











東京大学生産技術研究所



H. Ikeno and T. Mizoguchi, Microscopy, 66 (2017) 305.
T. Mizoguchi et al., Ultramicroscopy 180 (2017) 93.
K. Tomita et al., Ultramicroscopy 178 (2017) 105
H. Katsukura et al., Ultramicroscopy 178 (2017) 88
K. Tomita et al., J. Phys. Chem. C 120 (2016) 9036
K. Kubobuchi et al., J. Appl. Phys., 120 (2016) 142125
Y. Matsui et al, Chem. Phys. Lett. 649 (2016) 92
T. Miyata et al., Microscopy 63 (2014) 377
K. Kubobuchi et al., Appl. Phys. Lett., 104 (2014) 053906
Y. Matsui et al., Sci. Rep., 3 (2013) 3503
T. Mizoguchi et al., Appl. Phys. Lett., 99 (2011) 233109
H. Ikeno et al., J. Phys. Chem. C, 115 (2011) 11871
T. Mizoguchi, et al., Micron, 41 (2010) 695.

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

<u>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</u>

転移学習により人工知能が過去の経験を学習

人工知能技術を活用することで 界面構造を決定するスピードを高速化



Image: State Stat

<u>資源探索分野における人工知能技術を利用することで</u>



Interface structure can be predicted using predictor

東京大学生産技術研究所



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



RCMCMC法による変態挙動の支配的因子の抽出



∘ exp

710

nsfor

650

670

690

Temperature, °C

100

50

LF

 $\overline{}$

ECCI法による転位のその場観察

Microstructure generation Property estimation from CPFFT Model validation 170 180 190 200 Simulated yield strength, MPa 2-point spatial correlations Principal component analysis (PCA) Reconstruction of important features PC1 x_1 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

> May 2025 http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/

∎Evidence

34

PF

LF+FSP

17

PF+FSP



- > 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 -Al₂O₃中の転位ネットワークと転位コア構造

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

<u>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。</u> <u>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</u> 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。

<u>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</u> <u>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</u> 素のイオン価に依存した偏析挙動が見られています。

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

変形双晶は結晶債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 <u>微鏡ナノインデンテーション法によりα-Al₂O3中の変形双晶の消失過程を捉えたも</u> のです。

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りました。

原子分解能その場荷重負荷システムの開発

◆ 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。

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).

◆ 荷重負荷時の原子像とひずみマップ

0.20 0.10 0 -0.10 -0.20

<u>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(SrTiO3)</u> <u>と原子変位に基づいて評価したひずみマップ(εxx</u>, x: 水平方向)を示してい ます。切欠き部を中心とした引張ひずみが可視化されており、応力集中が生じ <u>ていることがわかります。</u>

- 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).

May 2025 http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/

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

(b)

(a)燃料電池電極材料の還元過程についての反応分子 動力学シミュレーション (b)カーボンナノチューブの座屈モード変化と座屈誘起 バンドギャップモジュレーションの評価

Chiral index n

-0.5

36

33

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

(b)

(a)ポリマー変形・破壊のマルチスケール解析 (b)疲労メカニズム解明のための深層学習利用 マルチスケールモデル構築

May 2025 http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/

<image/> <text></text>	革新的シミュレー Center for Research on In 吉川暢 HPCIによるCFRP製	ション研究センター novative Simulation Software 安研究室 品設計・製造の高度化	HERBERBOR
 炭素繊維強化プラスチック(CFRP)のマルチスケールシミュレーション 樹脂の正確な非線形強度モデル導入による終極強度の的確な予測 熱硬化・熱可塑樹脂の正確な材料モデルに基づく製造プロセスシミュレーション CFRPのマルチスケールモデリング メゾスケール メゾスケール マクロスケール 			

開発を有機的に連携させるデジタルエンジニアリングプラット フォーム上でマルチスケールシミュレーションによる材料開発、 設計、成形、検査・評価の高度化を展開

<u>材料開発</u>:

<u>成形技</u>術:

・最適なLCP/CFテープ材料設計

<u>設計技術</u>: ・低温衝撃マイクロクラックの予測

·CFRP接合部最適設計

・直径5mのドーム部と直胴部を高速かつ高精度でライナーレス成形するATP 技術およびコンソリデーション(溶融完全一体化)技術

・CFRP直胴部/ドーム部、マンホール/CFRPドーム部、CFRPタンク/推力伝達 部材の接合技術

検査・評価技術:

・ATPインプロセスで製造誤差を検知

・CFRPの強度シミュレーションおよび成形シミュレーションに基づき適切な許容誤 差設定

・CFRP直胴部/ドーム部、マンホール/CFRPドーム部、CFRPタンク/推力伝達 部材接合部の非破壊検査技術

接合構造設計

成形プロセスシミュレーション

金属リングによりCFRP直胴部およびドーム部を 接合したセルフシール構造

ATP成形シミュレーションモデル

東京大学生産技術研究所

革新的シミュレーション研究センター

Center for Research on Innovative Simulation Software

De-202

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
- > 有限のセンター情報に基づく、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

超撥水面の幾何形状

主流方向の溝の上を流れる乱流場の可視化(上:圧力勾配一定,下:流量一定)

壁乱流における伝熱促進と抵抗低減の同時達成

伝熱を伴う壁乱流場の概念図

制御後の伝熱と圧損の時間発展

最適制御入力分布 (赤:吹き出し,青:吸い込み)

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

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

東京大学生産技術研究所

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)

arclength (mm) 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

.6.49.6

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

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

May 2025 http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/

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

大岡龍三研究室

- ▶ 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

東京大学生産技術研究所

革新的シミュレーション研究センター

Center for Research on Innovative Simulation Software

Ce-B08

シミュレーションとセンシングを融合した環境解析

菊本英紀研究室

- ▶ 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

Geometry & Boundary

High-resolution flow field

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

東京大学生産技術研究所

- ▶ 乱流の非局所輸送の解析とモデリング
- ▶ 圧縮性乱流・回転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

圧縮性乱流・回転流の数値シミュレーション

乱流レイリー流れの渦構造

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ーの分布

May 2025 http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/

革新的シミュレーション研究センター

Center for Research on Innovative Simulation Software

佐藤文俊研究室

生体分子やナノ分子の革新的な量子シミュレーション

▶ 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/QCLObot" を開発 (https://proteindf.github.io/)。

E. HOMO

F. LUMO

- ▶ 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。
- ▶ 量子コンピューティングの基礎研究も行っています。

ProteinDFによるタンパク質全電子計算

プロトンチャネルの第一原理MD

応用研究・量子コンピューティング

ヒドロゲナーゼのガスキャビティ構造予測

量子コンピュータによる化学反応シミュレータの開発

東京大学生産技術研究所

ガラス化とスローダイナミクスの起源の探求

過冷却液体、ガラスにおける非局所輸送

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

上: 剪断流下のフラジャイル液体にお 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

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

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 微生物のミニマルモデルの例 **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)

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

流体力学的相互作用が引き起こす異常粘性 (概念図)

May 2025 http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/