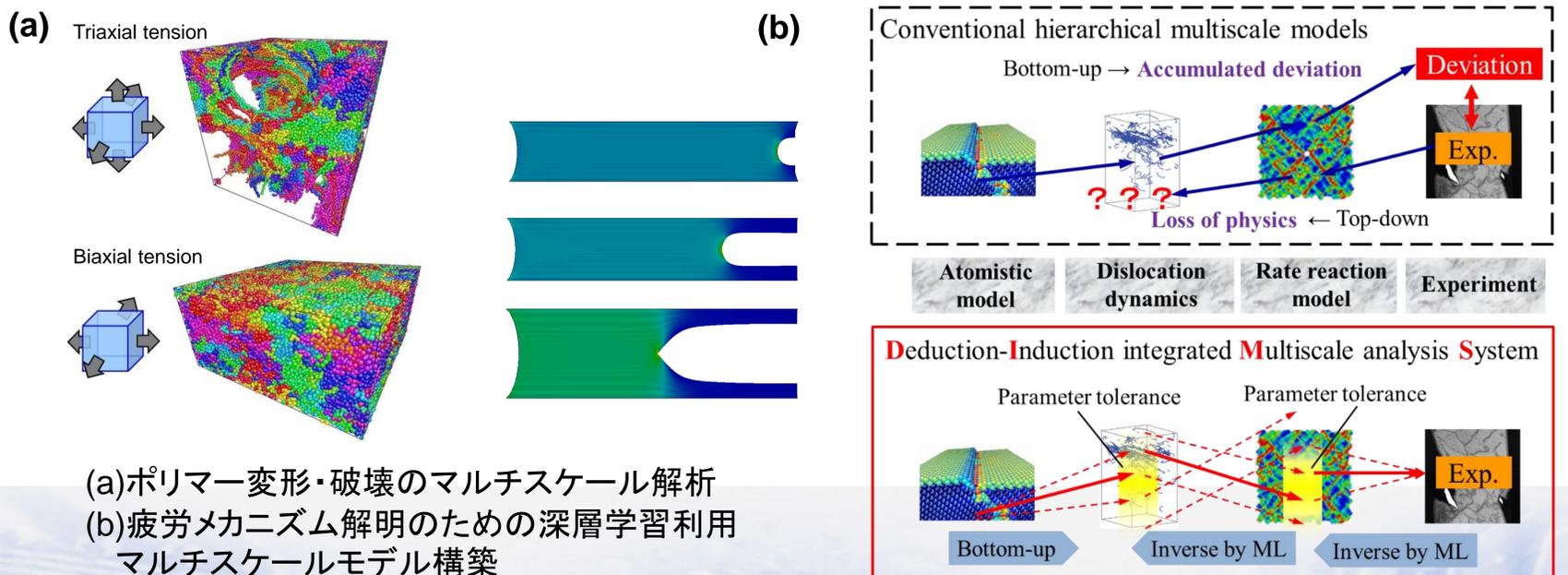
固体結晶の変形・破壊の原子レベル解析



機械と物理のインタープレイ: ナノ・マルチフィジックスの解明



破壊メカニズム解明のためのマルチスケールモデリング

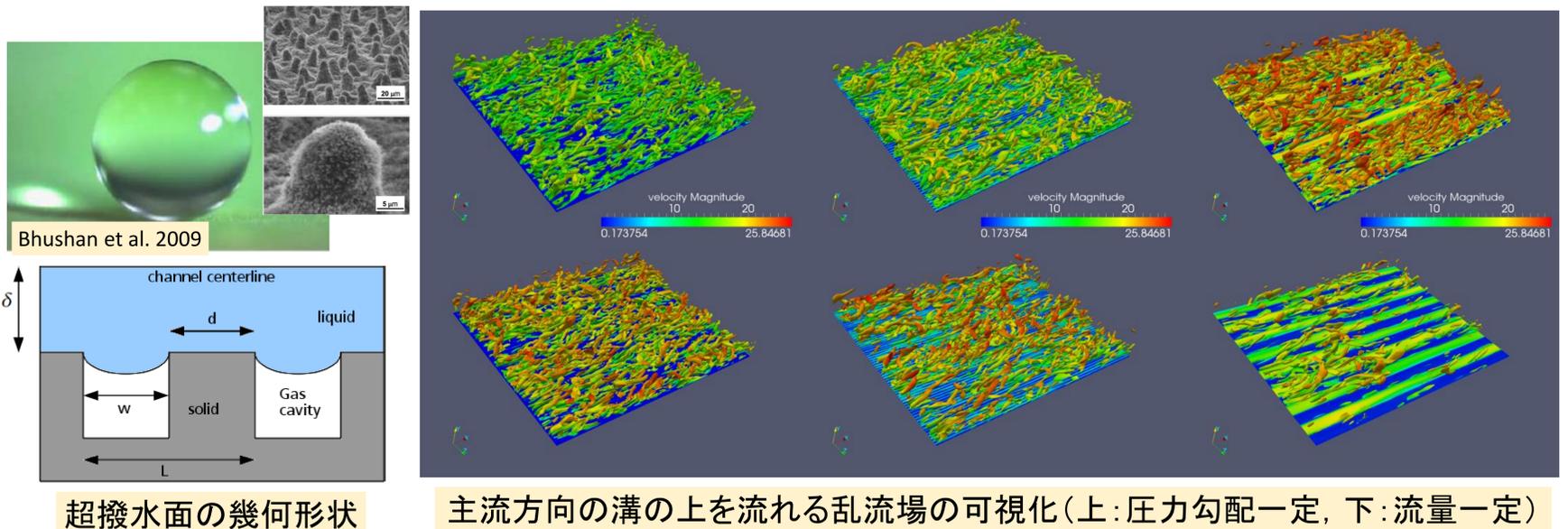


長谷川洋介研究室

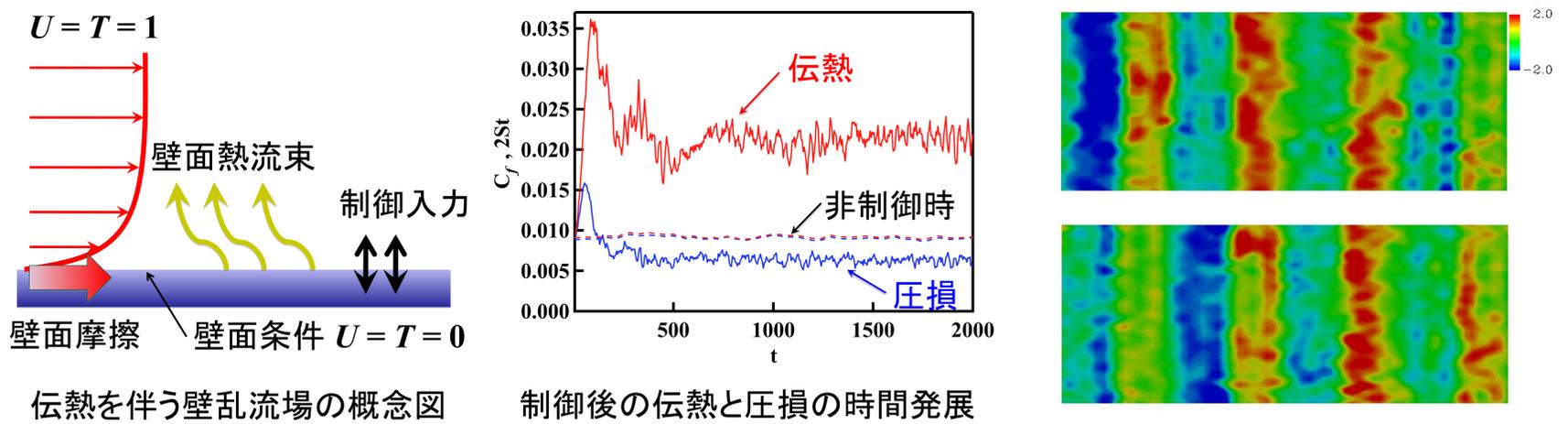
流れの予測と制御

- 摩擦抵抗低減のための壁乱流の最適制御
- 革新的対流伝熱促進のための制御アルゴリズムの開発
- エネルギー機器高効率化のための3次元複雑形状の決定論的最適化
- 有限のセンサー情報に基づく、乱流及びスカラー場の最尤推定

超撥水面における乱流摩擦抵抗低減

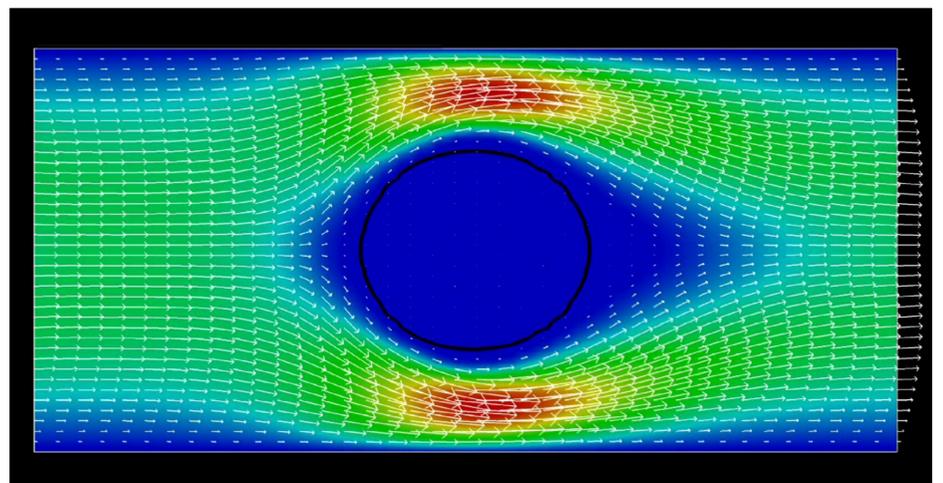
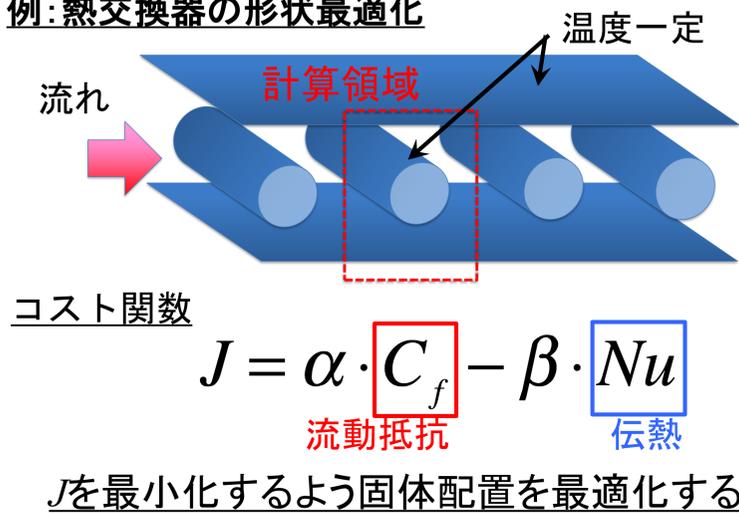


壁乱流における伝熱促進と抵抗低減の同時達成



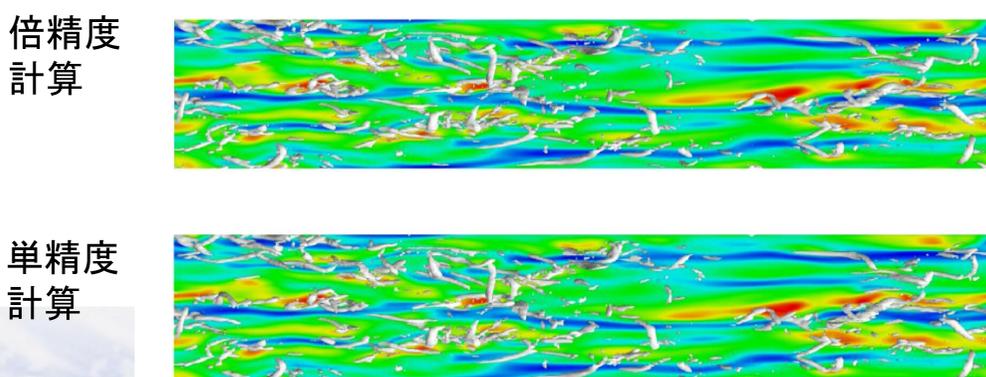
エネルギー機器設計のための3次元複雑形状の決定論的最適化

例: 熱交換器の形状最適化

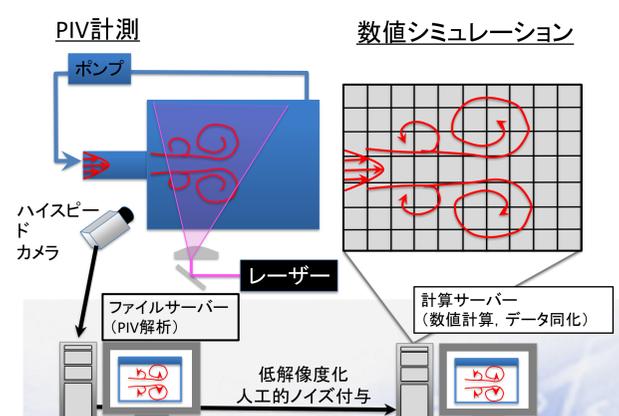


有限のセンサー情報に基づく流れとそれに付随するスカラー場の最尤推定

なぜ天気予報は難しいか ~カオス, 非線形~



実験と数値計算の融合による流れの推定



器官・組織・細胞 マルチスケール・マルチフィジックス シミュレーション

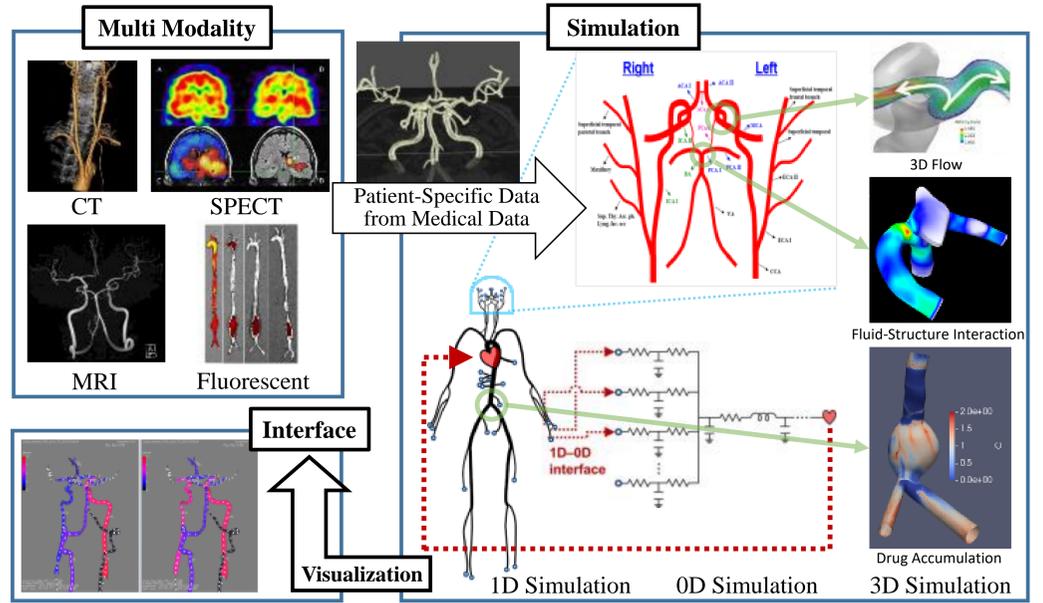
概要

医用画像とシミュレーションを組み合わせることにより、臨床現場で必要とされている血行動態を示す情報を提供

Multi Modality: CT, MRI, SPECT, 超音波流速計などの医用データ

Simulation: OD, 1D, 3Dを組み合わせたマルチスケール解析、流体構造連成や化学種の輸送を解くマルチフィジックスシミュレーション

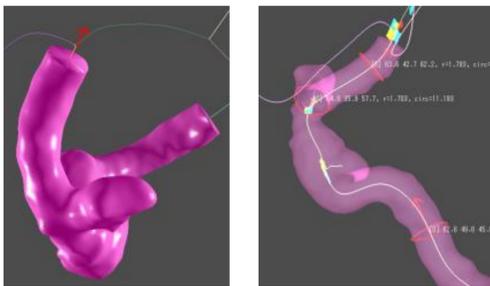
Interface: 血行動態の効果的な可視化システム



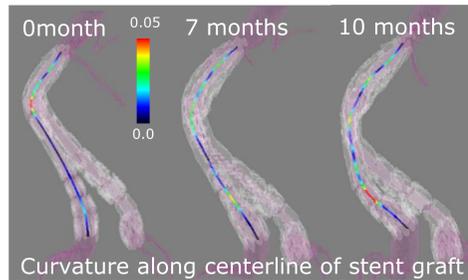
マルチスケール・フィジックスシミュレーションの概要

V-Modeler

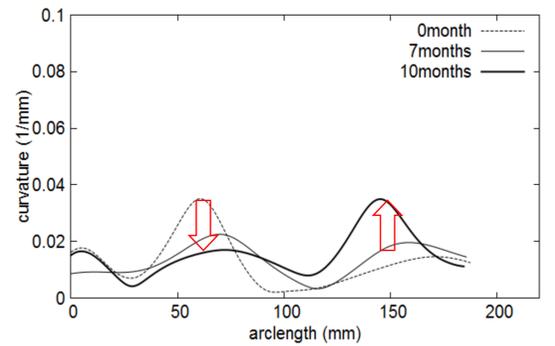
医用画像からの血管およびステントグラフトの3次元形状の経時変化を調査するためのモデリングシステム



血管内腔・動脈瘤のセグメンテーション
表面の再構築、中心線抽出



形状パラメータ抽出
(長さ、径、曲率、捩れ率)



腹部大動脈瘤内ステントグラフト形状の経時変化の定量化

マルチスケール血流解析

患者固有の脳循環に対する1次元-0次元血流解析プログラム
全身循環の影響を考慮した解析が可能

1次元解析(長さ, 太さ)

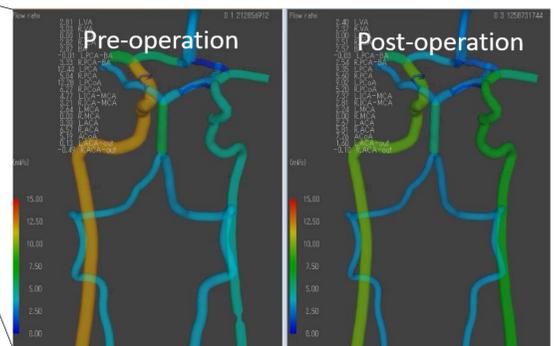
- ・全身の83本の主要血管をモデル化
- ・Lax-Wendroff法を使用

0次元解析(抵抗, コンプライアンス)

- ・末梢の細動脈、静脈、心臓をモデル化
- ・4次のRunge-Kutta法を使用



1次元-0次元
全身循環モデルの概念図



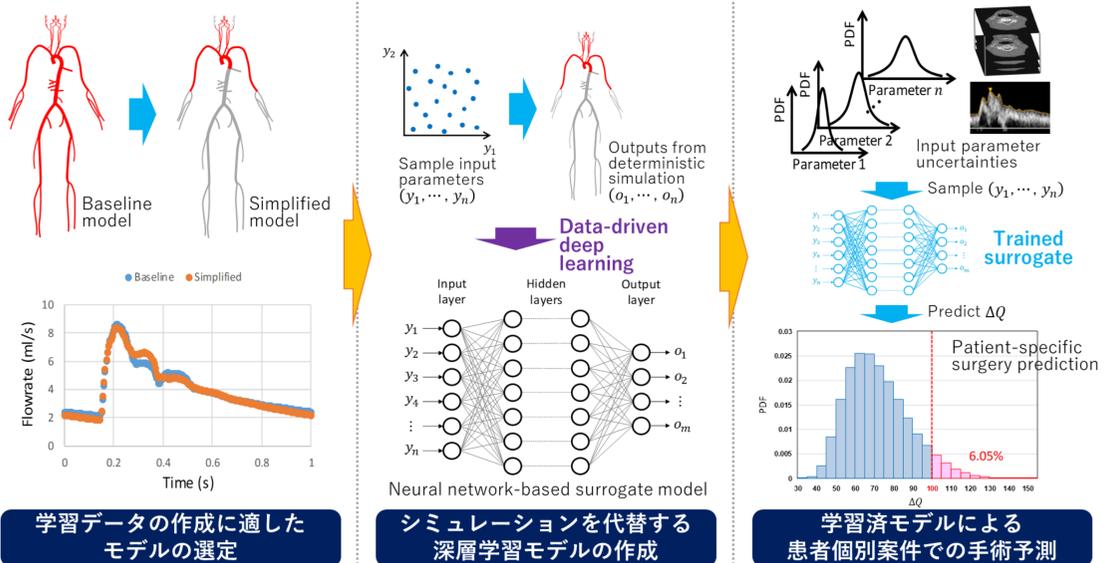
1次元-0次元血流解析の
3D可視化システムの開発

シミュレーションと深層学習の統合による予測医療

血流シミュレーションの臨床応用に
向けた課題解決

医用データやモデルパラメータの不確かさを考慮したデータセットを用いて機械学習を行うことにより、任意の解析条件に対して血流循環を迅速に予測する「代理モデル」を構築

- ・予測結果のばらつきを確率分布として評価
- ・一般的なPCでも即時に行えるような、実用性に富む手法開発

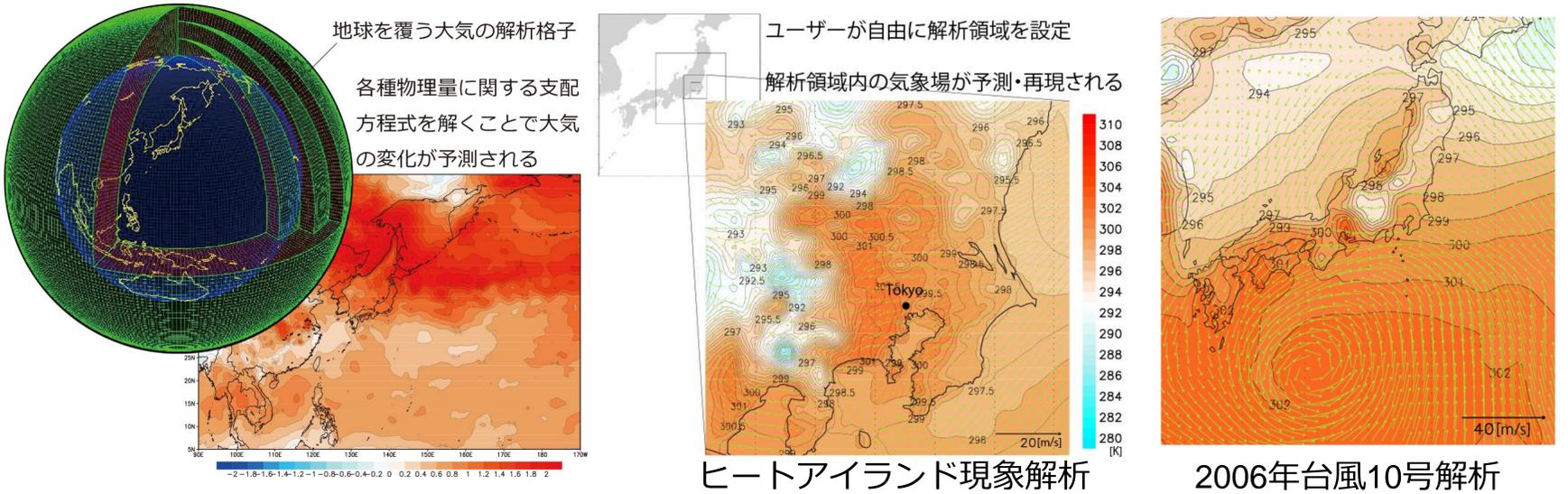


未来の都市空間設計のための建築・都市の熱・空気環境予測

- ▶ 人体周辺から都市広域までの様々なスケールにおける気候モデルを開発
- ▶ サステナブルな都市の実現に向けた熱・空気環境予測ツールを構築

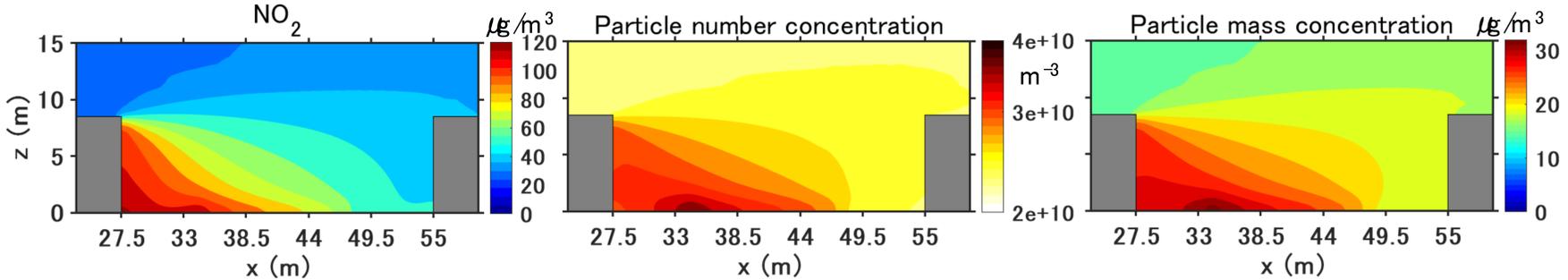
WRFを用いた極端気象の再現

- ▶ 全球気候モデルにより予測された将来気候を領域気象モデルにより力学的ダウンスケーリングを行うことで建築熱負荷計算のための近未来気象データを作成



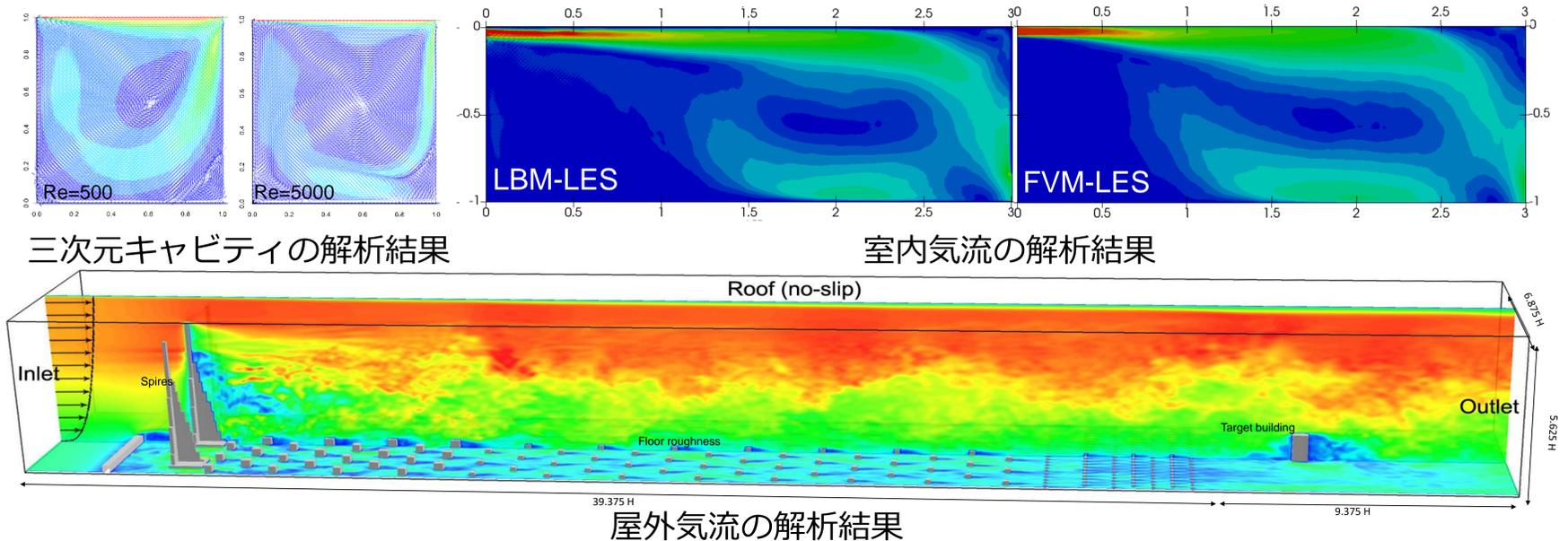
化学反応・粒子の動力学・CFD 連成解析によるストリートキャニオンにおける汚染物質の拡散予測

- ▶ ガスとエアロゾルの化学反応を解析するボックスモデルを数値流体力学と連成し、交通排出による汚染物質の拡散を解析



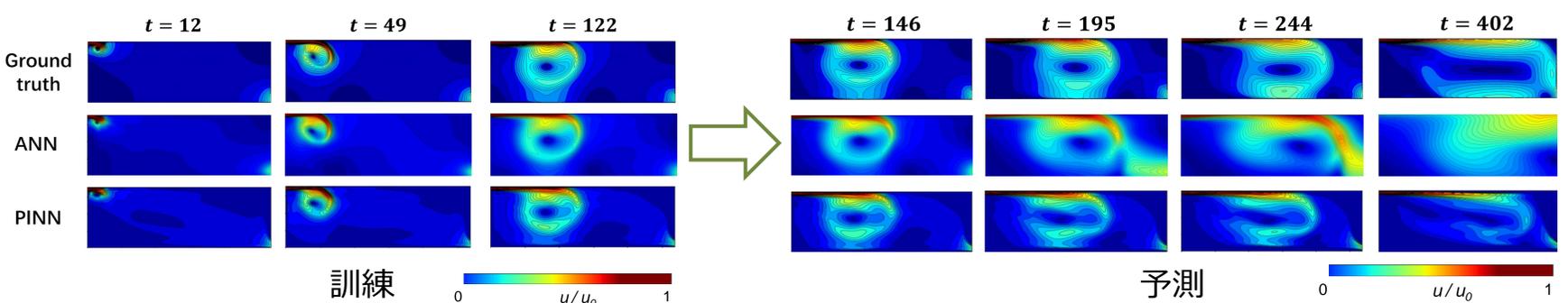
格子ボルツマン法による建築風環境の解析

- ▶ 格子ボルツマン法により、複雑かつ大規模な建築と市街地流れ場に関しても高速なLESを解析



物理情報ニューラルネットワーク(PINN)による流れ場の非定常予測

- ▶ 物理ルール埋め込みによる建築室内熱気流環境予測AIモデルの合理化

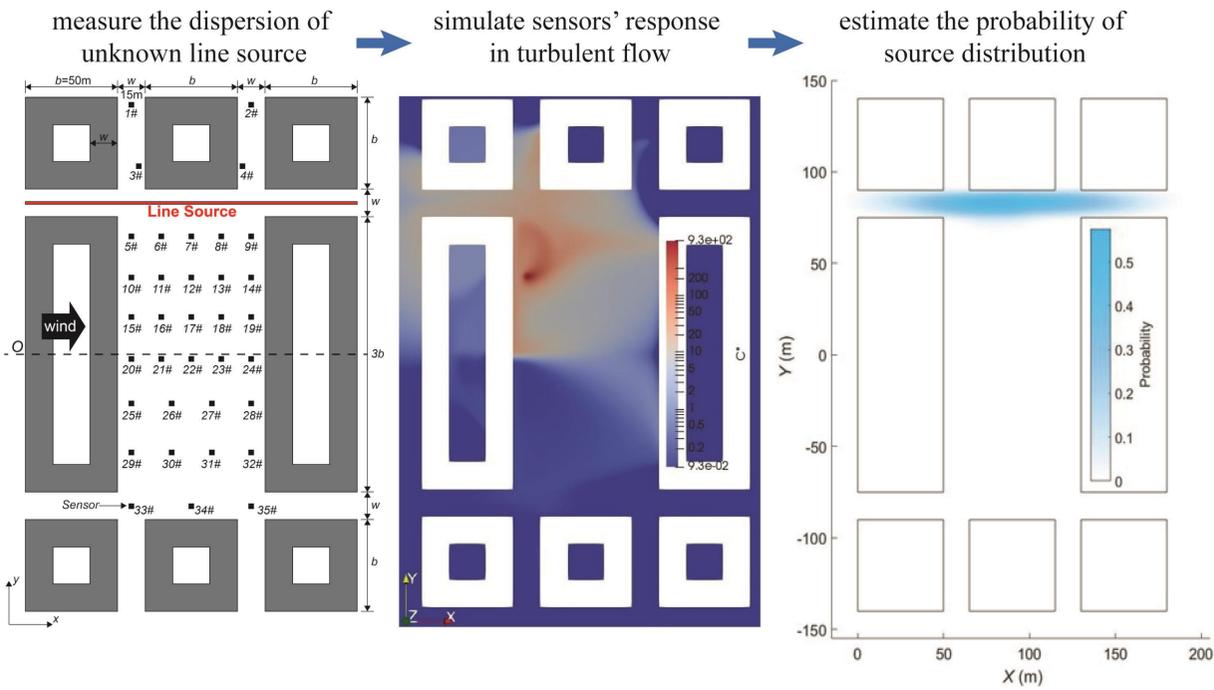


菊本英紀研究室

シミュレーションとセンシングを融合した環境解析

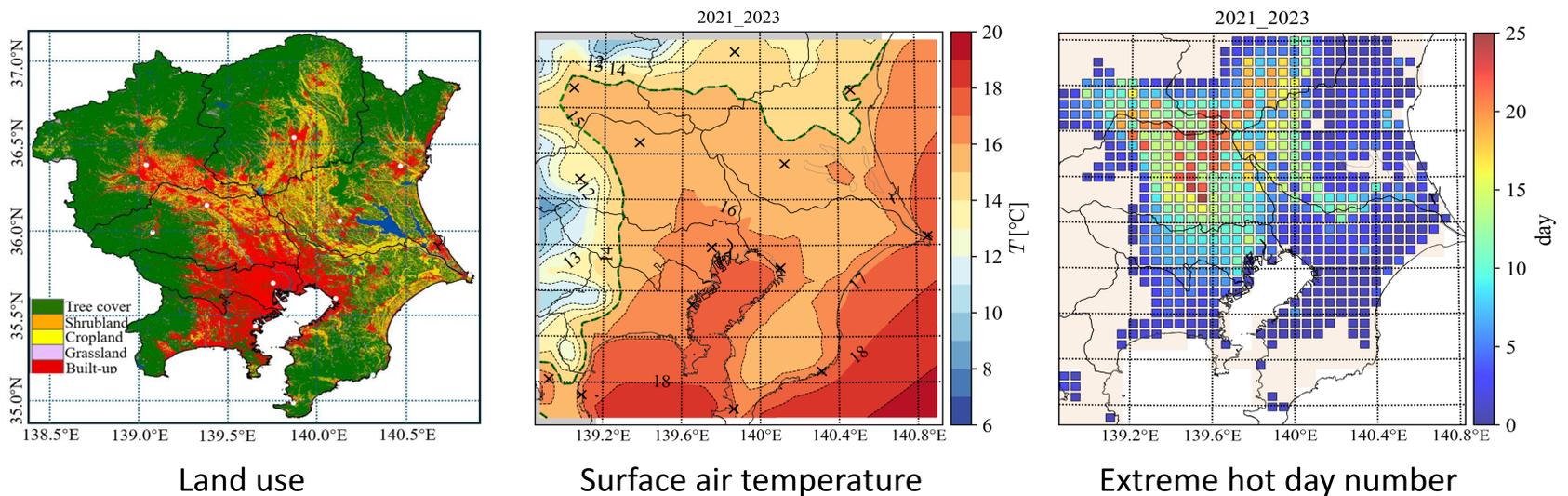
- 建築・都市空間における環境情報の高度化や解析効率化を目的とした研究を行っている。
- 主に空気の流れとその質に関して、シミュレーションやセンシング、またそれらを融合した解析技術を開発している。
- キーワード: 数値流体解析(CFD), 気象解析, 逆解析, データ・フュージョン, ベイズ推定, 機械学習

空気汚染物質の未知発生源同定



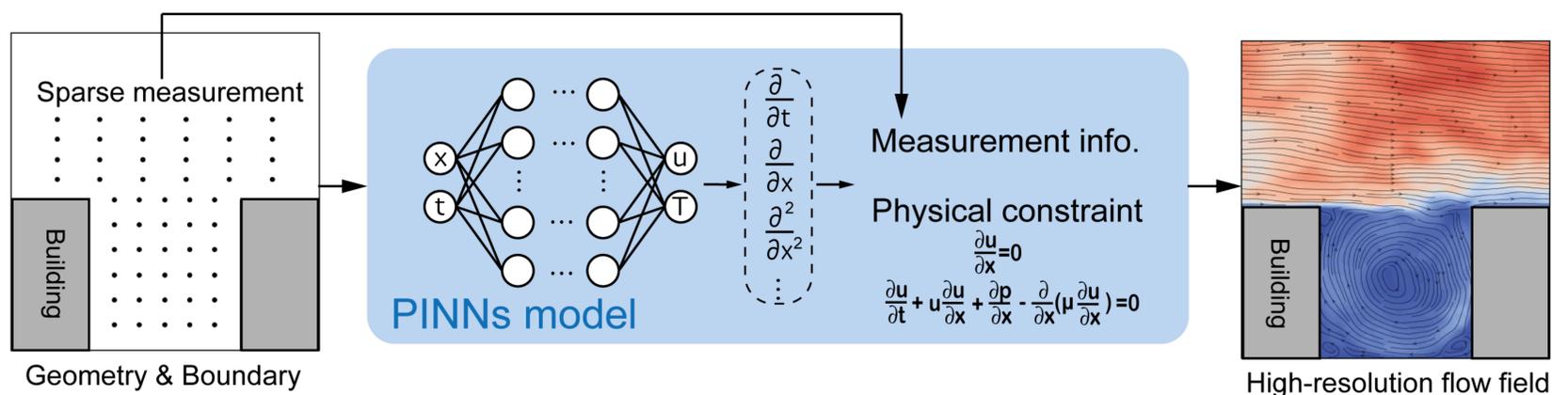
数値流体解析・計測データおよび統計解析(ベイズ推定)を応用した市街地空間における汚染物質発生源同定

都市の長期環境変化と健康影響の推定



局地客観解析データと観測データを融合した都市環境の分析

都市内気流の迅速かつ高空間解像度な分布推定



物理モデル・センシングデータと機械学習モデルによる市街地気流の分布推定

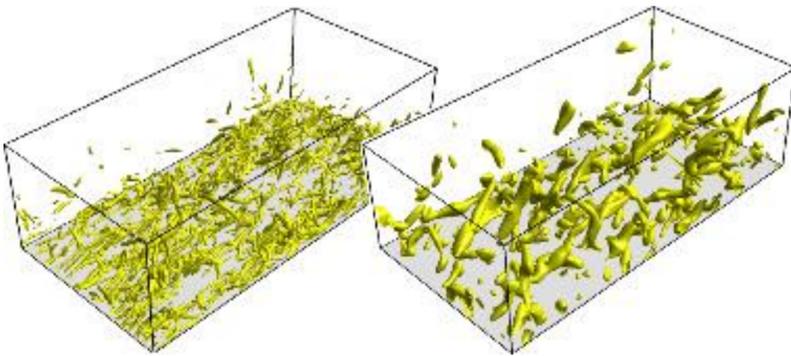
半場藤弘研究室

乱流の物理とモデリング

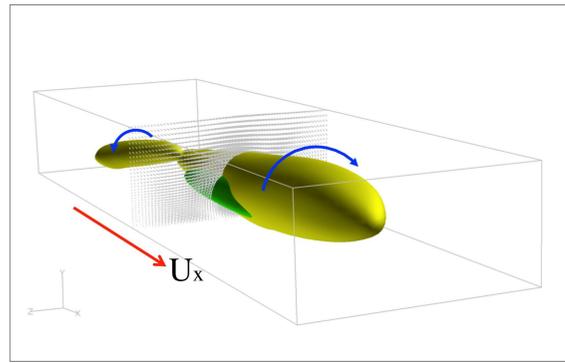
- 乱流の非局所輸送の解析とモデリング
- 回転・旋回流の数値シミュレーション
- 電磁流体乱流の物理とモデリング

乱流の非局所輸送の解析とモデリング

チャンネル乱流における非局所輸送の解析

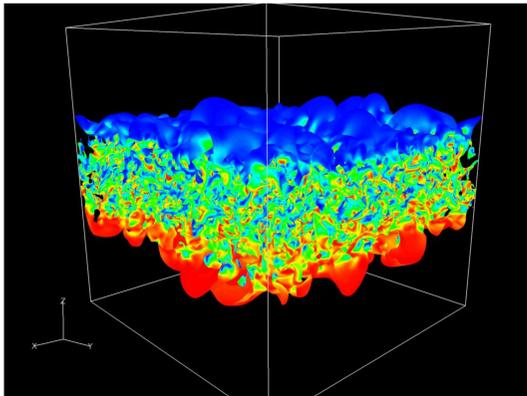


スケール空間エネルギー密度に伴う渦構造
左図: 小スケールの渦, 右図: 中スケールの渦

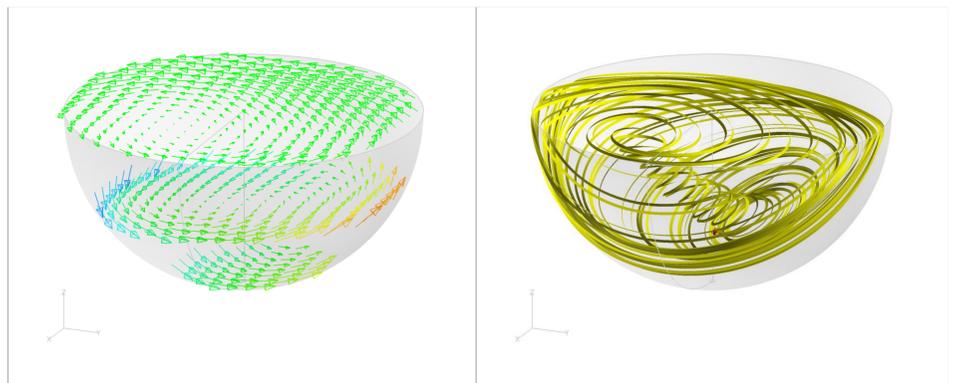


条件付き平均で抽出された壁近くの渦構造

回転・旋回流の数値シミュレーション

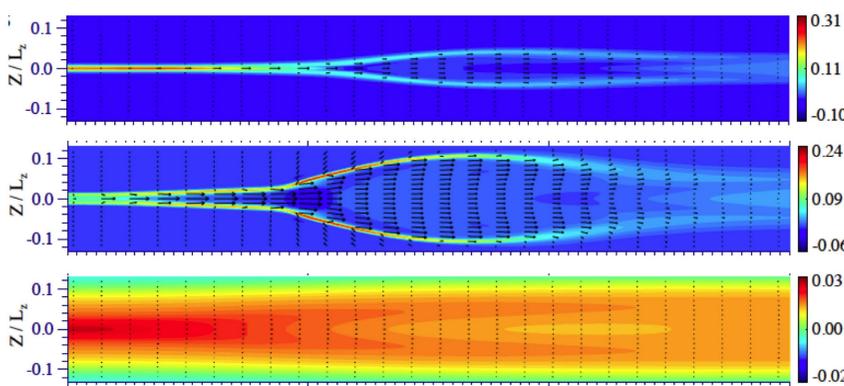


回転系の乱流拡散の運動エネルギー

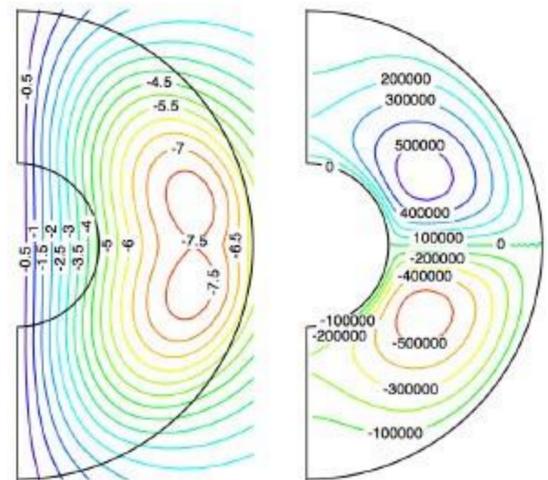


回転式の蒸留装置内の流れの数値解析
左図: 速度ベクトル, 右図: 流線

電磁流体乱流の物理とモデリング



磁気リコネクションのジェットの電流密度と速度ベクトル



回転球殻の磁場と乱流ヘリシティの分布

佐藤文俊研究室

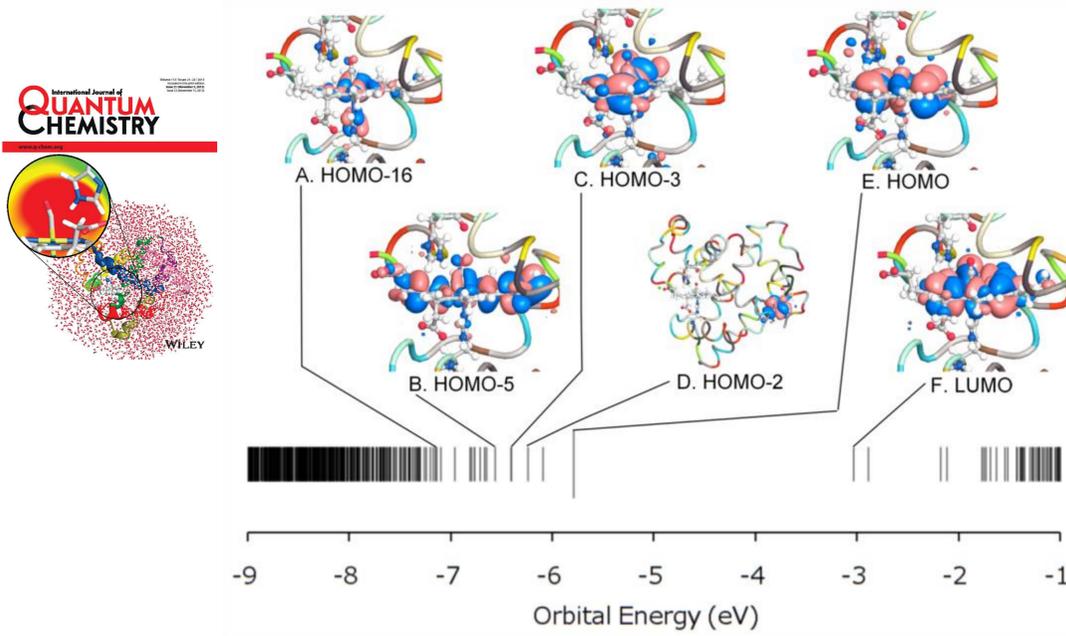
教授 佐藤 文俊
助教 平野 敏行

De-501-503

生体分子やナノ分子の革新的なシミュレーション

- タンパク質などのナノサイズの分子が持つ**全ての電子の正準分子軌道**が計算できる、世界でも類を見ない量子化学計算ソフトウェア“ProteinDF/QCLO”を開発 (<https://proteindf.github.io/>)。
- DFTに基づく第3世代正準分子軌道法や自動計算システムの研究開発。
- 基礎研究のみならず、新規酵素や薬剤、材料設計などの応用研究も行っています。

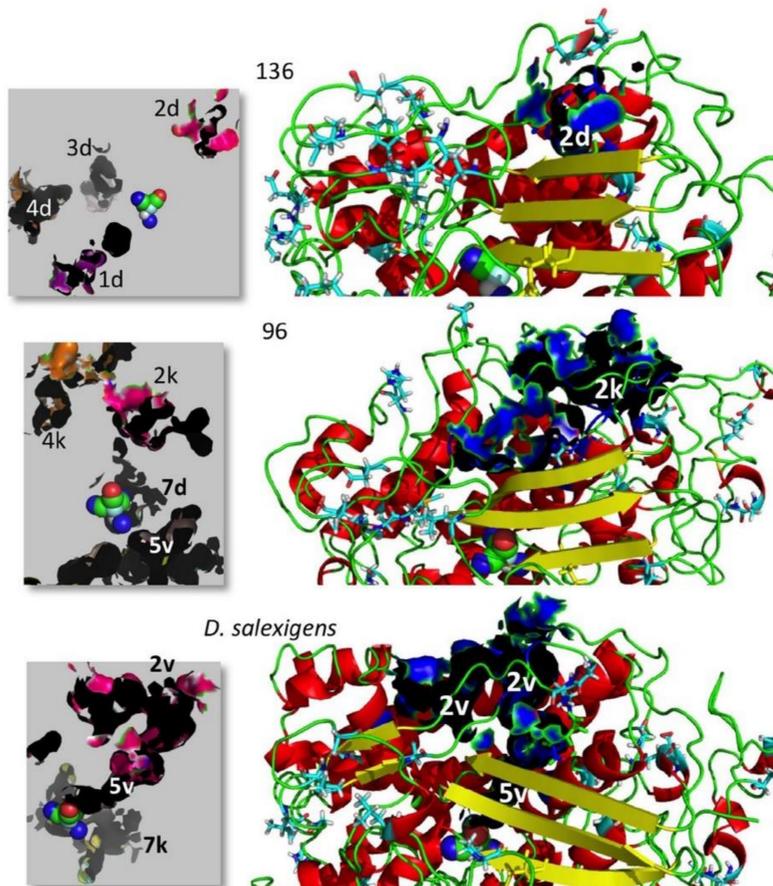
ProteinDFによるタンパク質全電子計算



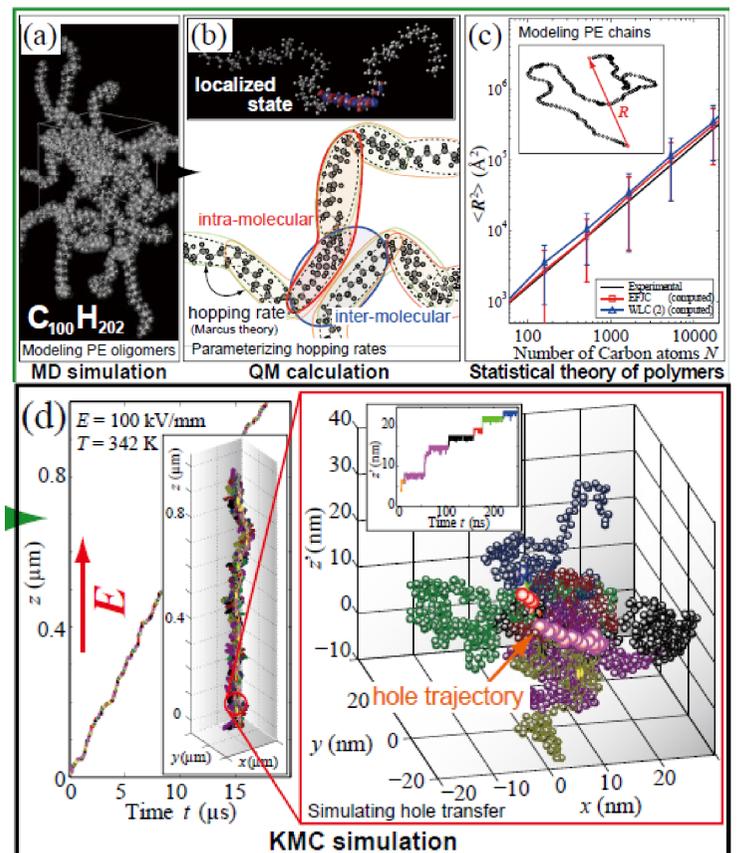
金属タンパク質の全電子計算

プロトンチャンネルの第一原理MD

各種応用研究



ヒドロゲナーゼのガスキャビティ構造予測



絶縁体材料の電子移動度解析



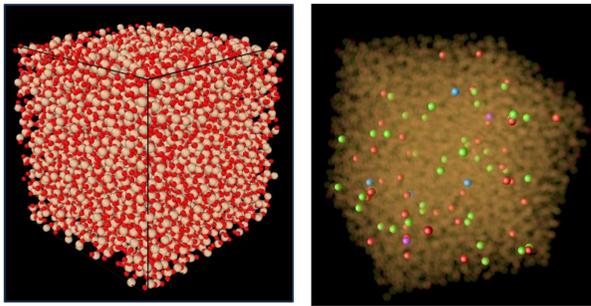
各種教科書

複雑流体の非線形・非平衡現象

- ガラス・アモルファス物質のローダイナミクス、非ニュートンレオロジー
- コロイド、粉体、バクテリア懸濁液における流体力学的相互作用の役割

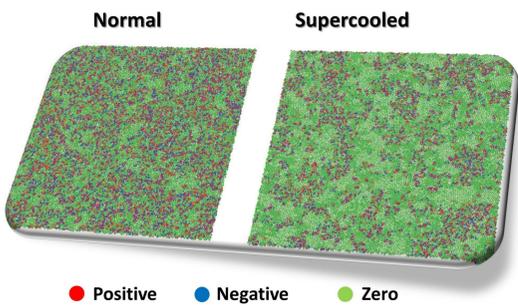
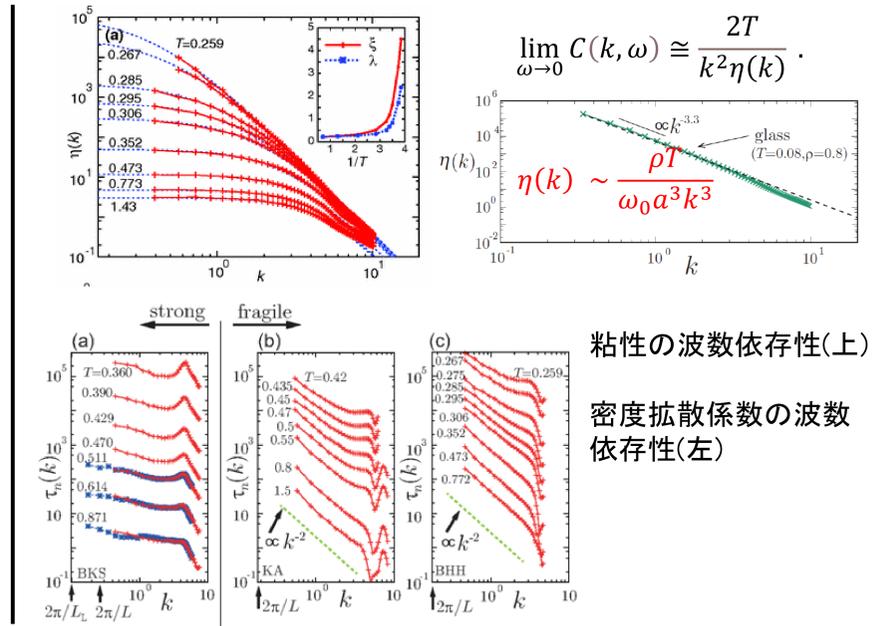
ガラス・アモルファス物質のローダイナミクス、非ニュートンレオロジー

ガラス化とローダイナミクスの起源の探求



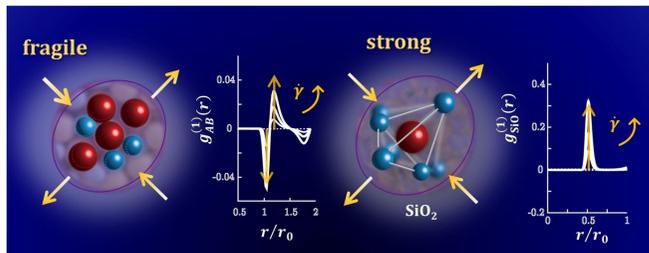
緩和特性の抽出
(シリカ (strong液体))

過冷却液体、ガラスにおける非局所輸送

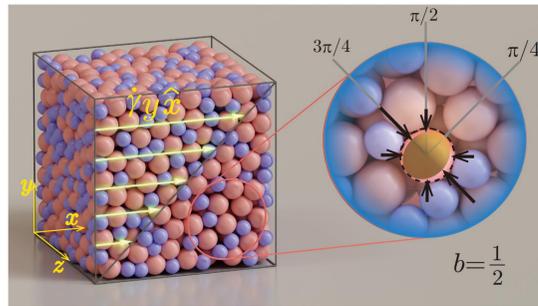


協同的な密度交換
(fragile液体)

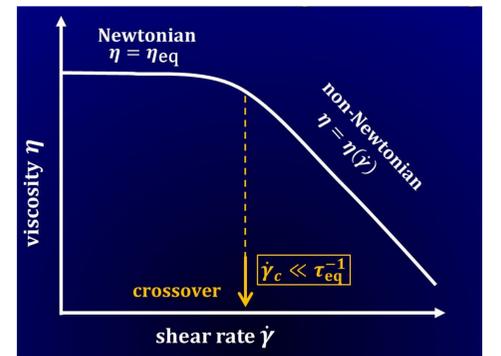
粘性の波数依存性(上)
密度拡散係数の波数依存性(左)



剪断下の粒子配置
(左: fragile液体、右: シリカ (strong液体))

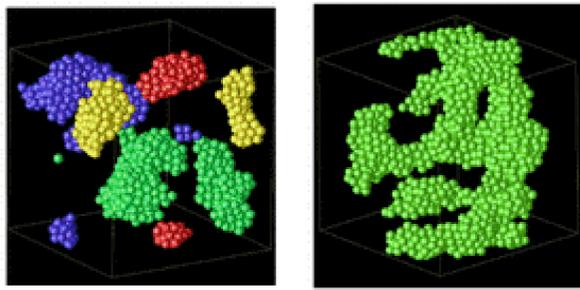


上: 剪断流下のフラジイル液体における有効体積の概念図
右: 有効体積描像に基づく非ニュートンレオロジーの理論予測

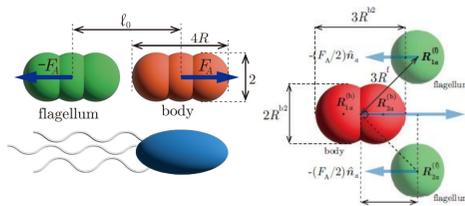


$$\hat{\tau}_\alpha(n, T, \dot{\gamma}) = \tau_\alpha^{(eq)}(n(1 - c_g \hat{\gamma} \hat{\tau}_\alpha), T)$$

コロイド、粉体、バクテリア懸濁液における流体力学的相互作用の役割

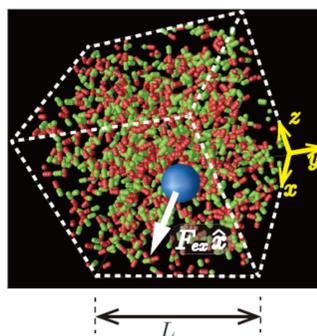


コロイド懸濁液のゲル化: 流体力学的相互作用なし(左)と流体力学的相互作用あり(右)

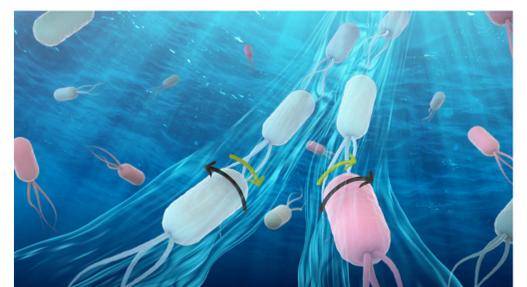
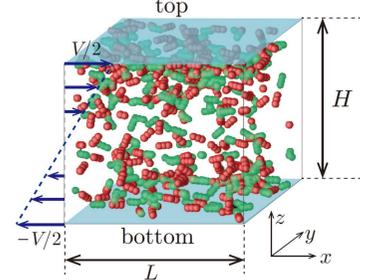


← 自己推進性を備えた微生物のミナルモデルの例
左: pusher型スイマー(大腸菌など)
右: puller型スイマー(クラミドモナスなど)

マイクロレオロジー

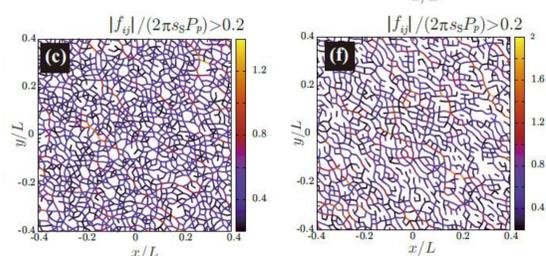


マクロレオロジー



流体力学的相互作用が引き起こす異常粘性(概念図)

剪断下の粉体懸濁液における溶媒散逸の空間相関



粉体懸濁液における力鎖
左: 低剪断率
右: 高剪断率