

# 計算材料科学におけるデータ科学と マルチスケール・シミュレーション

東北大・理・物理 川勝年洋

## 川勝年洋 自己紹介

- 1988年 京都大学大学院工学研究科数理工学専攻  
博士後期課程 単位認定退学  
「発熱反応を伴う分子動力学シミュレーション」
- 1988年 九州大学理学部物理学科 助手  
「高分子系の相転移現象の連続場の理論」
- 1989年 工学博士（京都大学）
- 1994年 東京都立大学理学部物理学科 助教授  
「相転移ダイナミクス」
- 1998年 名古屋大学大学院工学研究科計算理工学専攻 助教授  
「高分子材料設計プラットフォーム開発」（OCTA）
- 2001年 東北大学大学院理学研究科物理学専攻 教授  
「複雑流体のマルチスケールシミュレーション」  
（超々PJ、ポスト「京」PJ、SIP、CREST等）  
「計算物質科学人材育成」（PCoMS）

現在に至る

# 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) (代表: 久保教授)

Professional development Consortium for Computational Materials Scientists



## 単一の学問領域を超え、材料開発の階層を超える人材の育成

### 次世代研究者育成事業 (NPD事業)

Next Generation Professional Development

次世代の計算物質科学分野のグローバルアカデミック  
リーダーとなる若手研究者(助教相当以上)の育成と支援

### イノベーション創出人材育成事業 (IPD事業)

Innovative Professional Development

産官学の幅広い分野で、計算物質科学の研究成果・技術の汎用化と  
イノベーション創出のパイオニアとなるDCとPDの育成と支援

**連携プロジェクト** ポスト「京」,  
MI2I (物材機構), 元素戦略プロジェクト,  
データ駆動型材料探査プロジェクト外,  
大型実験施設連携

**連携機関** 東芝, 日産アーク, 日本ゼオン, NEC, 宮城県産業技術総合センター, 金沢大学, 京都大学, 総合研究大学院大学, 豊橋技術科学大学, 名古屋大学,  
(2017以降追加) 富士通研究所, 日立金属冶金研究所, **日本製鉄**

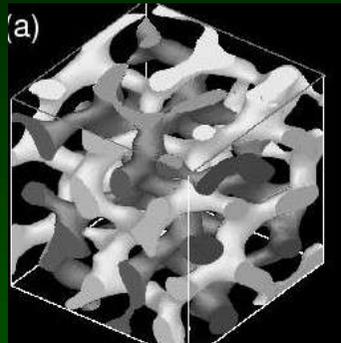
# Microscopic Heterogeneous Structures (in Soft Materials)

## Polymeric flows



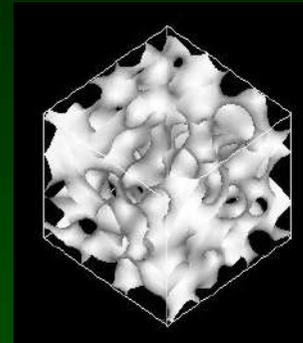
<http://imgur.com/GhX5vaS>

## Mesophases

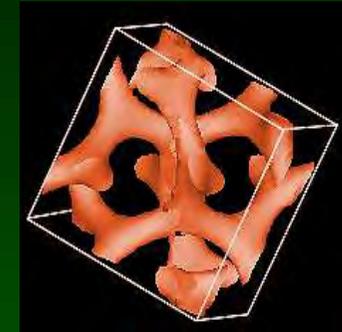


H.Jinnai

## Self-Consistent Field



T.Kawakatsu



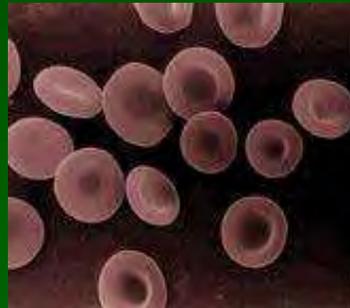
T.Honda

## Blood flows

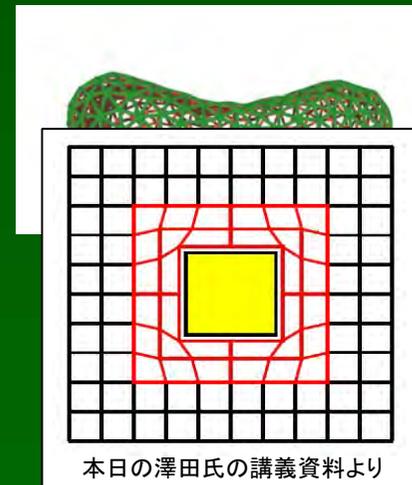


<http://www.menet-hiroshima.jp/kin-en/illness/jyunkan.html>

## Lipid membranes



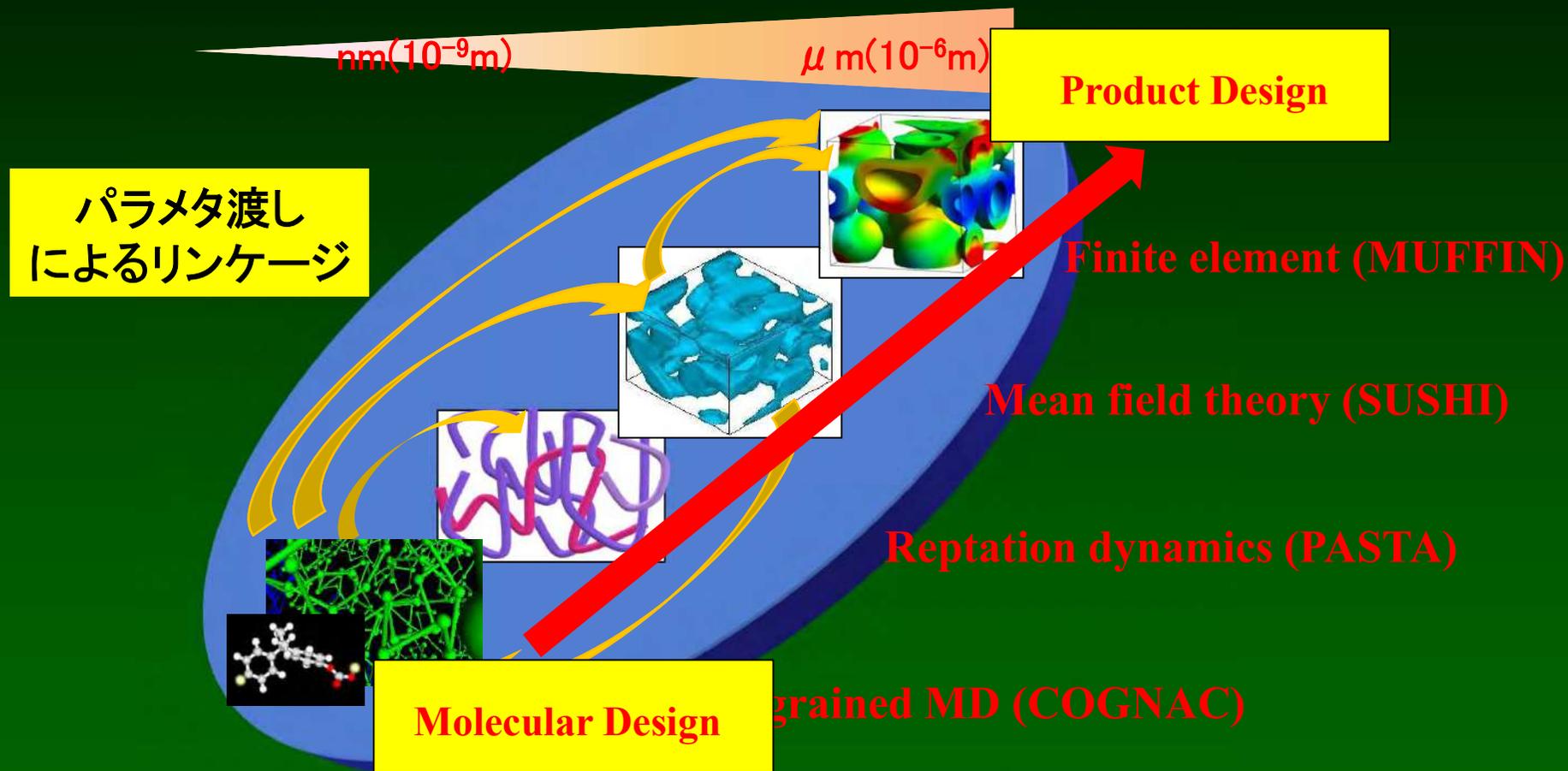
## Surface Element & Phase Field



Q. Du, et al. 2004.

**Key Words: Heterogeneity, Interface  
(also in Hard Materials)**

# Simulation Software OCTA (代表: 土井正男教授) (1998-2002 Nagoya Univ., 2002-JACI)



**Important point: Compatibility between different scales/models**  
(Data assimilation : データ同化)

# Simulation Software OCTA (代表: 土井正男教授) (1998-2002 Nagoya Univ., 2002-JACI)



TEMデータ → 開発ソフト: Image loader → OCTA入力データ (2成分の濃度)

**画像解析ツールの開発**

8bitデータの2成分濃度コンバート  
(ImageLoader)

大規模データ対応プラットフォームの開発: **拡張Gourmetの開発**

等値面解析とSTL出力  
(拡張Gourmet)

ファイル/レコードの異なるデータに対する一斉データ抽出  
(Altool)

**AI連携ツールの開発**

抽出データの可視化とGUI/インタプリタによるデータ整形・学習  
(Altool)

超々PJ報告会資料より

Platform (Gourmet) → **拡張OCTA (超々PJ)**  
データ科学のツール群

**機械学習による物性予測**

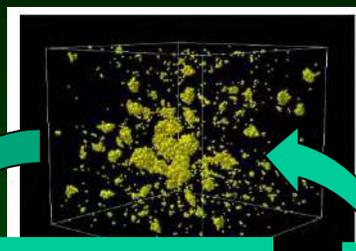
(MUFFIN)

(SUSHI)

(STA)

# ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」(代表:久保百司教授) 複雑流動に関するマルチスケールシミュレーション手法と プラットフォーム(MSSP)の開発

超並列分子動力学(MD)シミュレーション



~ 1  $\mu\text{m}$   
 ~  $10^{10}$  粒子系

マイクロシミュレータ  
 埋込

比較

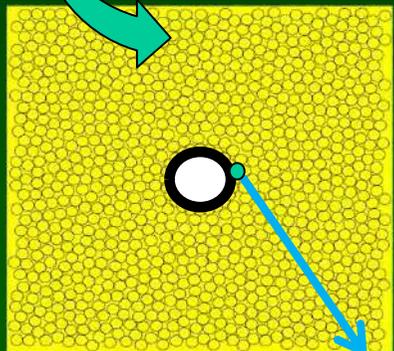
モデル (SPH+MicS)

MSSP

Interface

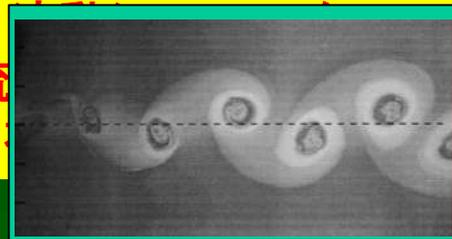
MicS

モデル埋め込み  
 によるリンケージ



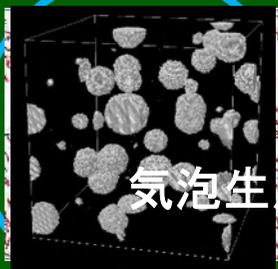
カルマン渦列

一般的なマルチスケール 複雑流動 拘束条件



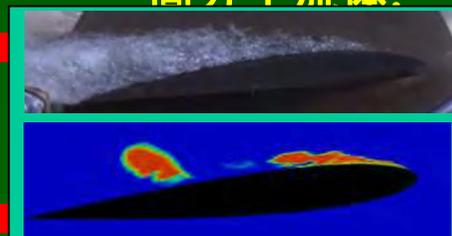
存在則,  
 則)

雲・雨滴生成

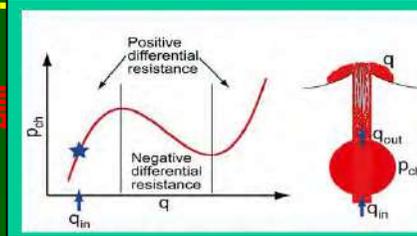


気泡生成

気泡の流動



分子モデル、  
 確率分布モデル

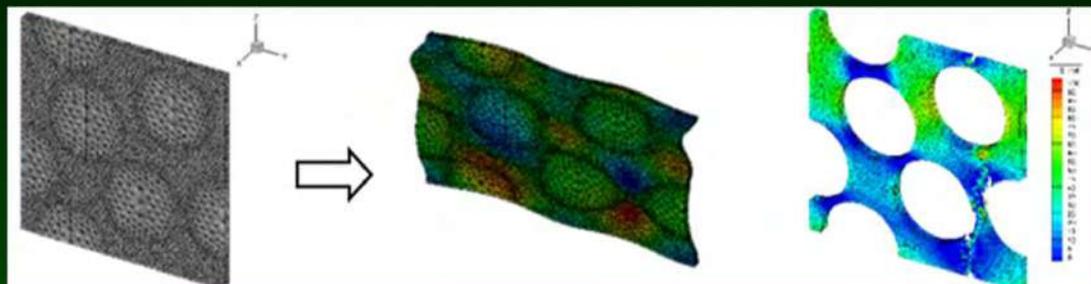


マグマの流動

+ 弾性変形/破壊 (A-B連携)

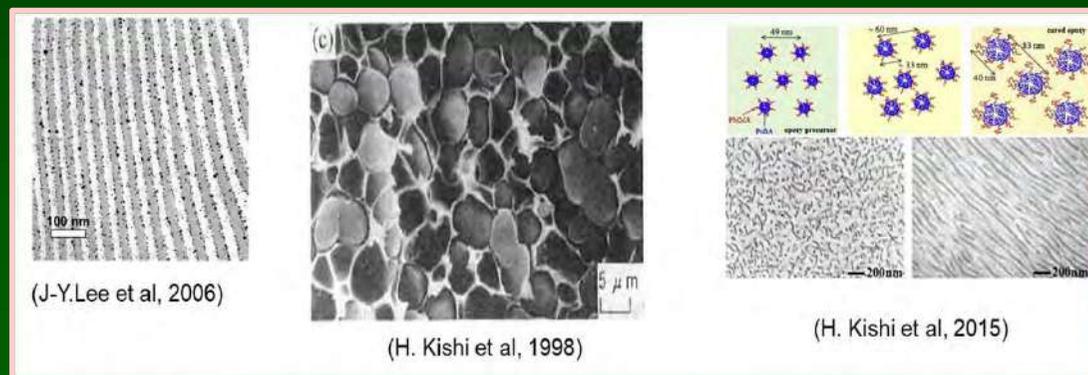
# SIP-A3(リーダー: 岡部朋永教授) Multiscale Modelling of Thermoplastic and Thermosetting Resins

## Macroscopic scale (Mechanical properties)



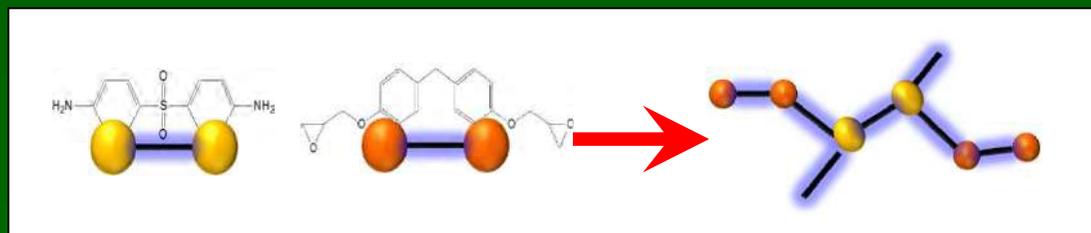
Macroscopic  
material constants

## Mesoscopic scale (Phase separated structures)



Density functional theories  
(SCF & GL theories)

## Microscopic scale (Reactions)



Time evolution of  
amorphization &  
crosslinking reactions

パラメタ渡し  
によるリンケージ  
(量子系でも同様)

# 本日の講演会の概要

## 「計算材料科学 & マテリアルズ・インフォマティクス入門」

青柳 岳司 氏(産総研)                      OCTA & 超々PJ  
「拡張OCTA—計算材料科学とデータ科学融合のためのツール」

Soft Materials & Simulation Tools

大野 かおる 氏 (横浜国大)                      ポスト「京」PJ  
「第一原理フェーズフィールド法」

澤田 英明 氏 (日本製鉄)                      PCoMS & ポスト「京」PJ  
「OpenMXの利用による計算材料科学」

Hard Materials & Quantum Systems

藤堂 眞治 氏 (東大)                      ポスト「京」PJ & PCoMS  
「MateriApps LIVE!による物質科学シミュレーション」

Hard/Soft Materials & Simulation Tools