

産総研・東北大
数理先端材料モデリング
オープンイノベーションラボラトリ
(MathAM-OIL)

産総研が大学キャンパス内に設置する 新しい産学官連携研究拠点

産総研・東北大 数理先端材料モデリング オープンイノベーションラボラトリ (MathAM-OIL)

産総研・東北大 数理先端材料モデリング オープンイノベーションラボラトリ、通称「MathAM-OIL（マッサム・オーアイエル）」は、2016年6月30日に3番目のオープンイノベーションラボラトリとして、東北大学片平キャンパスに開所されました。産総研は2016年度から、経済産業省が進める「オープンイノベーションアリーナ構想」の一環として、大学等のキャンパス内に設置する産学官連携研究拠点「オープンイノベーションラボラトリ」、通称「OIL（オー・アイ・エル）」の整備に取り組んでおり、2020年度までに10 拠点以上のOILの設置を目指しています。OILの設置を行うことで大学等の基礎研究と、産総研の目的基礎研究・応用技術開発を融合し、**産業界へ技術の「橋渡し」**を推進します。



OIL一覧とOIL 設置のポイント

3つの設置のポイント

1) シームレスな研究体制

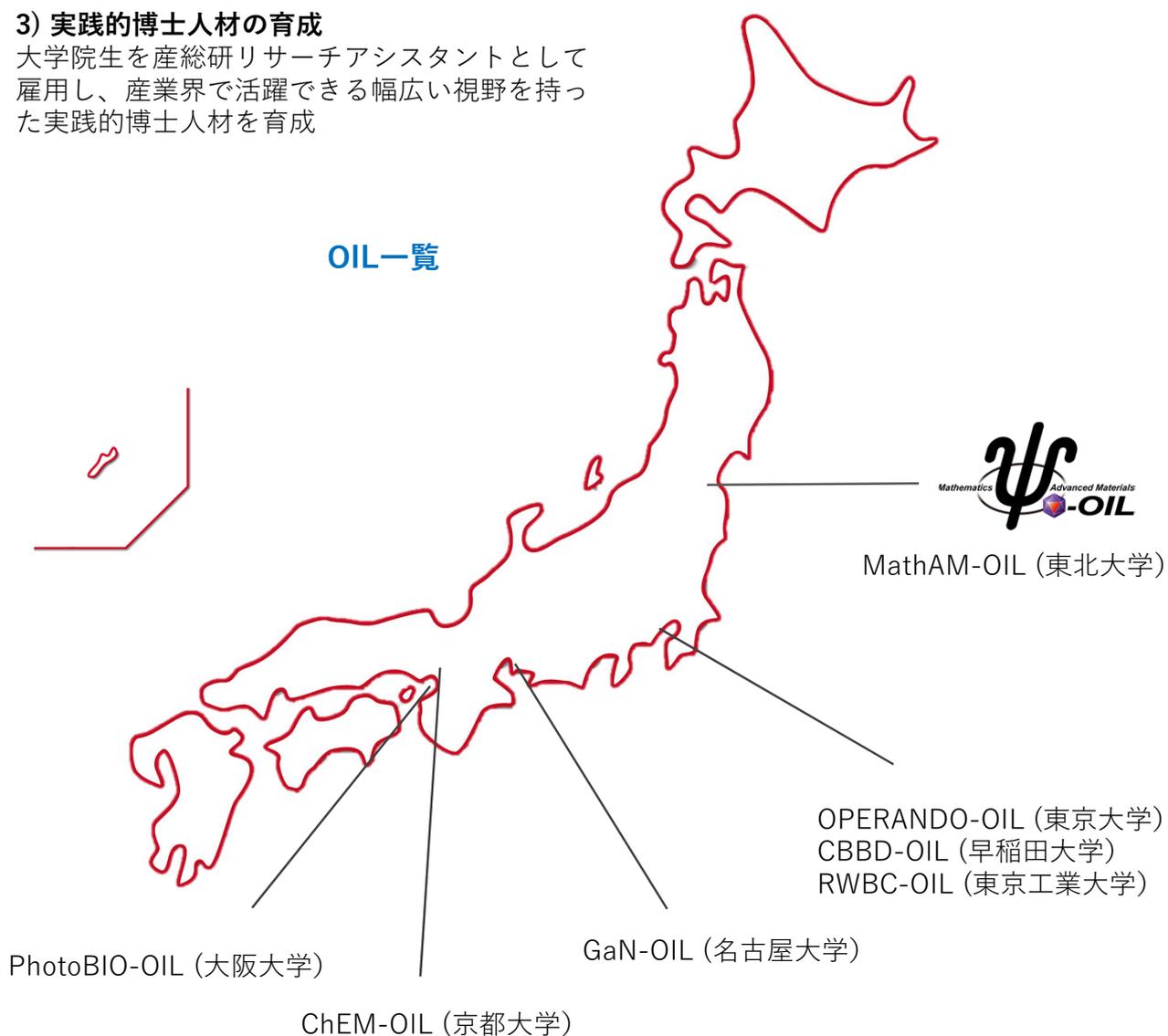
基礎研究、応用研究、開発・実証を切れ目なく実施

2) クロスアポイントメント制度の活用

大学教員と産総研研究員を兼ねるクロスアポイントメント制度などの活用により、研究を加速

3) 実践的博士人材の育成

大学院生を産総研リサーチアシスタントとして雇用し、産業界で活躍できる幅広い視野を持った実践的博士人材を育成



MathAM-OILでは、東北大学材料科学高等研究所（AIMR）が進めている数学を導入し新たな「材料科学」創出を目指す世界に先駆けた研究基盤技術シーズと、産総研の「機能性材料コンピューショナルデザイン」研究機能を組み合わせ、次世代の先端材料を高速で開発し、産業界への橋渡しにつながる新たな研究領域の創出を目指しています。

数学、物理学、材料科学、原子構造などの観測さらには情報理論などにより、アモルファス材料など複雑構造の観測・解析、数学を用いた隠れた秩序の抽出、トポロジーで分類される新しい機能性材料の理論的予言、統計的機械学習、画像処理技術、ソフトマテリアルの構造形成プロセス解析など材料開発を促進する基盤技術の研究を行います。産総研の兼任研究員、東北大学ですでに連携を開始している先生方を含め、十数名のメンバーで開始しましたが、国内外から応募頂いた新進気鋭のポスドク研究員十数名が加わりラボの研究を推進します。

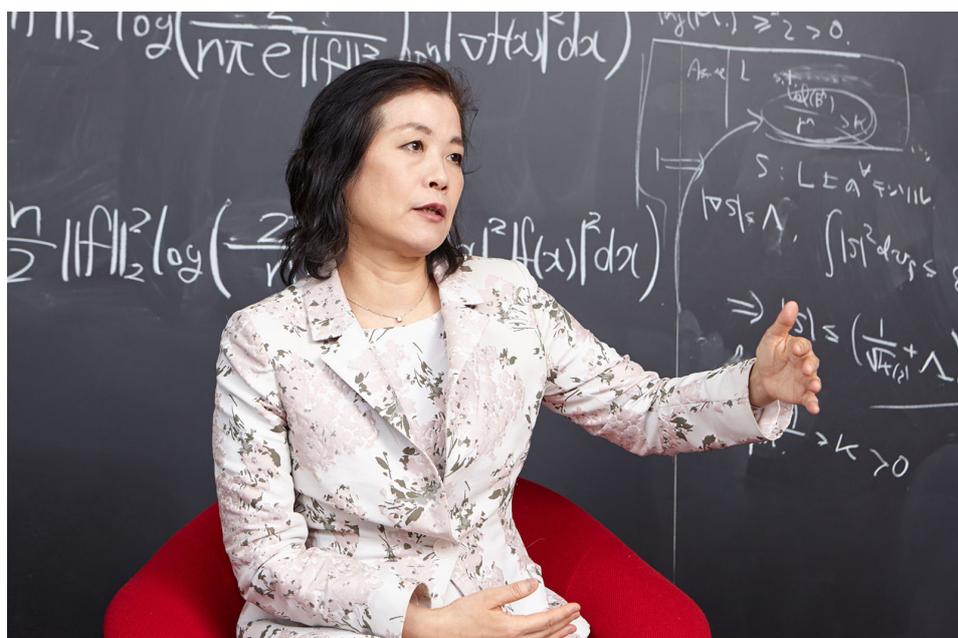
このようにして東北大学を始めとする大学や他の研究機関との協力を進めます。同時に、企業との共同研究や共同プロジェクトを積極的に行い、超先端材料設計を促進し、新たな市場の創出により日本の産業競争力を高める基盤を構築し、研究成果の社会への還元を行っていきます。



撮影：尾苗 清 © 東北大学AIMR

第4次産業革命と言われる社会構造の大変革が起こり、特に数理・データ科学を用いて高性能計算力やICT技術を活用する新たな産業創出や研究開発が脚光を浴びています。研究開発が大きく変動するなか、他にない手法をいち早くとり入れた企業は、市場をリードするチャンスを得ます。このため、世界中で数理科学・データサイエンスのアイデアと人材を獲得する競争が過激化しています。

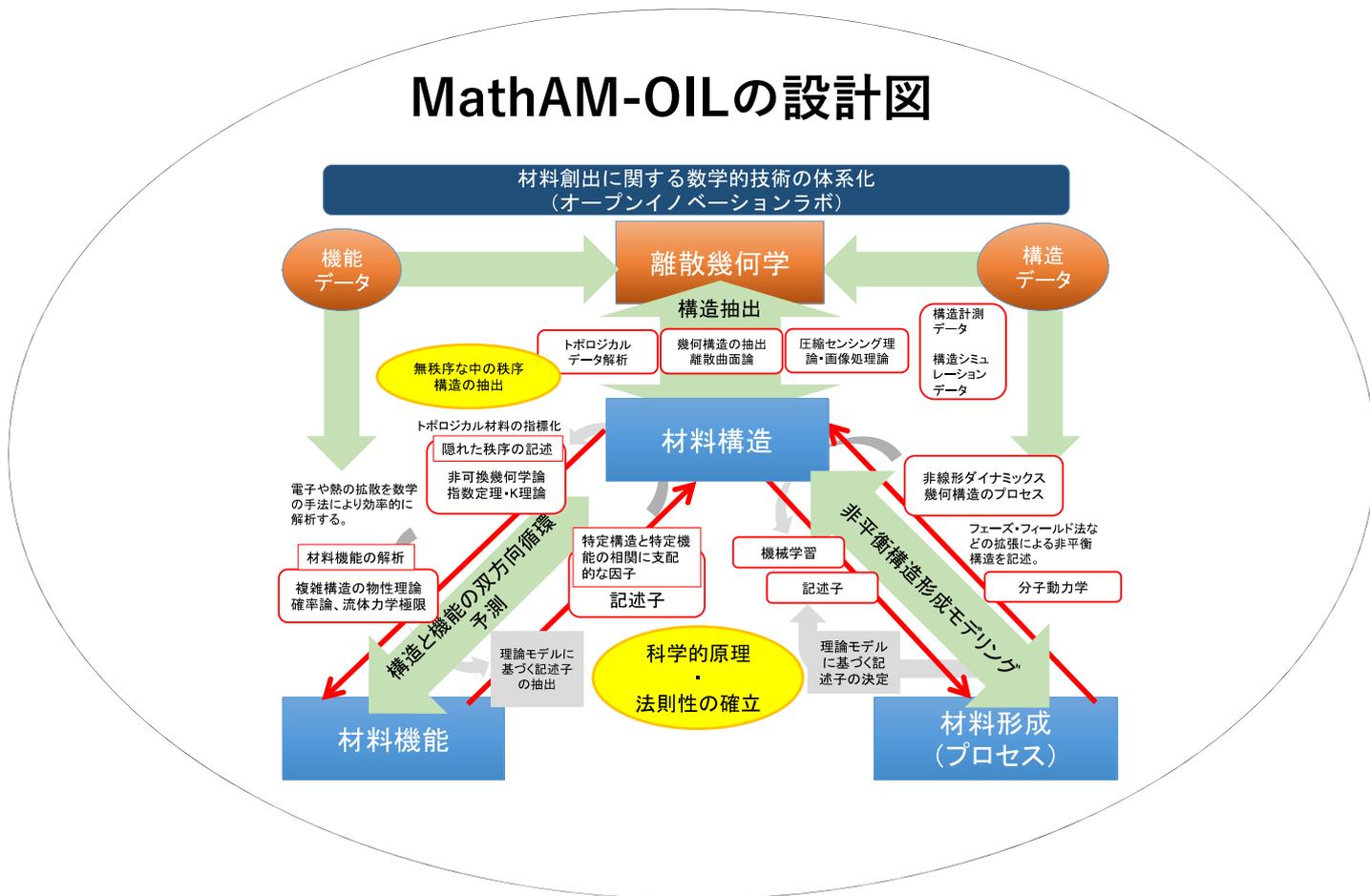
AIMRは世界に先駆け、他に類を見ない数学と材料科学の連携を開始し、学术界において注目を集めトップレベルサイエンスを産み出してきました。その新たな手法は、その後開始されたSIP, NIMS, JST, NEDOなどにおけるマテリアル・インフォマティクス等のプロジェクトにおいて柱の一つとなりました。単なる大量データを力づくで処理するビッグデータ解析ではなく、情報から意味を取り出し問題の本質を取り出す数理手法を提案できる唯一の研究機関です。また、産総研のCD-FMatは優れた計算手法の開発を産業界へ活かすことで大きな貢献をしてきました。この二機関が協働し立ち上げたのがMathAM-OILです。産業界におけるニーズに適合する数理・データ科学・計算シーズをいち早くマッチングし、従来とは異なるソリューションを見出すことで、新機能材料開発の場を形成し社会に貢献することを目指しています。どうぞ、よろしくお願いいたします。



研究メンバー

中西 毅 (MathAM-OIL ラボ長/産業技術総合研究所) 小谷 元子 (MathAM-OIL 研究参与/東北大学AIMR 所長)
 義永 那津人 (MathAM-OIL 副ラボ長/東北大学AIMR) 西浦 簾政 (MathAM-OIL 研究支援アドバイザー)

MathAM-OIL の設計図



研究課題1：構造抽出

研究代表者: Dmitri V. LOUZGUINE (MathAM-OIL チーフリサーチャー/東北大学AIMR 教授)
 西尾 憲吾 (産業技術総合研究所 CD-FMat 主任研究員)
 中村 壮伸 (産業技術総合研究所 CD-FMat 主任研究員)
 平田 秋彦 (MathAM-OIL 客員研究員/早稲田大学理工学術院 教授)

研究課題2：構造形成設計

研究代表者: 義永 那津人 (MathAM-OIL 副ラボ長/東北大学AIMR 准教授)
 森田 裕史 (産業技術総合研究所 CD-FMat 多階層ソフトマテリアル解析手法開発チーム 研究チーム長)
 中島 千尋 (MathAM-OIL 客員研究員/東北大学大学院情報科学研究科 応用情報科学専攻 JST さきがけ研究員)

研究課題3：材料機能モデリング

研究代表者: 中西 毅 (MathAM-OIL ラボ長/産業技術総合研究所)
小谷 元子 (MathAM-OIL 研究参与/東北大学AIMR 所長・教授)
森下 徹也 (産業技術総合研究所 CD-FMat 主任研究者)
池庄司 民夫 (MathAM-OIL 客員研究員/東北大学金属材料研究所 学術研究員)

*産総研CD-FMat: 機能材料コンピュータショナルデザイン研究センター

ポスドク研究員 (産総研特別研究員)

大山 倫弘
Yueyuan GAO
Kartik SAU
徳田 悟
Ngoc Thanh Nam NGUYEN
林 晋
Rafael de Araujo MONTEIRO da Silva
吉村 幸徳
世永 公輝
Anh Khoa Augustin LU
Zhen LU
Uyen Tu LIEU

連携研究

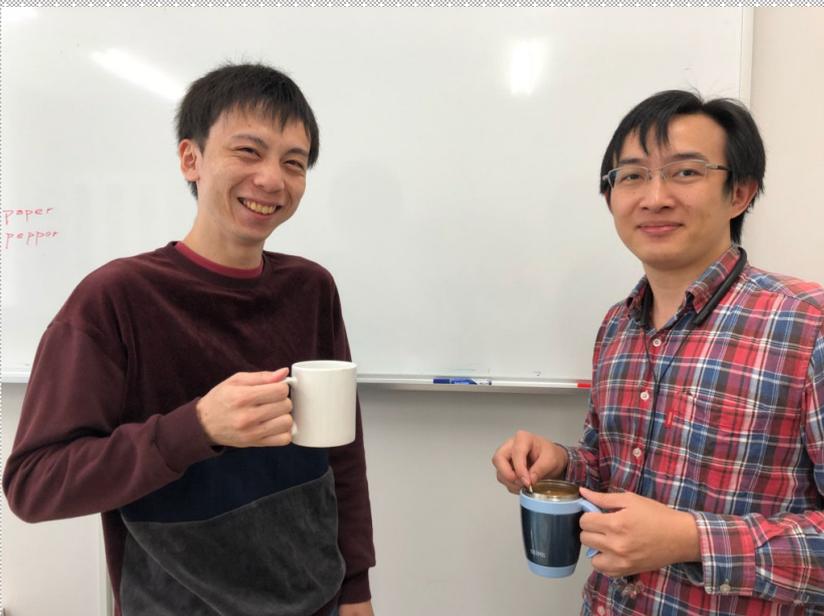
大関 真之 (東北大学大学院情報科学研究科 応用情報科学専攻 准教授)
折茂 慎一 (東北大学AIMR 教授)
川勝 年洋 (東北大学大学院理学研究科 物理学専攻 教授)
越野 幹人 (大阪大学大学院理学研究科 物理学専攻 教授)
田中 和之 (東北大学大学院情報科学研究科 応用情報科学専攻 教授)

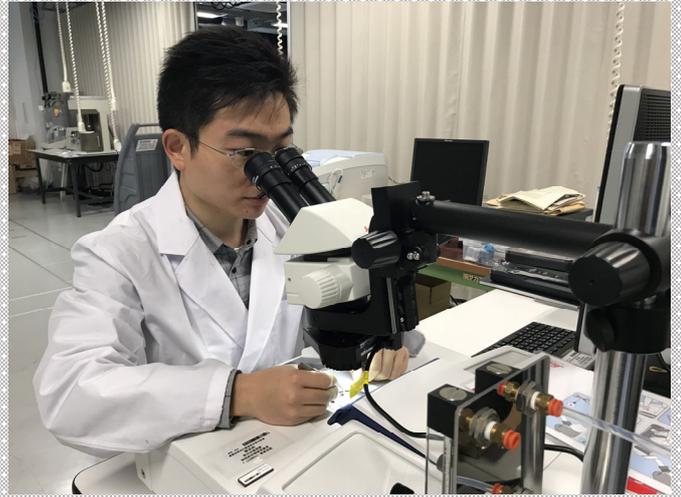
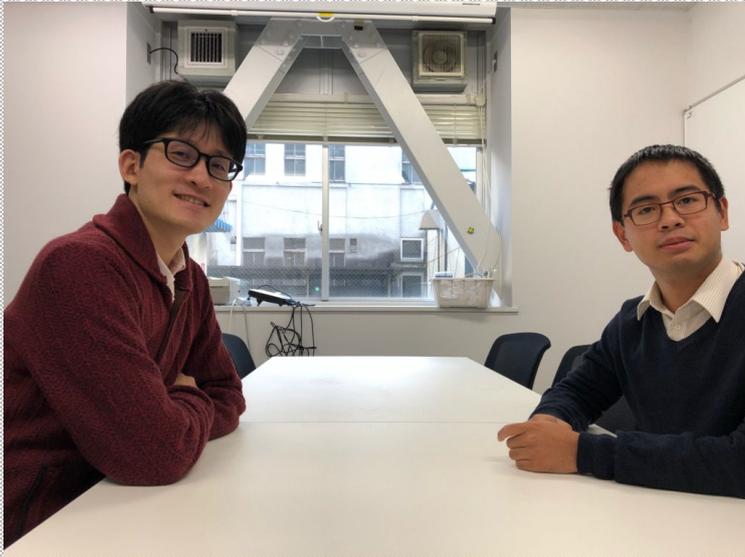
産総研リサーチアシスタント

陶 辰 (東北大学大学院理学研究科 数学専攻 小谷研究室)
高畑 正一 (東北大学大学院理学研究科 物理学専攻 川勝研究室)



Math AM -OIL





発見好き
喜び





研究課題: 構造抽出
MathAM-OILチーフリサーチャー/
東北大AIMR 教授
Dmitri LOUZGUINE
dml@wpi-aimr.tohoku.ac.jp

Ultrahigh-strength Ti alloys for structural applications

We develop Ti-Fe-Sn-Nb alloys with superior mechanical properties. The $Ti_{67}Fe_{27}Sn_3Nb_3$ (at. %) hypoeutectic dual-phase alloy consisting of primary β -Ti and ultrafine β -Ti+TiFe eutectic exhibits exceptionally high yield stress of 2.18 GPa and good plasticity of 12%. β -Ti solid-solution type $Ti_{80}Fe_{14}Sn_3Nb_3$ alloy also exhibited a high yield stress of 1.88 GPa along with the plastic deformation of 32%. Such a high strength (see Fig. 1 (a,b)) is about 50% higher than the values typical for conventional high strength β -Ti alloys and comparable to those of Ti-based nanocrystalline alloys.

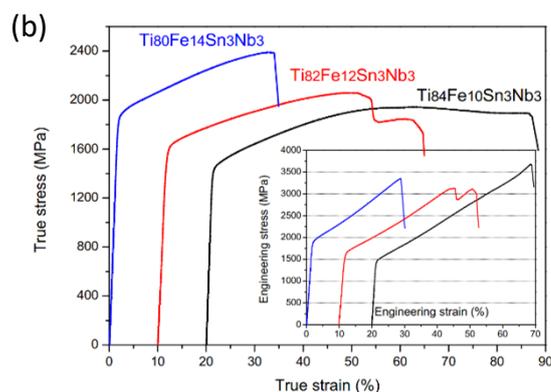
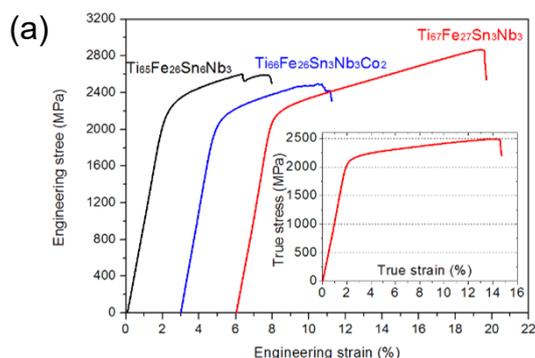
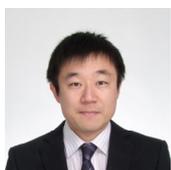


Fig. 1. Compressive engineering stress-strain curves of the developed alloys.



研究課題: 構造抽出
MathAM-OIL/
産総研CD-FMat 主任研究員
西尾 憲吾
k-nishio@aist.go.jp

多胞体コードを用いたアモルファス材料の不規則な原子配列の解明

原子の並び方によって材料の性質が変わるため、材料の性質を調べるためには原子配列を理解する必要があります。原子が周期的に並んだ結晶の原子配列を理解することは簡単ですが、原子が不規則に並んだアモルファス材料の原子配列を理解することは挑戦的な課題です。そもそも、不規則に並んだ原子の配列パターンを解析するための手法が確立されているとは言えない状況です。

そこで、不規則な原子配列を解析するための基礎理論として多胞体コードを創出しました。この新しい数的手法を、シミュレーションを用いて作成したアモルファス構造モデルのポロノイ多面体解析に適用し、人間が理解可能な形でアモルファス材料の原子配列の特徴を抽出します。

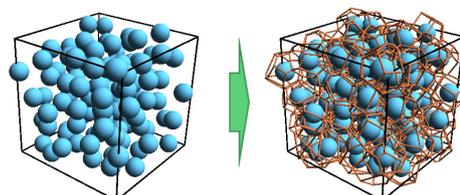
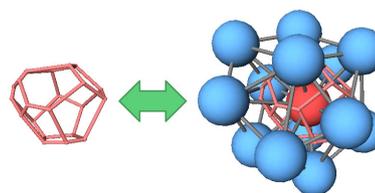


図1 ポロノイ多面体解析では、原子をポロノイ多面体に置き換え、ポロノイ多面体が空間を埋め尽くすモデル(これは「ポロノイ多面体によるタイリング」と呼ばれている)として原子配列を表現します。



4(56)²5⁸-多面体

隣接原子は
* 4(56)²5⁸-多面体の
頂点を形成

図2 多胞体コードをポロノイ多面体解析に適用すると原子の配列パターンを簡単な数列で表現することができます。



研究課題: 構造抽出
MathAM-OIL/
産総研CD-FMat 主任研究員
中村 壮伸
takenobu.nakamura@aist.go.jp

幾何学を用いた物質の統計物理

1. パーシステントホモロジーを用いた物質の微視的構造の記述
2. リーマン多様体と確率過程を用いた自由エネルギーの構成法の理論と計算手法開発
3. マルチスケールの計算手法開発

1. トポロジカルデータ解析(パーシステントホモロジー:PH)に基づく乱れた構造の汎用的な記述方法を開発しています。液体論や結晶構造論に対応する乱れた構造に隠された秩序構造を反映させた表現方法の構築と構造物性相関を与える枠組みを開発しています。
2. 従来の自由エネルギー計算の定式化が持つ問題点を確率過程とリーマン多様体を用いることにより克服しました。この理論に基づき、バイオ系やガラスなどで使える新たな自由エネルギー計算法の構築に取り組んでいます。
3. 幾何学の不変量に注目した、原子分子スケールとメソスケールをつなぐマルチスケールの計算手法の開発を行っています。

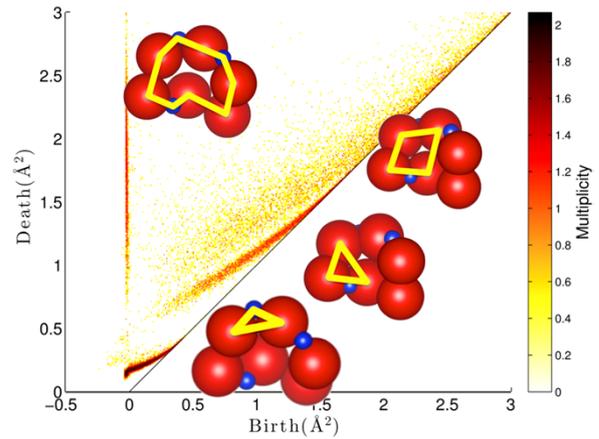


図1 PHによるシリカの構造記述



研究課題: 構造抽出
MathAM-OIL客員研究員/
早稲田大理工学術院 教授
平田 秋彦
ahirata@aoni.waseda.jp

機能性アモルファス材料の先端計測・計算機科学・数理解析による構造秩序抽出

原子配列に秩序を持たないアモルファス物質は次世代の機能性材料として注目を集めており、例えば、自動車用2次電池の電極材料や固体電解質としての応用が期待されています。

材料の機能を理解するためには構造解析・抽出が不可欠ですが、一見秩序のない構造を持つアモルファス材料の場合は周期性を有する結晶材料とは異なり大変困難です。本研究では、電子線イメージング等の先端ナノ計測実験、分子動力学法・逆モンテカルロ法等の計算機シミュレーション、および計算ホモロジー解析・ボロノイ多面体解析等の数理解析を組み合わせることにより、アモルファス構造に潜む秩序を明らかにします。さらに、得られた情報をもとに機能性発現メカニズムの解明を目指します。これまでに行った具体的な事例として、アモルファス金属における幾何学フラストレーションの解析や不均一アモルファス酸化物の複雑に入り組んだナノ構造のモデリングなどが挙げられます。

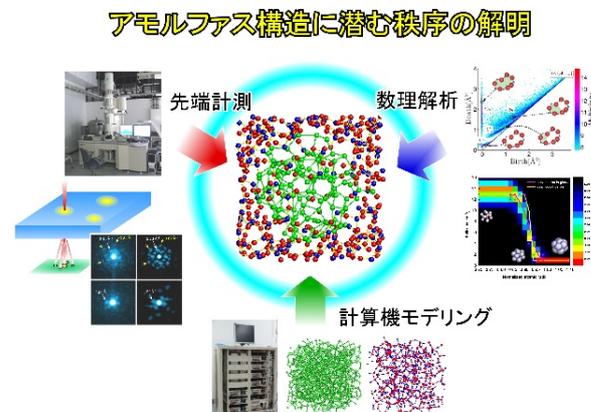


図1 アモルファス材料の構造抽出法



研究課題: 構造形成設計
MathAM-OIL副ラボ長/
東北大AIMR 准教授

義永 那津人

yoshinaga@tohoku.ac.jp

非平衡ソフトマテリアルの構造形成

高分子、液晶、コロイドなどの複合材料であるソフトマテリアルが示す動的な構造形成の数理について研究を行っています。完全に周期的な構造だけではなく、転位や回位などの欠陥を含む不均一性の運動性や機能との関係、制御を可能にしたいと考えています。内部自由度を持った分子が自己組織化することによって複雑なパターンを生み出すことを、非線形偏微分方程式を用いて記述します。一例として、ヤヌス粒子などの方向性を持つ粒子の動的な凝集構造や機能についての数理モデルを構築しました。生体分子や生体模倣材料のような、動的に環境へ応答、適応するスマートなシステムへの応用を考えています。

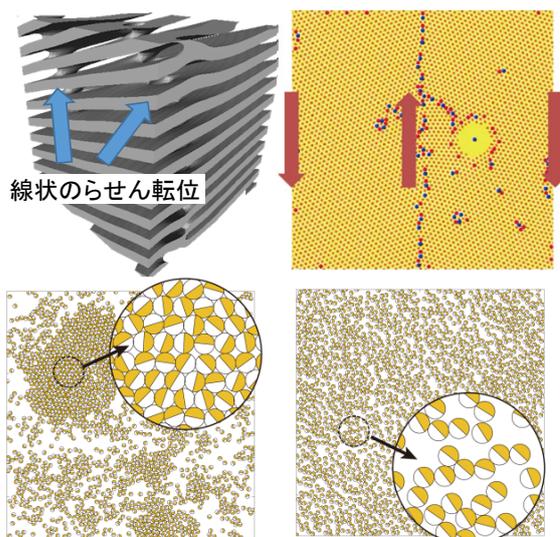


図1 欠陥が織りなす空間構造

非線形偏微分方程式によって得られる層状構造内および三角格子内の転位のダイナミクス(上)。不純物と粒界に生成する欠陥(上右、青赤丸)と三次元のらせん転位(上左)。ヤヌス粒子が示す自己凝集構造と配列構造(下)。



研究課題: 構造形成設計
MathAM-OIL/
産総研CD-FMat 研究チーム長

森田 裕史

h.morita@aist.go.jp

ソフトマテリアル材料のモデリング技術と非平衡ダイナミクスの研究

高分子のようなソフトマテリアル材料の開発は常に様々な問題に直面しています。例えば、これらの材料の機能が発現するスケールがメソスケールという原子・分子以上のスケールとなっており、どうしても分子集合体以上のサイズの構造制御が必要となります。またソフトマテリアルは、電子系に比べて相関が弱いために、非平衡状態となることも多く、その非平衡状態をうまく制御して製品とされている場合も少なくありません。これらの材料の制御にはメソスケールにおいて、機能・構造に直接関与するエッセンスのみを抽出したモデリング技術が必須となることから、我々はそのモデリング技術、及びそのダイナミクスについて、研究を行っています。右図には、非平衡ダイナミクスが関わる例として、ナノ粒子充填高分子ブレンド系の相分離構造と、ブロックポリマーリソグラフィーの結果を示しています。

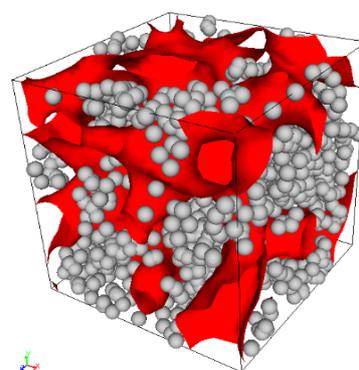


図1 ナノ粒子が充填された高分子ブレンド系の相分離構造モデリング

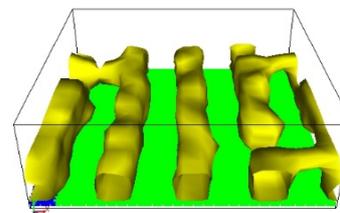


図2 ブロックポリマーリソグラフィーの欠陥構造解析



研究課題: 構造形成設計
MathAM-OIL 客員研究員/
東北大情報科学研究科
JSTさきがけ研究員

中島 千尋

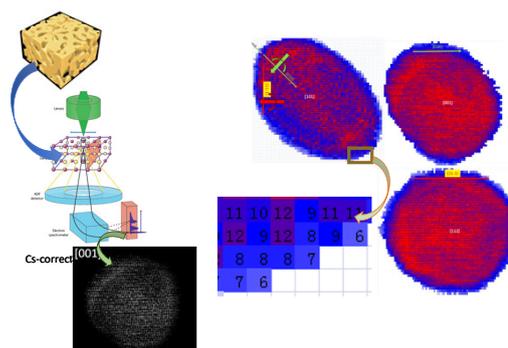
chihiro.nakajima.d3@tohoku.ac.jp

逆問題的手法を用いた 実験データ処理法の開発

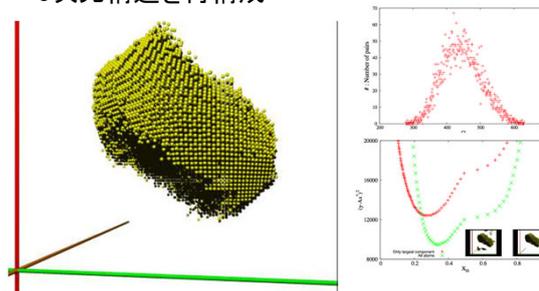
最適化・ベイズ推定・機械学習などを用いた、画像データなどをはじめとする実験データの処理方法を開発しています。

- ・電子顕微鏡による2次元撮像を組み合わせ、内部を含む3次元構造を再構成する(右図の例)、ならびにその精度(正誤)評価。
- ・互いに異なる測定による実験データ同士を統合するなど、実験データから得られる結果の質の向上、新たな使い方の模索などを行います。

電子顕微鏡により2次元撮画像(透過像)を得る



複数の2次元撮画像をもとに、最適化により
3次元構造を再構成



共同研究者:
大関真之(東北大)
Liu Pan(東北大)



研究課題: 構造形成設計
東北大情報科学研究科 教授

田中 和之

kazu@tohoku.ac.jp

マルコフ確率場による 統計的機械学習モデリング

マルコフ確率場は状態変数を頂点、状態変数間の相互作用を辺として表現した無向グラフ表現により表される構造を持ち、グラフィカルモデルとも呼ばれています。

与えられた教師データのセットからこの無向グラフ表現における各辺に割り当てるべきポテンシャル関数を同定することができます。同定においては確率伝搬法と呼ばれる確率的計算方式と統計学における最尤法が用いられます。

図1は30枚の標準画像から画像の事前分布における最近接画素間の階調値の相互作用ポテンシャル関数が同定できることを表しています。このポテンシャル関数はノイズ除去に有効に機能することが知られています。

本研究課題では画像に限らず様々なデータから問題設定ごとに基本的役割を担うポテンシャル関数の同定を可能とするユニバーサルな理論体系の構築を目指しています。

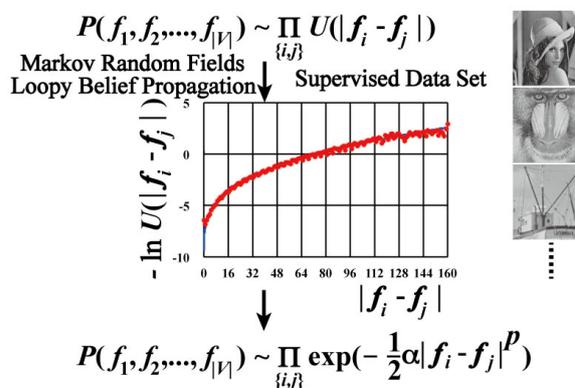


図1 マルコフ確率場と確率伝搬法による
教師あり学習からのポテンシャル関数の同定



研究課題: 構造形成設計
 東北大情報科学研究科 准教授
大関 真之
 mohzeki@tohoku.ac.jp

機械学習のニューフロンティアに挑む

「機械学習」という言葉が世の中を席卷して久しいものの、実際に機械学習によるブレークスルーを目の当たりにした人はどれだけいるのでしょうか。良質なデータを利用しなければ、いかに良い方法であっても本当に知りえなかった新しい知見には到達しません。そこで自然科学の研究者、応用を意識した材料科学の研究者が魂のこもったデータ解析を行ったらどうなるでしょうか。自然界にどれだけのデータがありふれているでしょう。そしてその自然界のルールをどれだけ人間が見出してきたでしょう。その営みを絶やすことなく、方法論として「機械学習」を導入することで科学の深化を促進します。

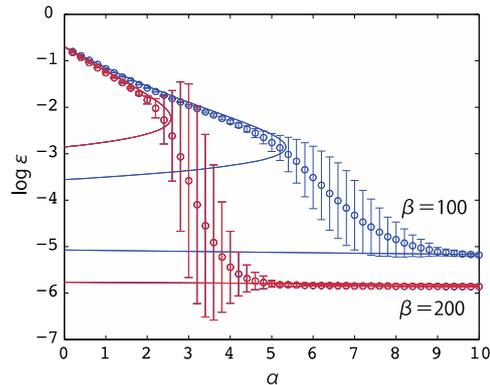


図1 深層学習の性能評価
 「機械学習に潜む相転移」

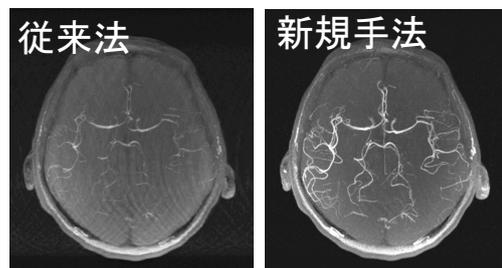


図2 少ないデータでも本質を掴む
 「スパースモデリング」



研究課題: 材料機能モデリング
 MathAM-OILラボ長
中西 毅
 t.nakanishi@aist.go.jp

トポロジーと電気伝導特性理論モデル

理論モデル構築により材料物性の理解と電子デバイス機能の予言を目指した研究を行っています。特に、カーボンナノチューブ、グラフェンなど低次元のナノ炭素材料、および新しい原子層物質などを中心に、その特異な電気伝導特性を研究しています。例えば、カーボンナノチューブに不純物が付着しても、電気伝導は全く妨げられず、理想的な電気伝導体になることを理論的に予言しました。これを、ベリーの幾何学的な位相と関係付けて理解しました。この例のように波数空間の幾何学と材料の特性を結びつける研究分野が大きく発展し、トポロジカル絶縁体、ワイル半金属といった特異な表面状態を持つ材料がスピントロニクスへの応用なども含め注目されています。

また、グラフェンの電子状態にはKバレーとK'バレーと呼ばれる2つのバレーからなる構造が知られていますが、このバレーの自由度をスピンの自由度の代わりに使ったバレートロニクスに関する研究を進めています。図1は単層、2層グラフェン境界におけるKバレーの左に偏極した伝導を示します。一方、K'バレーでは逆に偏極するのでグラフェン層境界はバレーフィルタとなることを、理論的に予言しました。

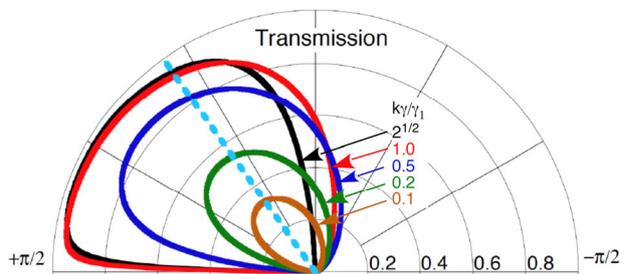


図1 単層、2層グラフェン境界におけるバレー分極伝導



研究課題: 材料機能モデリング
MathAM-OIL研究参与/
東北大AIMR 所長・教授
小谷 元子
kotani@wpi-aimr.tohoku.ac.jp

数理・情報による材料開発革新 材料科学と人工知能/ビッグデータ解析とのコラボレーション

最先端幾何学は、複雑構造中の秩序の抽出や材料科学者の直感を数値化・記述することにより、「プロセス・構造・機能」の相関を明らかにします。特に、離散幾何解析学は、「マルチスケール構造」の理解に有効なツールとなります。

例えば、カーボン低次元系での「曲率」、カーボンネットワークでの「安定指標」は、系の輸送現象の解析に有益な数理指標です。電子の「スピン」や「エネルギーバンド構造」のトポロジーに起因する現象(トポロジカル絶縁体など)では非可換幾何学が有効なツールとなります。「マルチスケール構造」に関し、数学はスケール間の橋渡し、特異な物性・機能発現メカニズムを説明する手法を与えてくれます。

このように、数学は、有機分子エレクトロニクス材料、スピントロニクス・デバイス、超高濃度ナノ流体(ソフトセラミクス)など機能性材料の創出や、数学の「概念化・可視化・数値化」を用いたAI・ビッグデータ解析とのコラボにより、マテリアルズインフォマティクスのブレークスルー創出に有用と考えています。

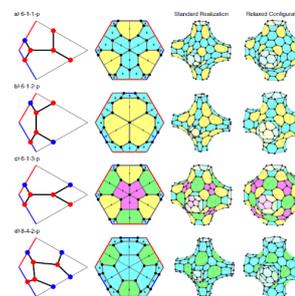
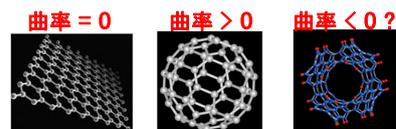


図1 低次元系カーボンの分類

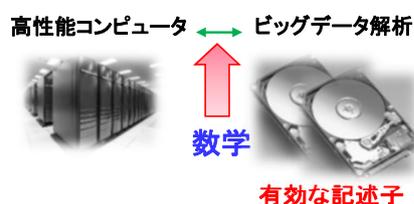


図2 AI・ビッグデータ解析とのコラボ



研究課題: 材料機能モデリング
MathAM-OIL/
産総研CD-FMat 主任研究員
森下 徹也
t-morishita@aist.go.jp

分子シミュレーションの手法開発並びに 液体・ガラス・ナノ物質への適用研究

分子シミュレーションにおいてレアイベントを実現できる手法や位相空間のサンプリング効率を向上させる手法の開発を行っています。特に、ポストプロセスが不要な自由エネルギー計算手法であるLogMFD法の開発を中心に据えており、情報統計との融合も視野に入れながら手法開発を推進しています。また第一原理・古典分子動力学(MD)シミュレーションにより、金属や半導体の過冷却液体状態やガラス状態の物性解明を行い、様々な構造形成プロセスや異常緩和現象などを見出しています。更に2次元ナノ物質の研究も推進しており、特にシリセンの新構造の発見や分子修飾シリセンの電子状態の解明を行っています。

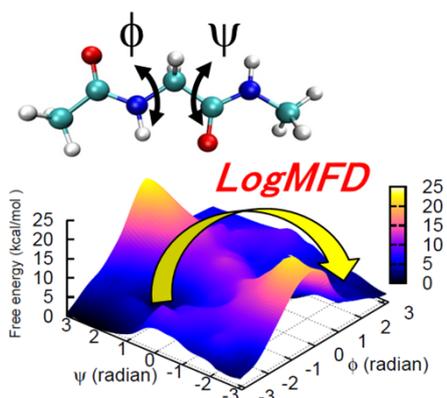


図1 LogMFD法による自由エネルギー障壁の効率的な乗り越えによるサンプリング向上(グリンジペプチドの自由エネルギー面)

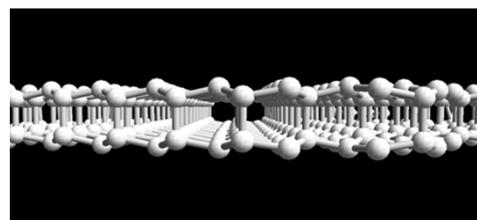
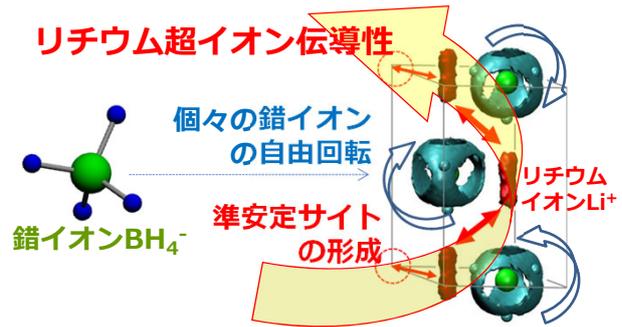


図2 MD計算で予測された2層シリセン構造



研究課題: 材料機能モデリング
 東北大AIMR 教授
折茂 慎一
 orimo@imr.tohoku.ac.jp

高密度水素化物の材料科学 一次世代電池デバイスへの展開



- ・錯体水素化物は、水素が錯イオンを形成してリチウムなどの他の陽イオンと結合した、安定な高密度水素化物の代表例です。
- ・私たちは、多様なエネルギー関連機能の観点で世界に先駆けて錯体水素化物に注目した研究を実施、成果の一部は平成24年度文部科学大臣表彰 科学技術賞(研究部門)「錯体水素化物の合成とエネルギー関連機能に関する研究」の受賞に至りました。
- ・特に最近では、錯体水素化物のイオン伝導性にも注目、ホウ素(B)系錯体水素化物がリチウム超イオン伝導性を示すことを発見しました(上図は超イオン伝導の発現機構モデル)。
- ・さらに、適切な熱処理での錯イオンのクラスター化により、高安定性・高イオン伝導性の理想的な電解質-電極界面相が形成することも報告しました。
- ・これらの成果を基に産学共同研究を進め、固体電解質として錯体水素化物を実装した全固体リチウムイオン電池(右写真)やその固体電解質の多量合成技術を開発しました。



<http://www.hitachi.co.jp/New/cnews/month/2015/11/1112.html>
<http://www.mgc.co.jp/php/files/160120.pdf>



研究課題: 材料機能モデリング
 MathAM-OIL客員研究員/
 東北大金属材料研究所 学術研究員
池庄司 民夫
 ikeshoji@imr.tohoku.ac.jp

高速イオン伝導体の分子動力学

イオンは種々の形態で物質中に見られますが、強いクーロン相互作用のため、外から電場をかけても、固体中では一般的には動きません。しかし、材料をうまく設計すると、溶液中のイオン伝導に匹敵する超高速イオン伝導体が得られます。このような固体イオン伝導体は、全固体電池の電解質として、その性能向上に寄与すると期待されています。

酸化物あるいは硫化物の高イオン伝導率の物質が報告されていますが、我々は第3の固体イオン伝導体と位置づけました水素化物に注目しています。特に BH_4^- や $\text{B}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$ のような錯体水素化物の陰イオンを含む系では、その回転同位体が種々可能であり、それにより対イオンである Li^+ や Na^+ などの伝導経路を確保するという新しい高速イオン伝導体と予想されています。我々は、このような伝導経路がどのように確保され、どのようにイオン伝導を促進するかを、種々の場を想定した分子動力学計算を駆使して解析しています。

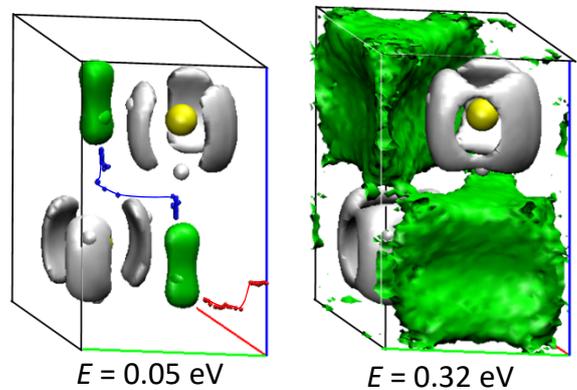


図1 LiBH_4 における BH_4^- (黄色と白)回転同位体を作る広がった原子分布。緑が、エネルギー E にあるLiの分布(1200原子の第一原理分子動力学計算から)



MathAM-OILポスドク研究員

大山 倫弘

oyama.norihiro@aist.go.jp

Active Matterの数理モデリング

平衡状態については熱力学や統計力学といった確立した理論が存在する一方で、非平衡現象の理解は十分とは言えません。こうした非平衡現象の理解を進めるため、コンピュータシミュレーションを用い、理想的な系での数値実験を

行っています。特にActive Matterと呼ばれる系の研究に注力しています。Active Matterとは内部のエネルギーを力学的仕事に変換し、非平衡状態を実現する系の総称で、代表的なものが生物です。生物も物理法則に従うので、物理的な観点でその振る舞いが理解・予測可能であることが期待されます。しかし、いわゆる創発と呼ばれる非自明な集団としての性質が現れるなど、その理解は容易ではありません。こうした複雑な現象の理解に数値実験が有効な例があります。たとえば、これまでの研究では平衡統計力学的手法の援用により、微生物の分散系で流れ場を介して形成される非自明な方向秩序が平均場的な二体間相互作用の線形和で説明可能であることを示しました。生物系の実験結果の理解を可能にする数理モデルの構築を目指しています。

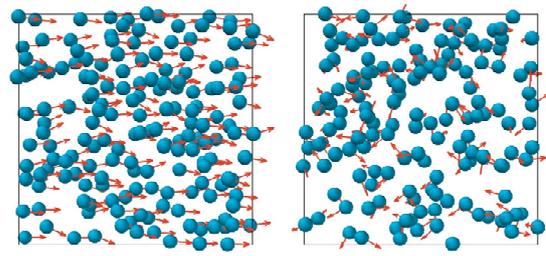
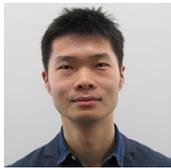


図1 (左)微生物を模した数理モデルで自発的に形成される方向秩序、(右)秩序が形成されない条件での結果



MathAM-OIL Post-Doc. Researcher

Yueyuan GAO

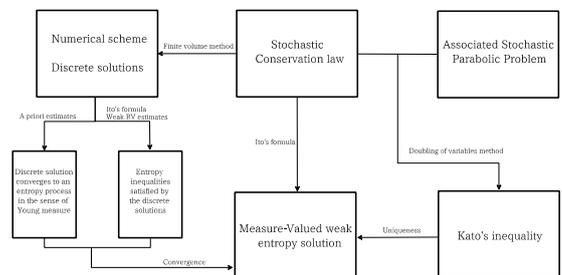
yueyuan.gao@aist.go.jp

Finite volume methods for partial differential equations

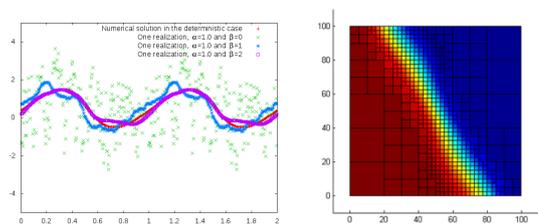
My mathematical interests are finite volume methods and partial differential equations(PDE) from both theoretical and numerical viewpoints.

In the theoretical viewpoint, I am interested in proving the existence and uniqueness of the weak solutions to stochastic equations with the help of finite volume methods.

In the numerical viewpoint, I perform simulations of the stochastic PDEs and of the density driven flow problem by finite volume methods. Recently, I am also interested in numerically studying with mesh refinement the crack growth phenomenon by phase-field model.



Theoretical study plan for first order stochastic conservation law



Numerical simulations for stochastic Burgers equation and density driven flow problem



MathAM-OIL Post-Doc. Researcher

Kartik SAU

kartik.sau@aist.go.jp

Molecular Dynamics Simulation in Fast Ion Conductors.

My research interest is on understanding of ion transport mechanism in fast ion conductors employing molecular dynamics (MD) simulation. Fast ion conductors have found potential interest for battery electrolytes due to its very high ionic conductivity. My main goal is to find out the important factors which are responsible for high ionic conductivity. The microscopic level information is the wealth of such atomistic level understanding. In this regards, MD simulation is a key tool to get microscopic level information. However, the molecular dynamics simulation is very sensitive to the interaction potential. Thus, very accurate interaction potential is a key in this method.

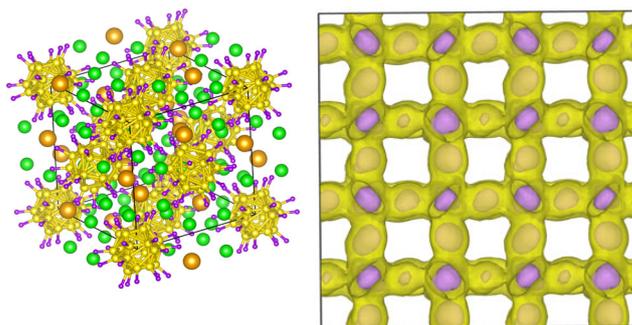


Fig1. The ball and stick model of $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ (left) at high temperature. The B and H are indicated by ball in yellow and pink respectively. The right figure indicates the Li^+ ion path inside the above structure.



MathAM-OILポスドク研究員

徳田 悟

s.tokuda@aist.go.jp

逆問題および間接測定の統計的方法論

広く物性物理学の有効モデルあるいは現象論モデルに基づく逆問題を統計科学の視点から研究しています。特に、測定の物理過程を考慮した、間接測定の方法論に興味を持っています。間接測定とは所望の物理量と関係付けられる別の量を測り、そこから換算することでその量を求める方法です。これは物理に従う逆問題とも捉えることができ、その解が一意に定まらない、不良設定問題に成り得ることは問題となります。統計科学の枠組みを用いることで、複数の解の候補から最適なものを一意に定めることが可能になります。その背後に潜む数理は機械学習の汎化能力とも密接に関連しており、統一的理解は重要な研究課題であると考えています。

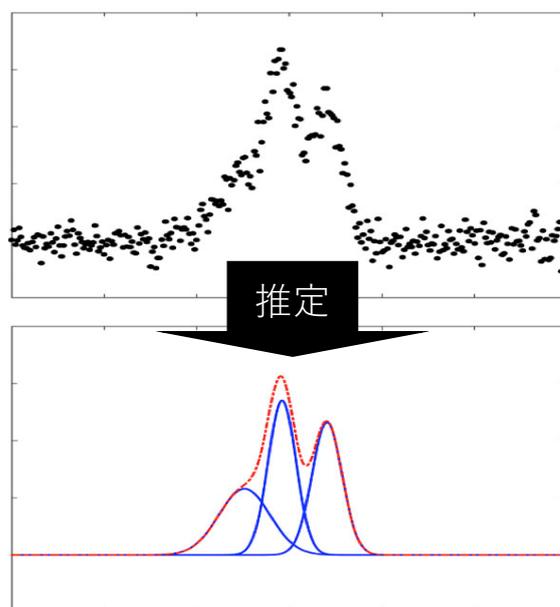


図1 エネルギー準位の間接測定。測定で得られたスペクトルのデータ(上)から、エネルギー準位、緩和時間、数密度といった、ピーク関数のパラメータを推定した結果(下)。



MathAM-OIL Post-Doc. Researcher
Nam NGUYEN
Nam.nguyen@aist.go.jp

Electronic and optical properties of 3D graphene systems

3D graphene is a new class of graphitic system where a single layer of carbon atoms is rolled into three-dimensional porous structure. This kind of structure has been recently realized in experiment and attracting great attention. While flat graphene shows excellent electronic and mechanical properties, those of its 3D cousin is mostly unknown. In this research, we're interested in revealing the effect of 3D curvature on graphene's electronic and optical properties. Specifically, we investigate the graphene-decorated triply periodic surface proposed by Mackay and Terrones.

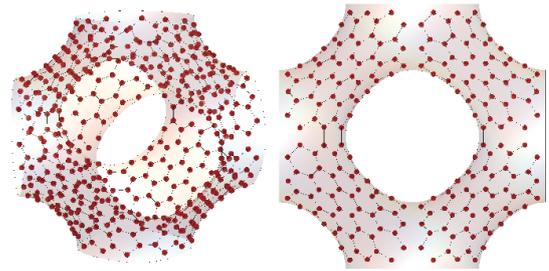


Fig. 1: (a) An unit cell of triply periodic 3D graphene. (b) Front view of (a).

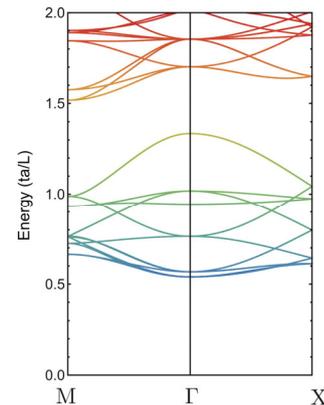


Fig. 2: Electronic band structure of 3D graphene system shown in Fig. 1.



MathAM-OILポスドク研究員
林 晋
shin-hayashi@aist.go.jp

トポロジカルなコーナー状態の数学的研究

ある種の絶縁体物質に対するトポロジーの研究を行っています。物性物理学において、ある種の絶縁体物質のエッジに局在した波動関数であって、系の摂動に対してロバストなもの存在が知られています。その背後には系のトポロジーが密接に関係することがわかっています。トポロジーとはある種の連続変形について不変な性質を研究する学問であり、

ここでのトポロジーは、摂動に対してロバストな性質の根拠を与えます。私は従来の物性物理学で議論されてきたトポロジーに対して、ある種二次的なトポロジーの定義を与えました。また、この二次的なトポロジーがコーナー(図1)状態と関連することが明らかになりました。手法としてはK理論や指数理論といった数学の理論を用います。現在はこのトポロジーの性質のさらなる解明、例えば系の形状との関係や、disorderに対する不変性の解明、などに向けて研究に取り組んでいます。このコーナーに関連したある種のトポロジーは、近年物性物理学でも”高次トポロジカル絶縁体”と呼ばれ、盛んに研究されています。

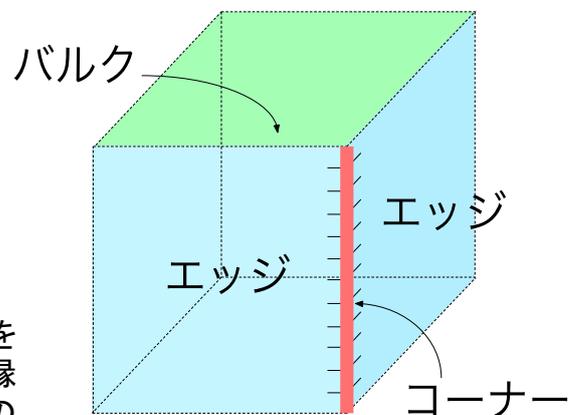


図1 バルクとエッジとコーナー



MathAM-OIL Post-Doc. Researcher
Rafael MONTEIRO
monteirodasilva-rafael@aist.go.jp



Phase separation models and pattern-formation

My research focuses on the use of infinite dimensional dynamical systems techniques and functional-analytic methods in multidimensional pattern formation, relying on matching techniques, asymptotic analysis and broad

tools from both PDE and spectral theory, building new machinery to deal with higher dimensional phenomena as contact angles between interfaces and asymmetrical grain-boundaries.

In an ongoing project in collaboration with N. Yoshinaga (MathAM-OIL), I have been studying grain-boundaries using the Swift-Hohenberg Equation using a great number of techniques from many areas, including analysis in periodic structures and harmonic analysis.

Sketch of contact angles of interfaces, in 2D Allen-Cahn model; see Monteiro, Rafael, and Arnd Scheel. "Contact angle selection for interfaces in growing domains." ZAMM 98.7 (2018): 1086-1102.



MathAM-OILポスドク研究員
吉村 幸徳
yoshimura.yukinori@aist.go.jp

トポロジカル絶縁体の表面状態に関する研究

トポロジカル絶縁体やその表面に現れる特異な電子状態の性質解明を目指した研究を行っています。物質表面の形状による電気伝導特性の制御を目指し、トポロジカル絶縁体の有効モデルを用いた数値計算を行っています。ある種のトポロジカル絶縁体では表面に立体構造をつくることにより、その縁に沿ったナノスケール幅の完全伝導チャンネル(図1の赤いライン)を作成できる事を提案しました。

近年、三次元物質の表面ではなく二つの表面がクロスすることによって伝導状態が現れる新しいタイプのトポロジカル絶縁体が提案され、このような物質のモデルを用いて角を挟む二つの表面の向きを変えたときの伝導状態の有無を数値計算により確認しています(図2)。

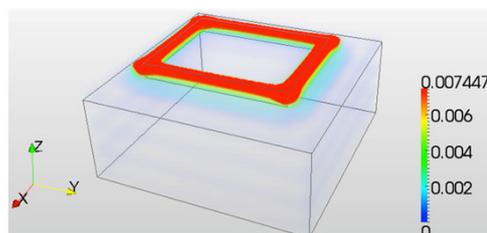


図1 トポロジカル絶縁体上の立体構造に現れるナノサイズの完全伝導チャンネル

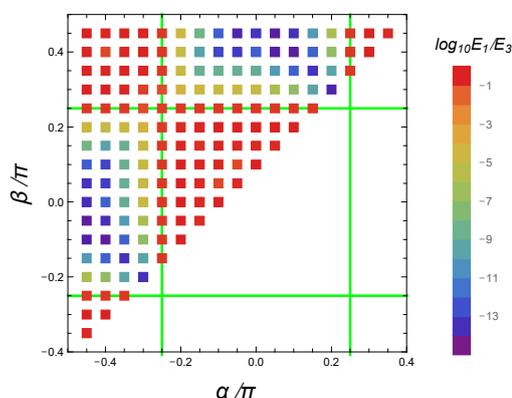


図2 角を挟む二枚の表面の向き(α , β)と伝導状態のギャップの大きさ



MathAM-OILポスドク研究員

世永 公輝

k-yonaga@aist.go.jp

量子を用いた新たな機械学習への挑戦

D-Waveをはじめとした量子計算機が登場し、様々な問題への応用が始まっています。現在の量子計算機は、主に最適化問題を高速に解くことに特化していますが、最近になり機械学習への応用が提案され大きな注目を集めています。

しかし量子機械学習は従来の機械学習を超える性能を本当に持つのでしょうか？また自然科学や材料科学にどのようなご利益をもたらすのでしょうか？

本研究ではこれらの問いに答えるべく、量子効果を用いた機械学習の理論的研究とその応用を進めています。またD-Waveによるシミュレーションも並行して行い、理論・実験の両面から量子機械学習の有用性を確立します。

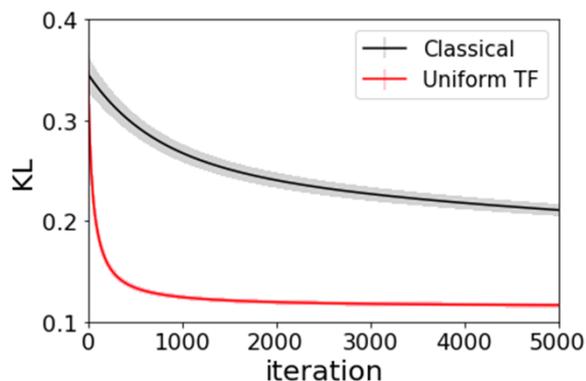
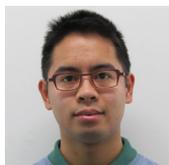


図1 量子機械学習の性能評価

従来の機械学習（黒線）と量子効果を取り入れた学習（赤線）の結果



MathAM-OIL Post-Doc. Researcher

Anh Khoa Augustin LU

augustin.lu@aist.go.jp

Uncovering the structure-property relationship in bulk metallic glasses

Metallic glasses are materials with outstanding mechanical properties, when prepared under appropriate conditions. This class of materials has short-range order but lacks long-range order. However, unlike crystals, their atomic structure remains poorly understood. This knowledge is crucial to understand the relation between the atomic configurations and the observed macroscopic properties.

By the use of atomistic modeling techniques such as molecular dynamics simulations, combined with methods for describing local atomic structures such as Voronoi tessellation, we study how the short-range order evolves towards the longer medium-range order in these systems. By doing so, we aim at uncovering the relationship between the structure and the properties of metallic glasses, which will allow to further enhance their properties for future applications.

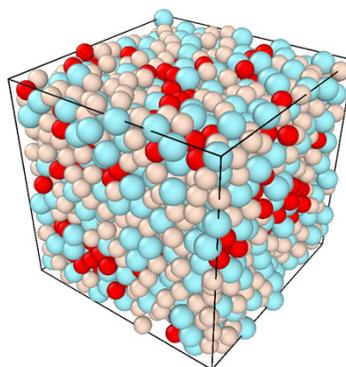


Figure 1: Atomic configuration of a $\text{Cu}_{64.5}\text{Zr}_{35.5}$ metallic glass obtained from molecular dynamics calculations. Zr atoms appear in blue. Cu atoms are colored in pink and red. After performing a Voronoi tessellation, Cu atoms that are centers of icosahedra are colored in red.



MathAM-OIL Post-Doc. Researcher
Zhen LU
lu-zhen@aist.go.jp

Three-dimensional bicontinuous nanoporous materials by vapor phase dealloying

Three-dimensional bicontinuous open (3DBO) nanoporosity has been recognized as an important nanoarchitecture for catalysis, sensing and energy storage. Dealloying, i.e. selectively removing a component from an alloy, is an efficient way to fabricate nanoporous materials. However, electrochemical and liquid-metal dealloying methods can only be applied to a limited number of alloys and usually require an etching process with chemical wastes.

Here we report a green and universal approach, vapor phase dealloying, to fabricate nanoporous materials by utilizing the vapor pressure difference between constituent elements in an alloy to selectively remove a component with a high partial vapor pressure for 3DBO nanoporosity. We demonstrated that extensive elements, regardless of chemical activity, can be fabricated as nanoporous materials with tunable pore sizes. Importantly, the evaporated components can be fully recovered. This environmentally-friendly dealloying method paves a new way to fabricate 3DBO nanoporous materials for a wide range of structural and functional applications.

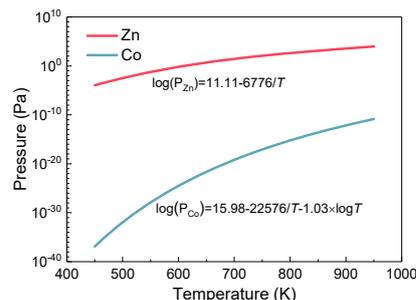


Figure 1. The relation between temperature and saturated vapor pressure of zinc and cobalt in a prototype Zn-Co alloy system.

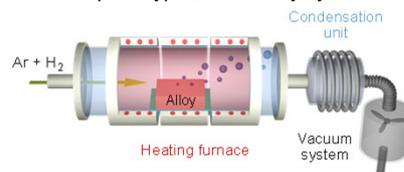


Figure 2. The schematic of the high-vacuum recyclable vapor phase dealloying system.

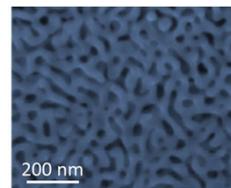


Figure 3. The scanning electron microscopy image of nanoporous cobalt with pore size 40 nm by vapor phase dealloying method.



MathAM-OIL Post-Doc. Researcher
Uyen Tu LIEU
uyen.lieu@aist.go.jp

Assemblies and properties of patchy particles

We study the dynamics of soft-matter such as nano-particles and colloids in non-equilibrium system. Our aim is to predict and control the structures and the properties of assembled particles with complex internal degrees of freedom. We simulate the structural formation of spherical patchy particles whose interaction is dependent on their orientations; such kind of particles are able to form complicated clusters. This study can be considered to have applications in materials design, for example, assembly particles into specific structures and devices, and the assembly in biological systems.

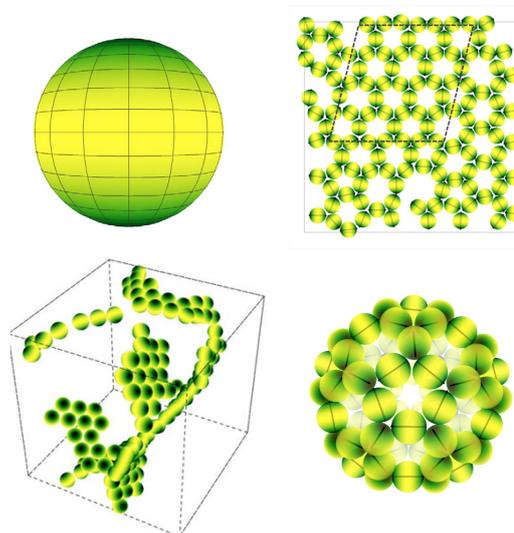


Fig.1 Assembly of patchy particles

Patchy particle whose patch of the same color is attractive (upper left), the appearance of Kagome lattice in confined plane (upper right), clusters in 3-D space (bottom left), and formation of soccer ball pattern on spherical surface (bottom right).



産総研・東北大 数理先端材料モデリング オープンイノベーションラボラトリ (MathAM-OIL)

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平2-1-1 東北大学材料科学高等研究所内



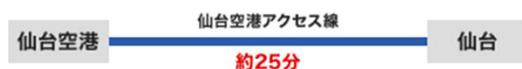
成田空港から



羽田空港から



仙台空港から

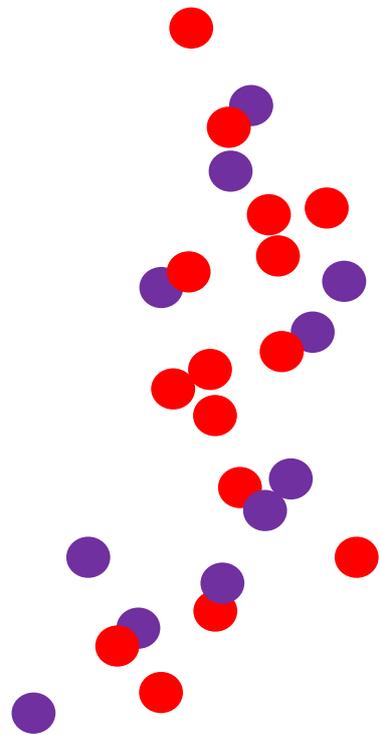


仙台駅から

仙台駅西口より徒歩にて約15分

仙台駅西口よりタクシーにて「東北大学片平キャンパス北門」まで約5分

地下鉄 東西線「青葉通一番町」より徒歩にて約10分



国立研究開発法人 産業技術総合研究所
産総研・東北大 数理先端材料モデリング オープンイノベーションラボラトリ
(MathAM-OIL)

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平2-1-1 東北大学材料科学高等研究所内

E-mail: matham-sec@aist.go.jp

代表電話: 022-237-8195

<https://unit.aist.go.jp/matham-oil/>

