

NEDO超超プロジェクトにおける 研究開発事例と今後の展開

2020年2月20日

Mi²i最終報告会

(国研) 産業技術総合研究所

機能材料コンピューティショナルデザイン研究センター

青柳 岳司

aoyagi.t@aist.go.jp

MIに関する国内の主なプロジェクト

材料
設計

超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

- ・マルチスケールシミュレーション開発
- ・高速試作・革新プロセス技術開発
- ・先端計測技術開発
- ・AIを活用した材料開発手法の開発

SIP革新構造材料/MIシステムの開発

- ・性能まで予測する開発システム構築
- ・各モジュール開発とその統合化
- ・プラットフォームの基盤構築 2014～2018

2016～

有機機能性材料
(誘電材料、断熱ポリマー、
機能性化成品(触媒)
CNTコンポジット)

施策間連携

SIP(第2期)統合型材料開発システム によるマテリアル革命 2018～

構造材料
(CFRP、耐熱合金、セラミクス)

2015～



情報統合型物質・材料イニシアティブ

- ・基礎データベースの整備
- ・データ解析ツールの開発
- ・物質探索の成功事例の創出

磁石材料
蓄電池材料
伝熱制御・熱電材料

物質
探索

有機材料

無機材料

無機材料

有機材料

機能材料

構造材料

プロジェクト(2016-2021)の狙いとアウトプット目標

＜プロジェクトの狙い＞

主に**有機系材料**を対象にした従来に無い材料設計シミュレーションの開発や人工知能(以下、AI)を活用した材料開発支援等を、革新的な試作プロセス開発や評価計測技術開発と共にナショナルプロジェクトとして行うことで、これまで“経験と勘”に基づいた材料開発文化に変革の兆しを誘発すると共に、**競争力の高い日本の素材産業の優位性を確保する。**

＜アウトプット目標＞

高性能材料・部材の研究開発支援を可能とする**高度な計算科学、高速試作・革新プロセス技術、先端ナノ計測評価技術**を駆使して革新的な**材料基盤の構築**を目指す。これにより従来の材料開発と比較して**試作回数・開発期間の1/20の短縮**を目指す。

基本計画書より抜粋

超超PJのコンセプト: 計算・プロセス・計測の連携

原子

反応・
重合

低分子/
高分子

高次
構造

高分子反応/
表面修飾

複合材料(有機/
有機・無機)

成形加工
(積層/配向)

ハイスループット合成



マルチスケール計算
シミュレータ技術

計算機支援
ナノ構造設計
基盤技術

機能性材料開発

高速・革新
プロセス
技術開発

高速かつ自在な製造
が可能なプロセス技術

先端
ナノ計測評価
技術開発

機能と構造の関係などを
精密に解析する先端計測技術

計算/AI・プロセス・計測の
連携による研究開発促進



スーパー
コンピューター

電子分光型電子顕微鏡



陽電子消滅法



連続押出発泡

実施体制

PL: 村山宣光

(産総研 理事、材料・化学領域長)

METI

NEDO

集中研@産総研



先端素材高速開発技術研究組合 (ADMAT)

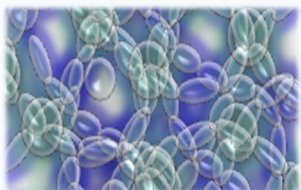
- 設立年月日 : 2016年7月12日
- 理事長 : 腰塚國博(コニカミノルタ(株) 取締役)
- 組合員(18社) : 出光興産(株)/ 宇部興産(株)/ (株)カネカ/ コニカミノルタ(株)/ JSR(株)/ 昭和電工(株)/ 積水化成品工業(株)/ DIC(株)/ 東ソー(株)/ 東レ(株)/ 日鉄ケミカル&マテリアル(株)/ (株)日本触媒/ 日本ゼオン(株)/ パナソニック(株)/ 日立化成(株)/ 古河電気工業(株)/ (株)村田製作所/ 横浜ゴム(株)/

基盤技術開発: シミュレータ開発

多様な材料・機能に対応したシミュレータ群 (2019/4初期バージョン公開)

高機能誘電材料

高耐電圧かつ高誘電性の有機・無機ハイブリッドコンデンサ等

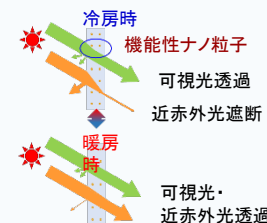


開発シミュレータ

- ・電気・光等のキャリア輸送シミュレータ
- ・界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ(I, II)
- ・モンテカルロフルバンドデバイスシミュレータ
- ・誘電率等の外場応答物性シミュレータ
- ・電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ(I, II)
- ・汎用インターフェース(拡張OCTA)
- ・フィラー充填系コンポジットシミュレータ
- ・ナノカーボンコンポジット用シミュレータ
- ・反応性流体シミュレータ

半導体材料

高透明度なサーモクロミックフィルム、有機半導体等



高性能高分子材料

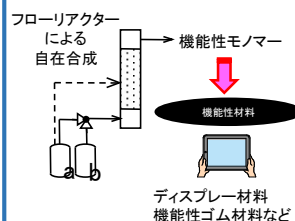
高性能コンポジット材料、エレクトロニクス材料等

自動車系部品など



機能性化成品 (超高性能触媒)

天然物やCO₂を原料とする機能性化成品・材料等



ナノカーボン材料 (CNT・グラフェン)

軽量且つ高性能な自動車用ワイヤーハーネス、導電線や放熱材料等



自動車用ワイヤーハーネス、モーター用巻線など



導電性ゴム、耐熱性樹脂、放熱材料など



フレキシブルディスプレイ・照明など

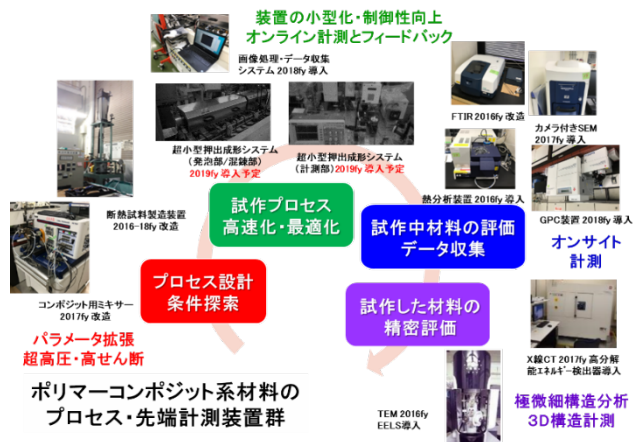
基盤技術開発: プロセス・計測技術開発

プロセス・計測: 4つの開発項目において試作・検証装置群を構築

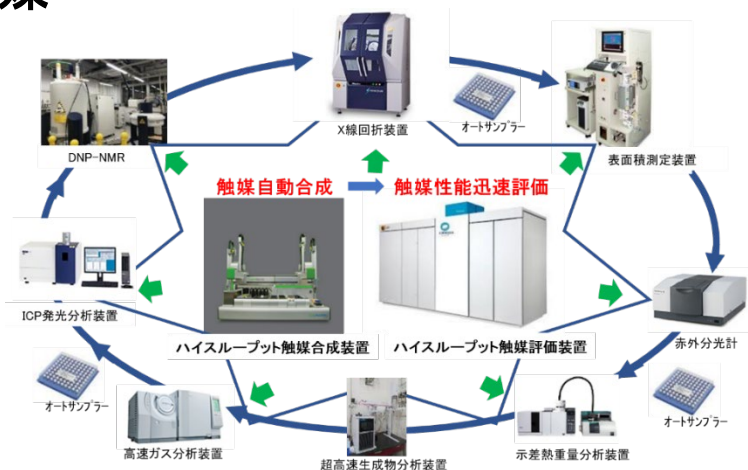
ナノ粒子分散ポリマー



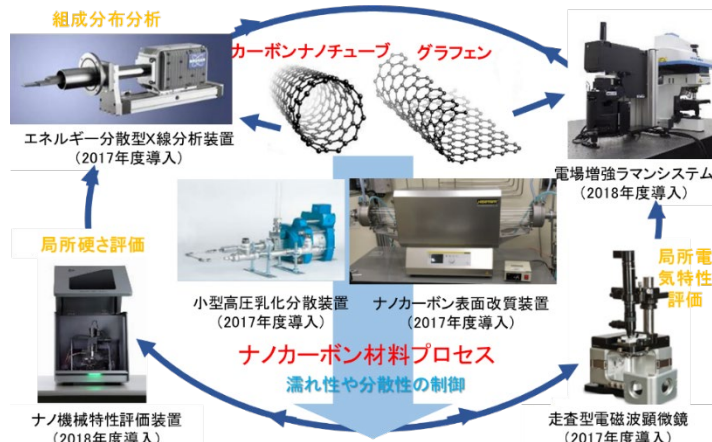
混練・発泡



触媒



ナノカーボン材料



機能性材料開発

主として企業研究者が、
モデル素材を持ち込み
開発された基盤技術を
適用した材料開発を実施
する

研究開発テーマ名

(1) 半導体材料

- 1 高機能光学材料の研究開発
- 2 有機半導体材料の研究開発

(2) 高機能誘電材料

- 3 高周波フレキシブル誘電材料の研究開発
- 4 電場応答型高分子アクチュエータ材料の開発
- 5 有機・無機ハイブリッド誘電材料の研究開発

(3) 高性能高分子材料

- 6 複合系の反応設計の研究開発
- 7 樹脂/無機フィラー複合材料の研究開発
- 8 機能性ゴム材料の研究開発
- 9 フレキシブル透明フィルム(熱硬化性樹脂)の研究開発
- 10 ナノ発泡断熱材料の研究開発
- 11 スーパーナノコンポジット/アロイ材料の開発
- 12 革新分離材料の研究開発
- 13 実験データベースを用いた逆問題解決 -異方性導電性フィルムデータベースの活用-

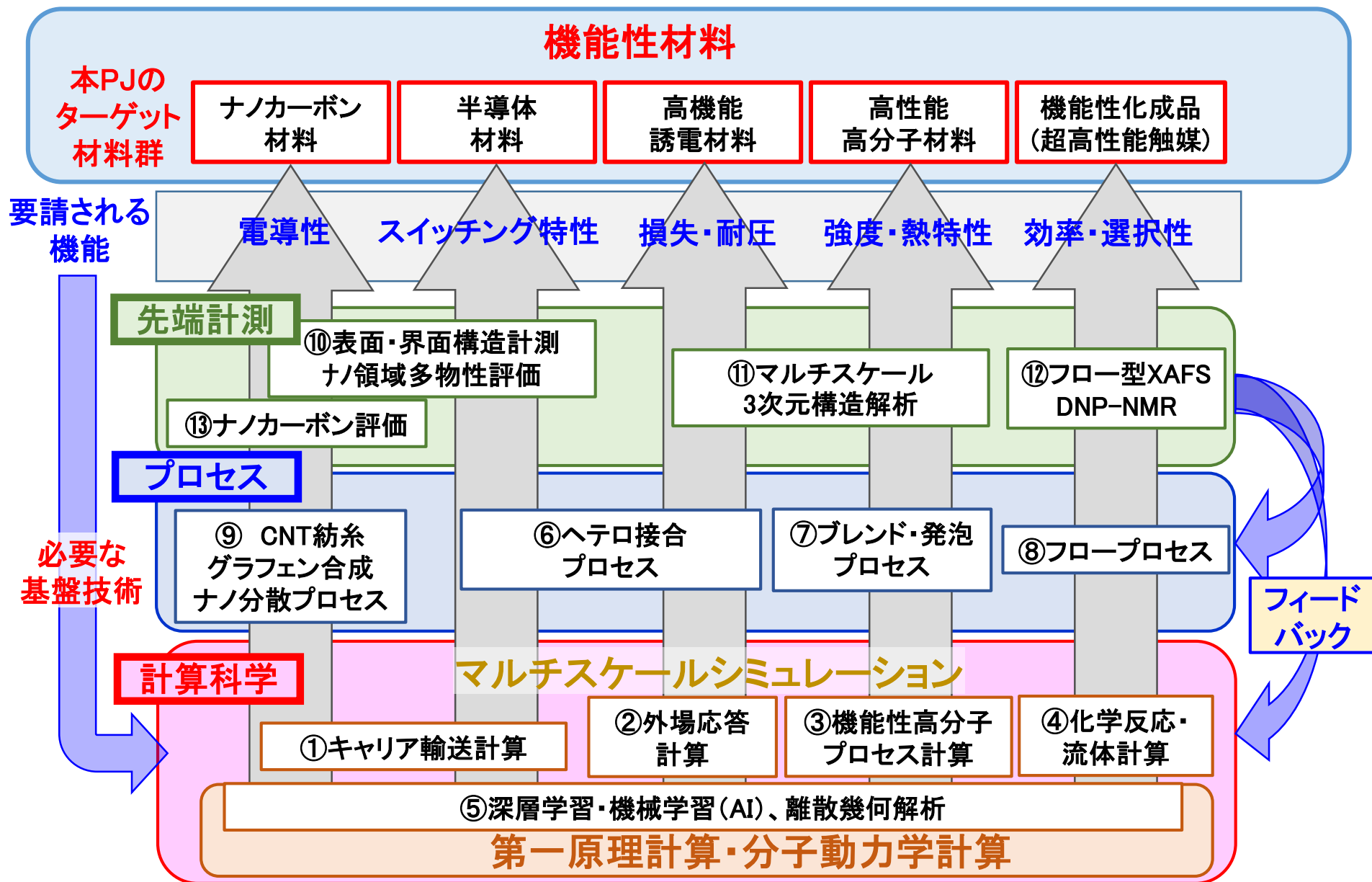
(4) 機能性化成品(超高性能触媒)

- 14 多次元高度構造制御金属ナノ触媒の研究開発
- 15 CO₂を利用する有用化学品合成技術の研究開発
- 16 天然資源からゴム材料の研究開発

(5) ナノカーボン材料

- 17 第三成分添加CNT高機能複合材料の開発
- 18 CNT線材の開発
- 19 大面積グラフェン高速合成および積層技術の基盤開発

基盤技術の活用による機能性材料の開発



1. 拡張OCTAの開発
2. 液晶エラストマーの機械的特性予測
3. フィラー充填系高分子コンポジットの流動解析

・ プレスリリース

1. 人工知能(AI)で触媒反応の収率を予測:2018/1/31
2. ナノ粒子でプラスチックの発泡を微細で均質にする方法を開発:2018/11/26
3. 人工知能(AI)を用いてポリマー設計・検証サイクルの試行回数を大幅低減:2018/11/27
4. 革新的機能性材料開発のためのマルチスケールシミュレーター群を開発
ー国内産業による材料開発期間の短縮を目指して開発したシミュレーター群を公開ー:2019/4/1
5. バイオエタノールからブタジエン合成の高速開発
ー世界最高の生産性を有する触媒システムを短期間で開発ー:2019/7/22
6. マイクロ波加熱による機能性酸化物ナノ粒子の高速合成法を開発
ー機能性ナノ粒子分散材料の開発期間短縮に貢献ー:2019/10/15
7. 走査型電子顕微鏡での元素組成分析を高い空間分解能で実現
ーカーボンナノチューブの表面官能基の均一性を微細構造レベルでイメージングー:2019/11/5

・ 公開説明会

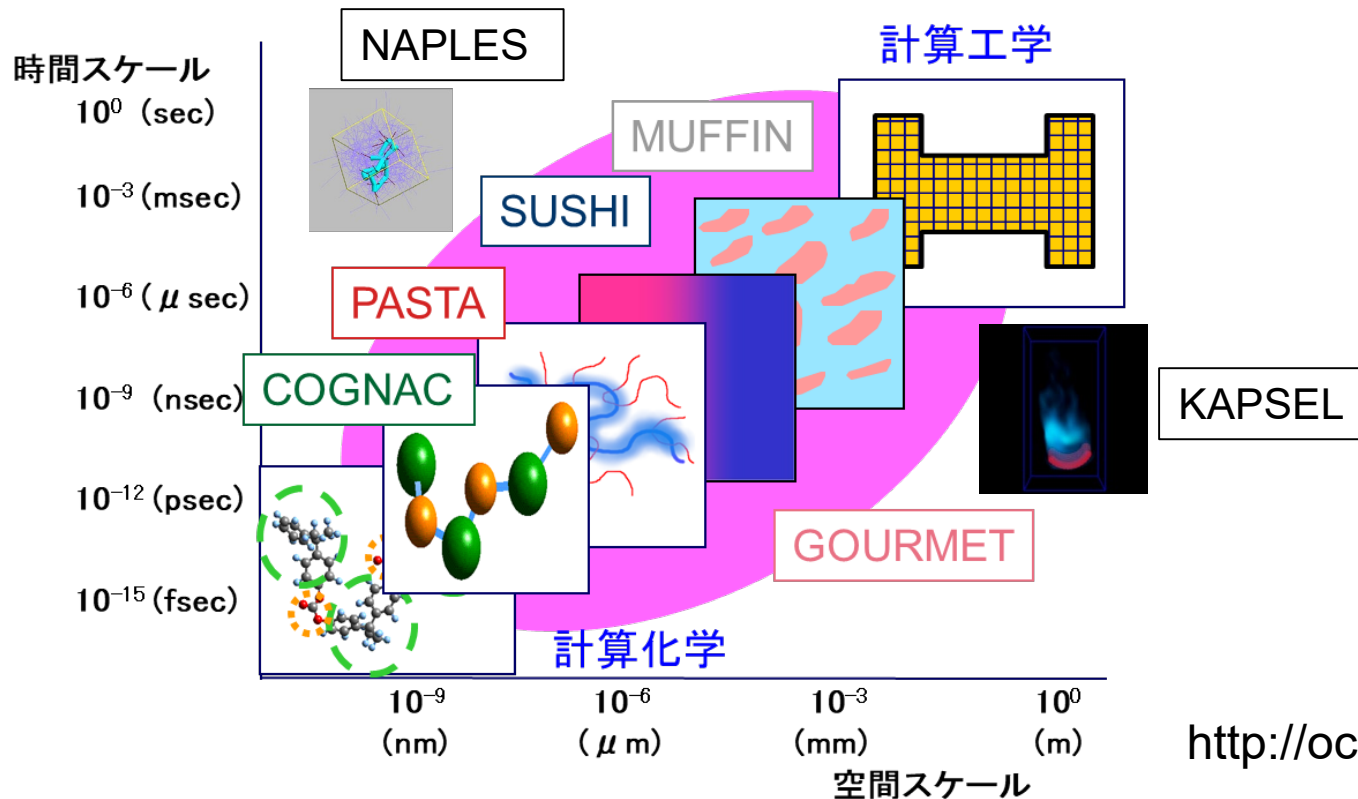
1. ナノテク2019出展(2019/1/30-2/1)
2. マルチスケールシミュレーター群公開説明会(2019/4/12)
3. PCoMS共催 OCTA講習会・トレーニング(2019/7/17)
4. CSJ化学フェスタにて事例紹介(2019/10/17)
5. NEDOフェスタ in 関西にて拡張OCTA講習会・トレーニング(2019/12/18)
6. ナノテク2020出展(2020/1/29-31)
7. **2019年度公開成果報告会(2020/4/13)** (<https://www.admat.or.jp/>)

1. 拡張OCTAの開発
2. 液晶エラストマーの機械的特性予測
3. フィラー充填系高分子コンポジットの流動解析

1. 拡張OCTAの開発

高分子材料開発のための統合シミュレータ O_{CTA}

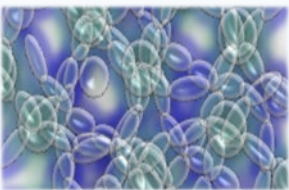
- NEDOプロ(1998-2002)において開発された統合システム
- ミクロ～マクロ間のスケールをカバーする複数のシミュレーションプログラム (エンジン) とユーザーインターフェース



<http://octa.jp/>

高機能誘電材料

高耐電圧かつ高誘電性の有機・無機ハイブリッドコンデンサ等



高性能高分子材料

高性能コンポジット材料、エレクトロニクス材料等 自動車系部品など

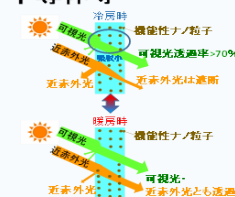


開発シミュレータ

- ・電気・光等のキャリア輸送シミュレータ
- ・界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ(I, II)
- ・モンテカルロフルバンドデバイスシミュレータ
- ・誘電率等の外場応答物性シミュレータ
- ・電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ(I, II)
- ・汎用インターフェース(拡張OCTA)
- ・フィラー充填系コンポジットシミュレータ
- ・ナノカーボンコンポジット用シミュレータ
- ・反応性流体シミュレータ

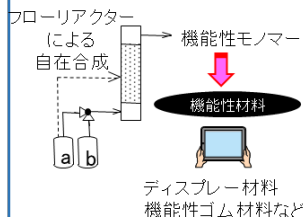
半導体材料

高透明なサーモクロミックフィルム、有機半導体等



機能性化成品 (超高性能触媒)

天然物やCO₂を原料とする機能性化成品・材料等



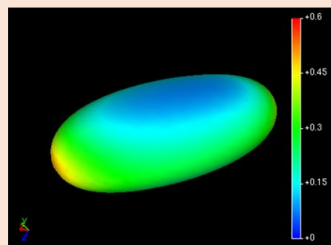
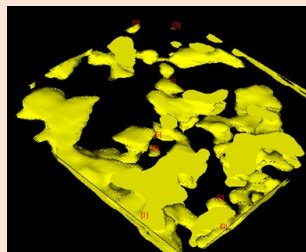
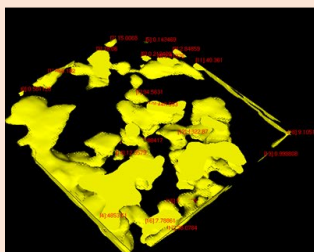
ナノカーボン材料 (CNT・グラフェン)

軽量且つ高性能な自動車用ワイヤーハーネス、導電線や放熱材料等



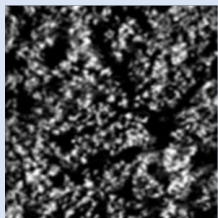
拡張OCTAにおいて開発された機能・ツール

大規模データ、実験との連携、機械学習への連携に向けたシステムの強化・拡張

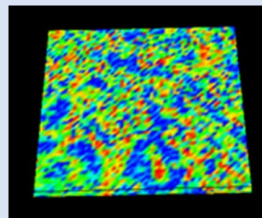
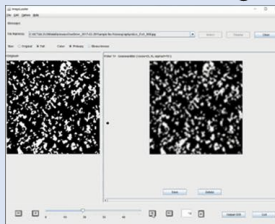


大規模データ対応、
解析機能強化：
拡張GOURMET

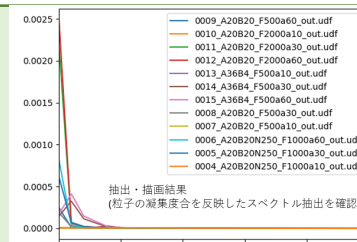
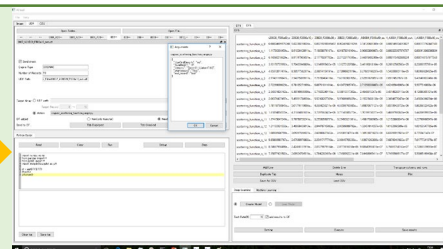
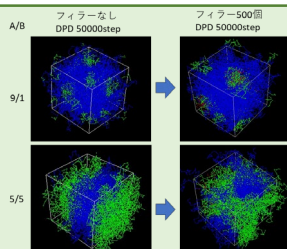
TEMデータ



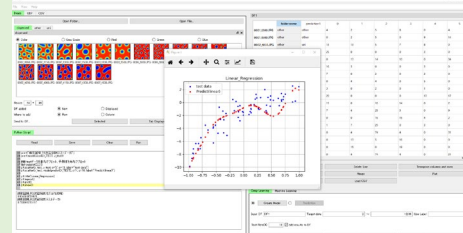
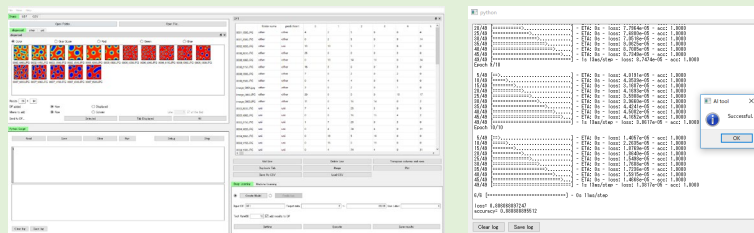
開発ソフト： Image loader OCTA入力データ（2成分の濃度）



実験データとの連携：
ImageLoader

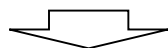


機械学習との連携：
AITool



拡張GOURMETの機能：界面描画・解析機能

- 界面：高分子複合材料の機能・性能に大きく影響

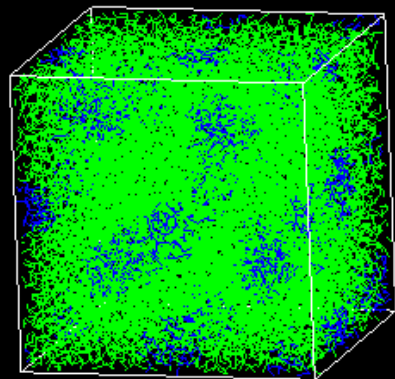


拡張GOURMETでは、OCTAのシミュレーション結果に対する
界面の描画・解析機能を実装

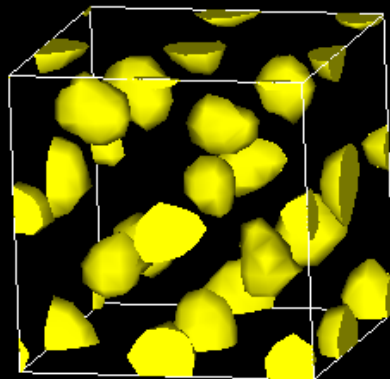
例 $A_5-B_{73}-A_5$ トリブロックポリマーの一軸伸長分子動力学シミュレーション
(OCTA/COGNAC のサンプルシミュレーション; sample¥tpe2¥out¥a5b73a5_out.udf)

ポリマーがミクロ相分離し、 A/B 界面を形成

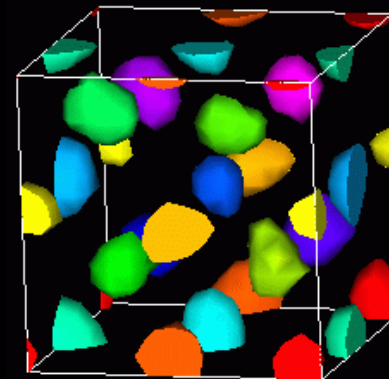
オリジナルGOURMET



オリジナルGOURMET



拡張GOURMET (16色表示)

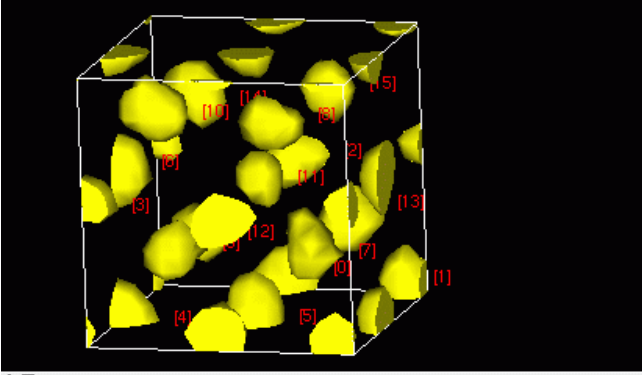


界面解析機能

表面積、領域体積、領域重心座標を取得可能

ファイル出力可能

File View Display Picking Python Options Tool Window Help



Python: Clear Load... Save... Save Lib...

Run

```
list = getIsosurfaceValues(option=2, location=3,  
print(list)
```

undo redo

Clear Log

0 surface
end show
[[143.7702873027653, 111.08468647209472, 159.7312856

Draw Object

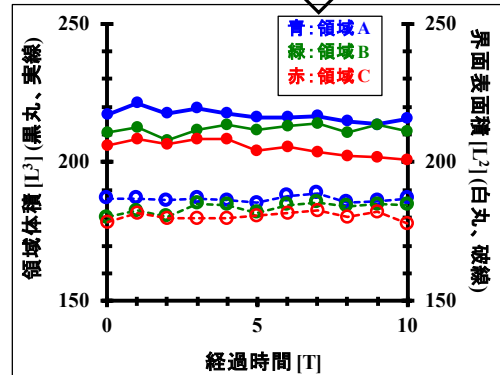
0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 Initial #0 0 / 10

データ取得

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	time	d1_a	d2_a	d3_a	d4_a	d5_a	d6_a	d7_a
2	0	186.9436	180.1639	178.6653	175.761	168.6848	166.2327	162.23
3	1	187.0921	182.6328	181.8545	177.0438	166.2451	165.063	163.31
4	2	186.4389	180.5816	179.8884	176.0128	168.0994	164.4397	162.33
5	3	187.1213	185.2682	179.8894	176.2728	169.8607	164.8465	163.18
6	4	186.4293	184.6938	179.8672	175.4857	167.4832	163.9122	162.9
7	5	185.2953	181.9132	180.7088	174.8811	168.4552	165.9065	163.26
8	6	187.9339	184.7258	181.5886	174.9727	167.3554	165.377	164.58
9	7	189.9001	195.6200	189.6489	175.9794	169.5294	164.9549	164.59

界面について
数値解析

AI Toolを用い
たデータ解析



File View Display Picking Python Options Tool Window Help

Run

Clear Log

0 surface
end show
[[143.7702873027653, 111.08468647209472, 159.7312856

Draw Object

0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 Initial #0 0 / 10

データ取得

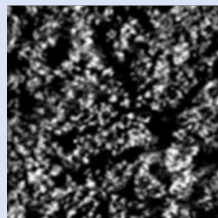
拡張OCTAにおいて開発された機能・ツール

大規模データ、実験との連携、機械学習への連携に向けたシステムの強化・拡張

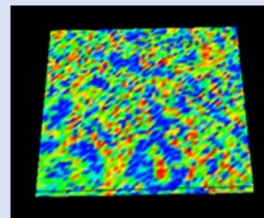
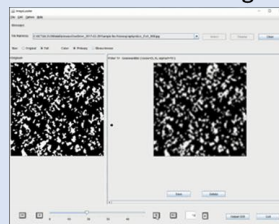


大規模データ対応、
解析機能強化：
拡張GOURMET

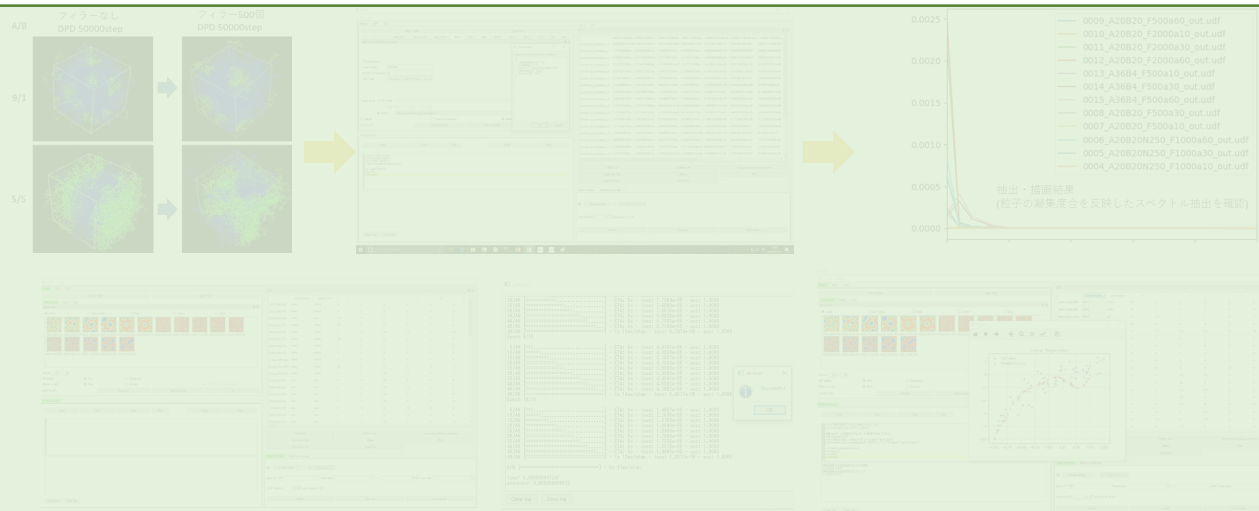
TEMデータ



開発ソフト： Image loader OCTA入力データ（2成分の濃度）



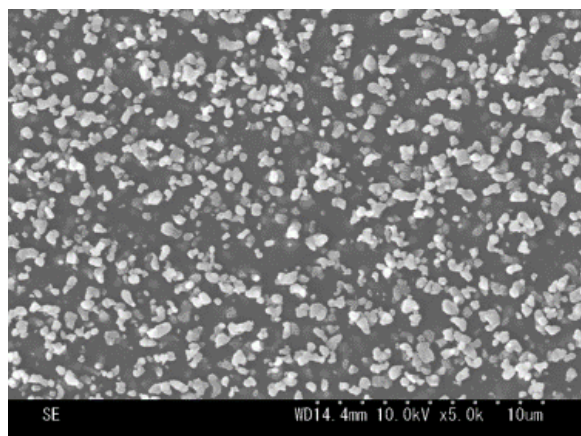
実験データとの連携：
ImageLoader



機械学習との連携：
AITool

Image Loaderの機能：画像データの解析

例



樹脂／無機ファイラー複合材料の
電子顕微鏡画像

真円度0.5-1.5の粒子を赤色で表示

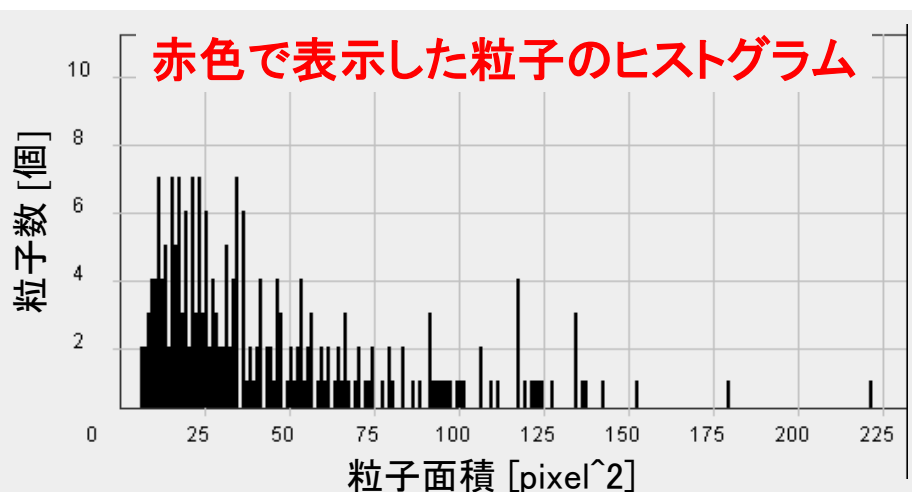
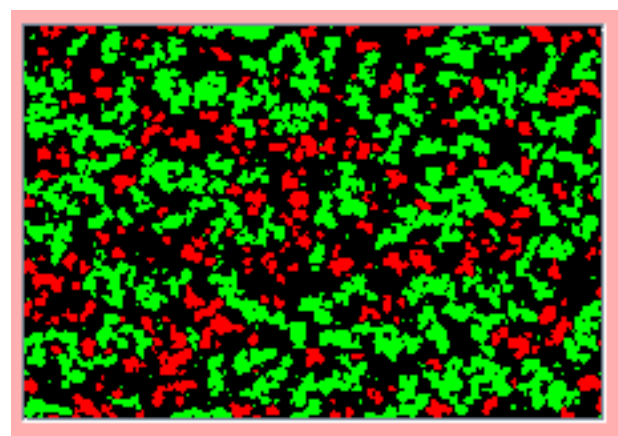
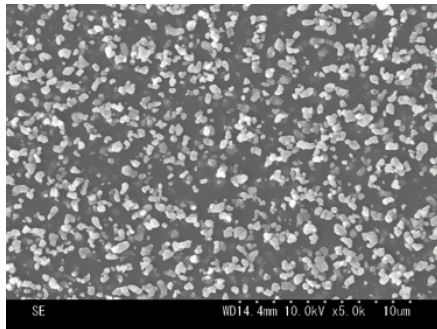


Image Loaderの機能:

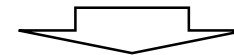
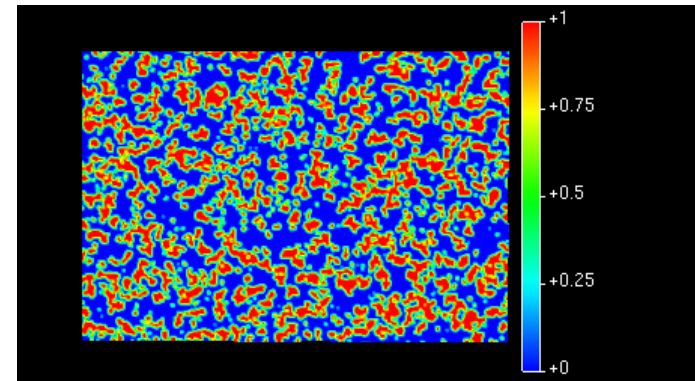
画像ファイルからシミュレーション用ファイルへの変換

例

樹脂／無機フィラー複合材料の
電子顕微鏡画像

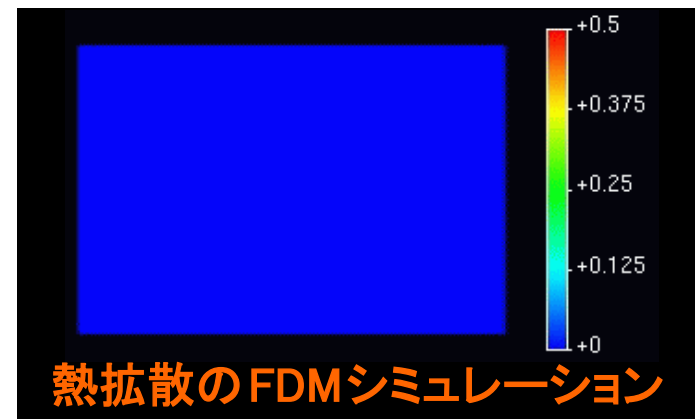


シミュレーション用ファイル (UDFファイル)



OCTAによるシミュレーション

- MDシミュレーション (COGNAC)
- SCFシミュレーション (SUSHI)
- FEM, FDMシミュレーション (MUFFIN)



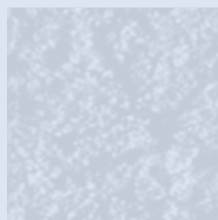
拡張OCTAにおいて開発された機能・ツール

大規模データ、実験との連携、機械学習への連携に向けたシステムの強化・拡張

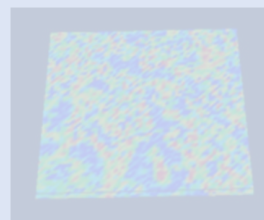


大規模データ対応、
解析機能強化：
拡張GOURMET

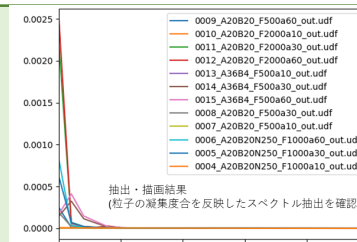
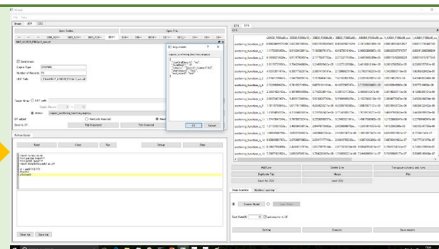
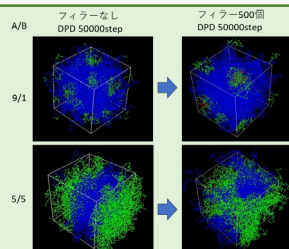
TEMデータ



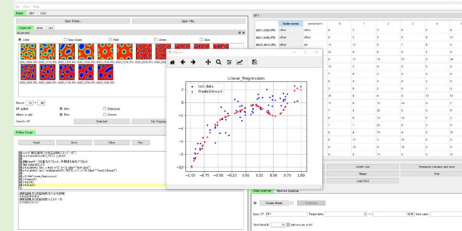
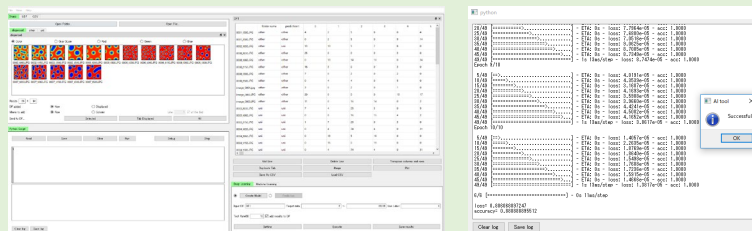
開発ソフト： Image loader OCTA入力データ（2成分の濃度）



実験データとの連携：
ImageLoader



機械学習との連携：
AITool



AI Toolの機能

OCTAシミュレーター出力(構造化データ)、実測画像データ等処理し、機械学習ツールを起動する統合インターフェース

単純な配列構造への変換

The screenshot shows the AI Tool interface with several key components and annotations:

- データの入ポート (CSV、UDF、画像)**: A box pointing to the 'Image' and 'UDF' tabs and the 'Open File...' button.
- データフレーム (データの確認と前処理)**: A box pointing to the 'DF1' data frame viewer, which displays a table of data.
- Python**: A box pointing to the 'Python Script' editor, which contains a script for data processing and machine learning.
- 機械学習 (Scikit-learn利用)** and **深層学習 (TensorFlow利用)**: A box pointing to the 'Machine Learning' section, which includes a dropdown menu for selecting models like 'SVC', 'MLP', 'PCA', and 'k-means'.

Red arrows and the word '操作' (Operation) indicate the workflow: Data Import → Data Frame → Python Script → Machine Learning.

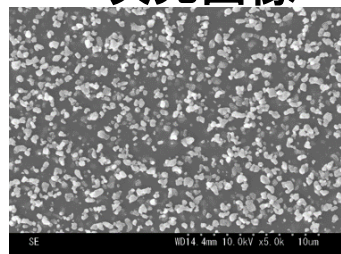
	409	4091	4092	4093	4094	4095
Demo243_2_01.jpg	125.0	175.0	165.0	98.0	110.0	129.0
Demo24						
Demo24						
Demo24						
Demo24						
Demo24						
Demo24						

```
1 import pandas as pd
2 import numpy as np
3 from sklearn.model_selection import train_test_split, GridSearchCV, cross_val_score, StratifiedKFold
4 from sklearn import svm
5 from sklearn import preprocessing
6 from sklearn.pipeline import Pipeline
7 from sklearn.externals import joblib
8 import time

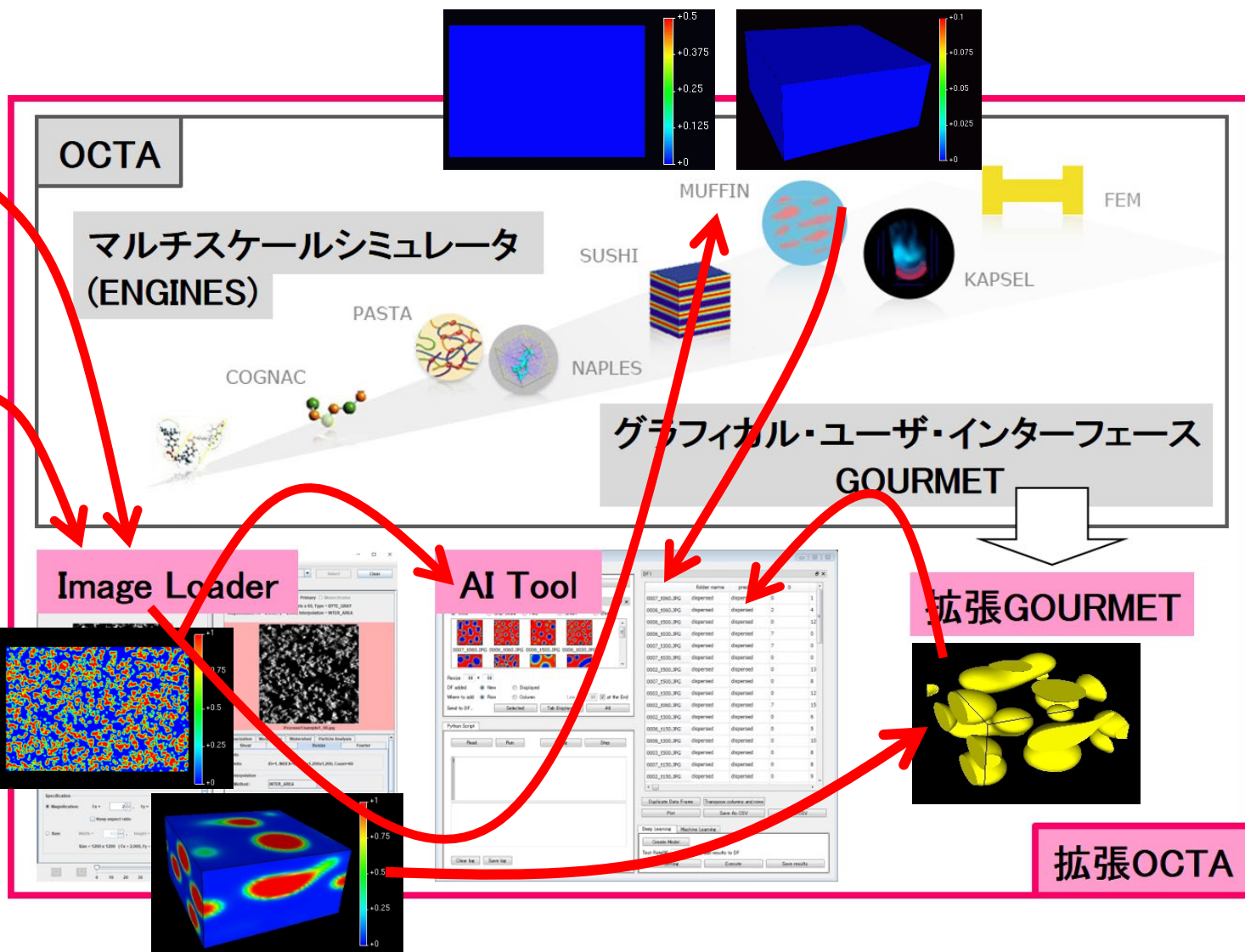
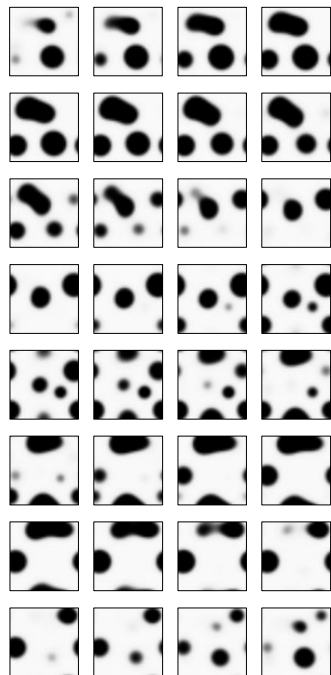
[10 10]
dual_coef
[[-1.21539529 -1.25665366 -1.04765929 -0.6
-1.06781206 -0.84414871 -0.52293552 -0.6
0.97347964 0.95631215 1.07159803 0.95
1.01832683 1.00511044]]
```


実験・シミュレーション・機械学習の連携

二次元画像



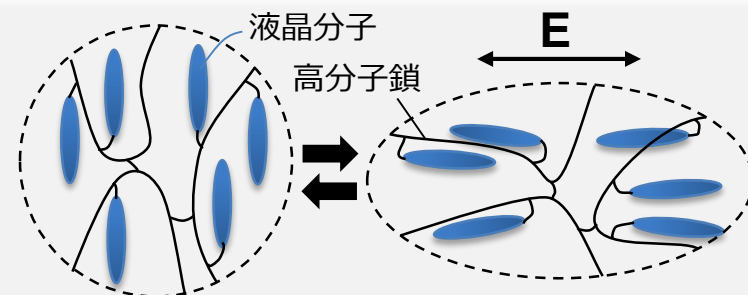
三次元断層画像



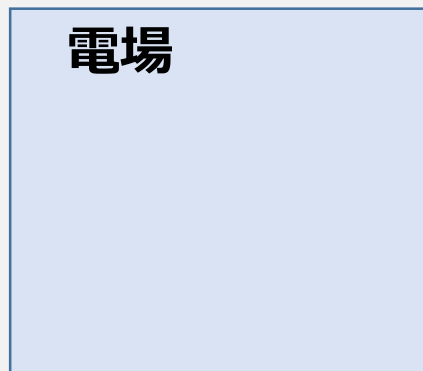
1. 拡張OCTAの開発
2. 液晶エラストマーの機械的特性予測
3. フィラー充填系高分子コンポジットの流動解析

2. 液晶エラストマー(LCE)の機械的特性予測

液晶 + **エラストマー** の複合材料
外場に応答し、マクロな変形が誘起される



電場



T. Okamoto et al., Soft Matter (2011)

熱



M. L-Valdeolivas et al., Macromol. Rapid. Commun (2018)

光



A.H. Gelebart et al., Adv. Matter (2017)

ソフトアクチュエータ材料として着目されている

課題

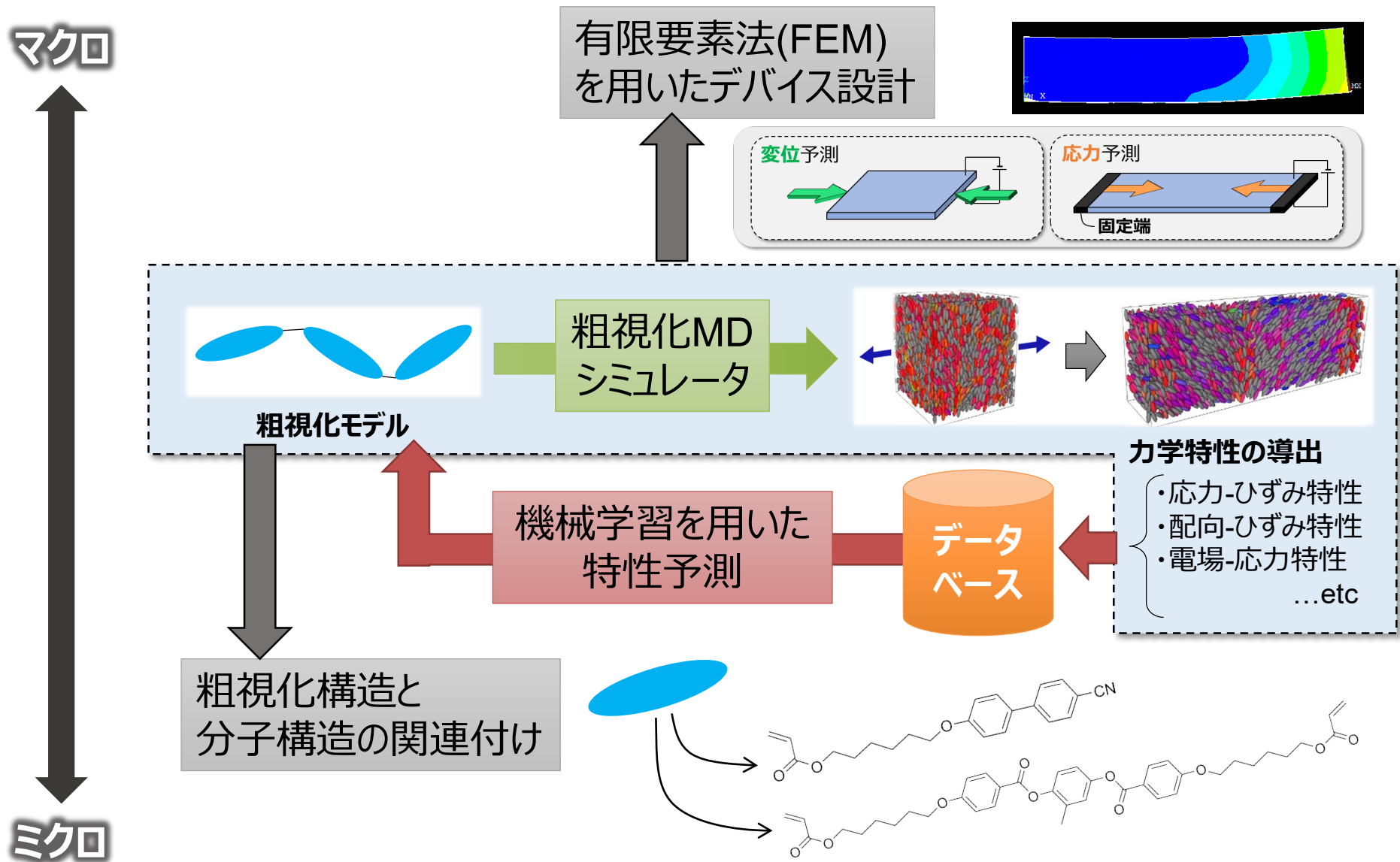
- ✓ 変形のメカニズムについての**分子レベル**での理解が不十分
- ✓ 力学特性改善に向けた**分子設計指針**が未確立

アプローチ

粗視化分子動力学計算を用いたLCEの力学特性シミュレーション

まずは粗視化MDで扱える物理パラメータの最適設計を目指す

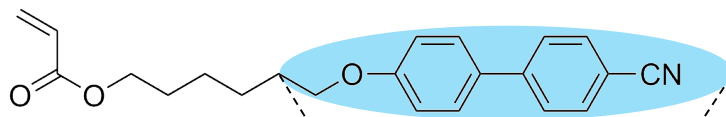
シミュレーションと機械学習による階層的 material 設計



LCEの粗視化モデル

➤ 液晶モノマーを**楕円体状の粒子**（Gay-Berne(GB)粒子）で粗視化

(例)



システムサイズ
合計 8000 GB粒子

非結合相互作用
Soft-Core GBポテンシャル

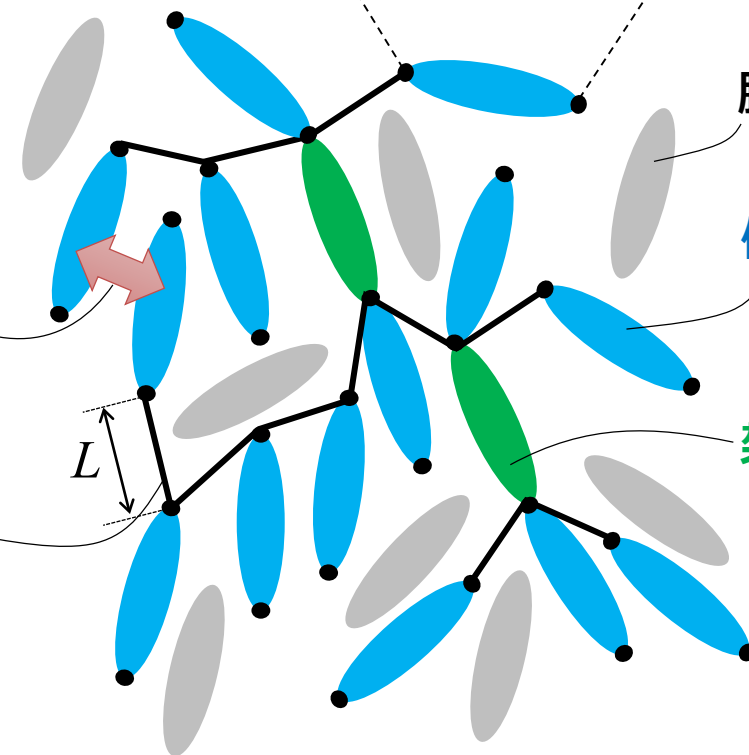
結合相互作用
調和振動子型ポテンシャル

- 平衡長： L
- 主鎖骨格を形成

膨潤用低分子液晶
4000 GB粒子

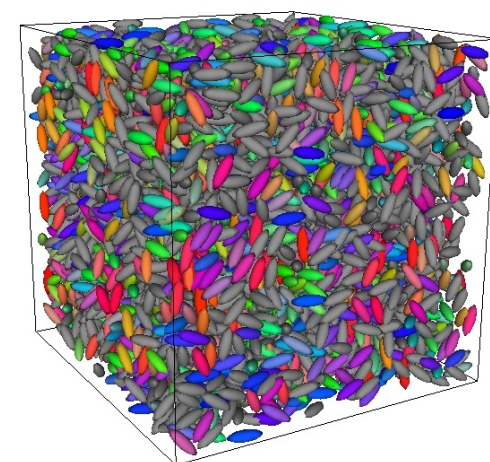
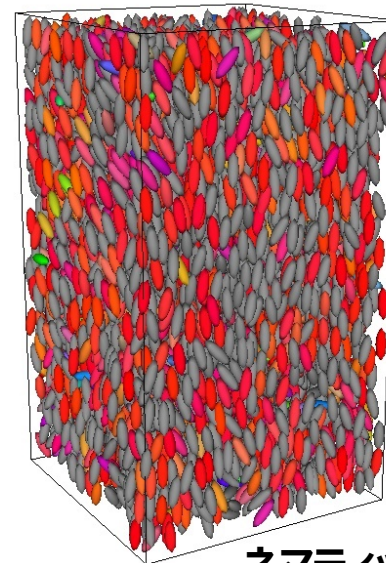
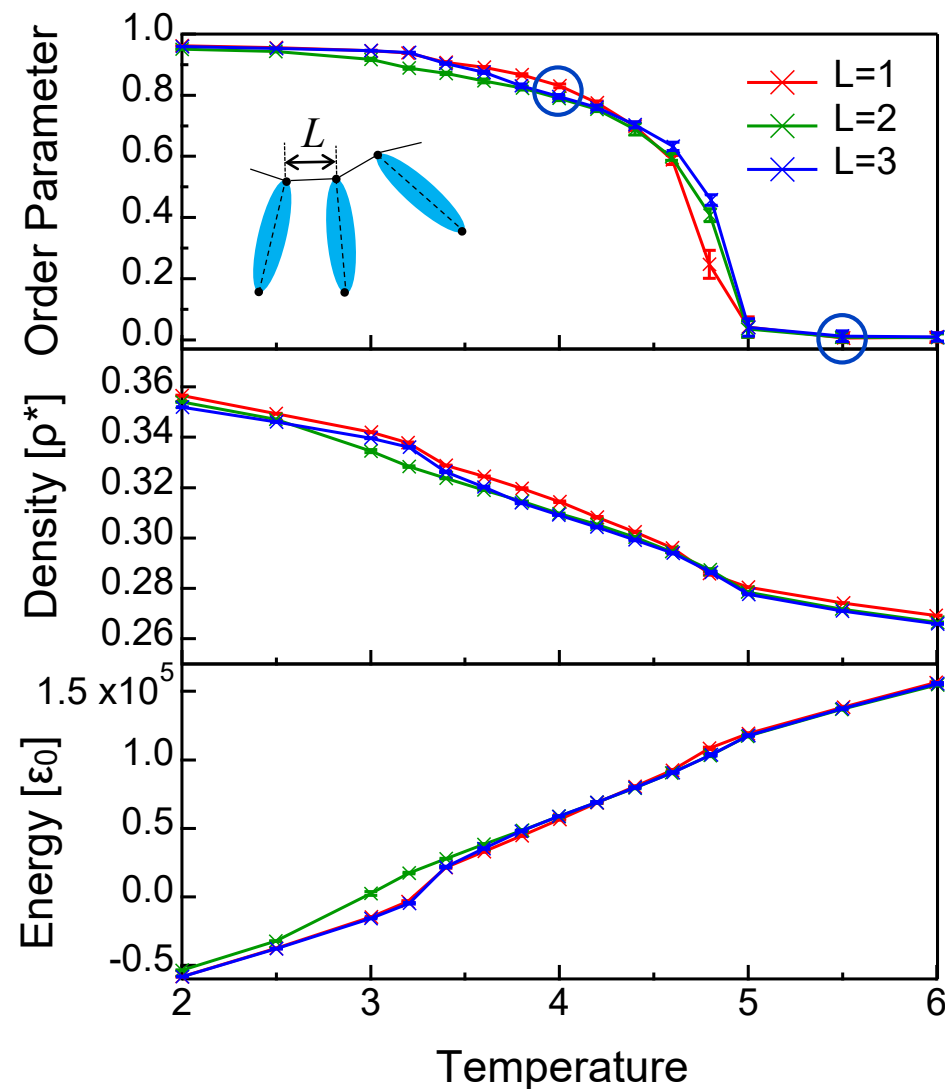
側鎖用液晶分子
3750 GB粒子
(30 GB x 125鎖)

架橋用液晶分子
250 GB粒子

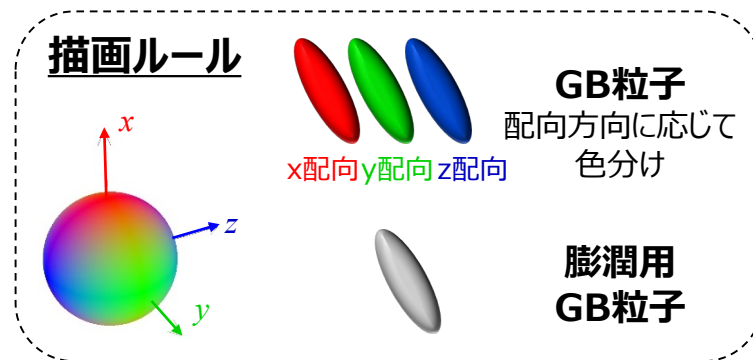


計算結果 ～相転移挙動～

➤ ステップ状に降温させ、オーダーパラメータをプロット



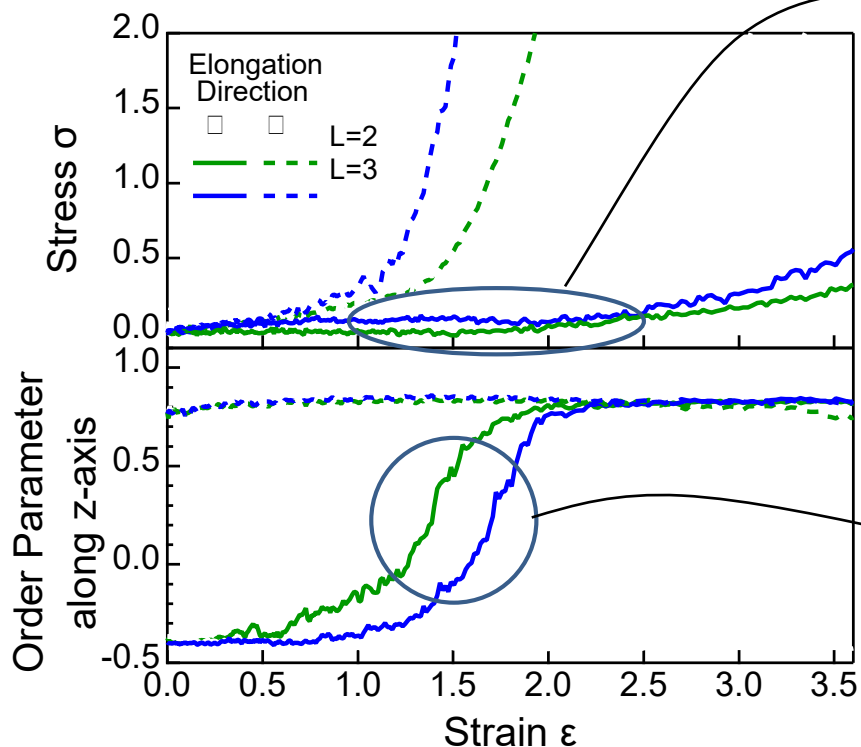
結合距離 L の長さに関わらず、
 $T^*=5.0$ にて相転移を観測



計算結果 ～力学特性 (L=2,3)～

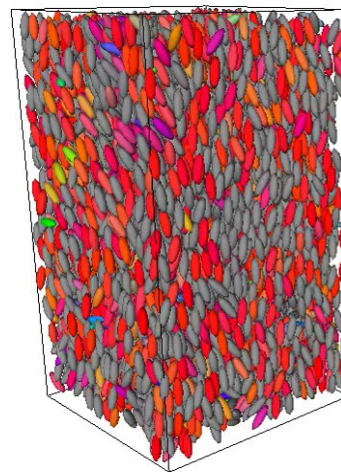
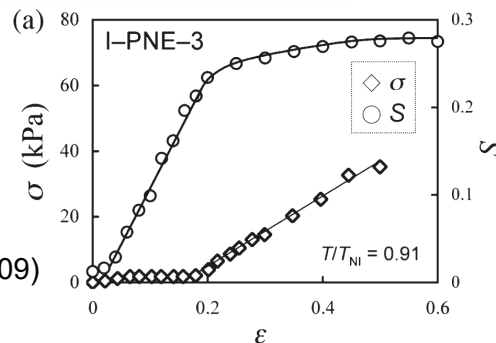
- $T^*=4.0$ において、配向方向と垂直($\perp$)および平行($\parallel$)方向に一軸伸長計算を実施

L=2,3のとき



GB粒子が回転している間は
伸長による応力変化が極めて小さい
(Soft Elasticity)

K. Urayama et al., Macromol. (2009)



伸長によりGB粒子が回転

Soft Elasticityに着目した特性予測

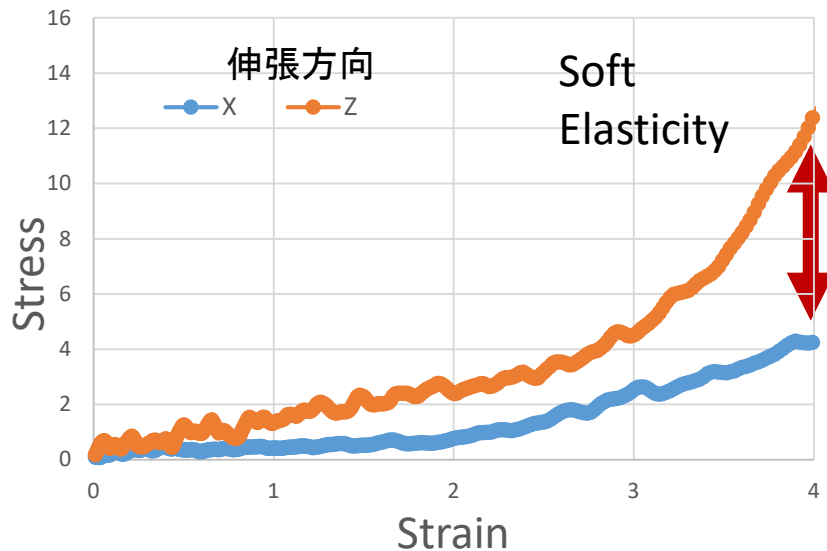
Soft Elasticityが発現するかどうかは、モデルの設定条件に依存する

- 発現に関連深いパラメータは何か？
- より大きなSoft Elasticityを得るための指針は何か？

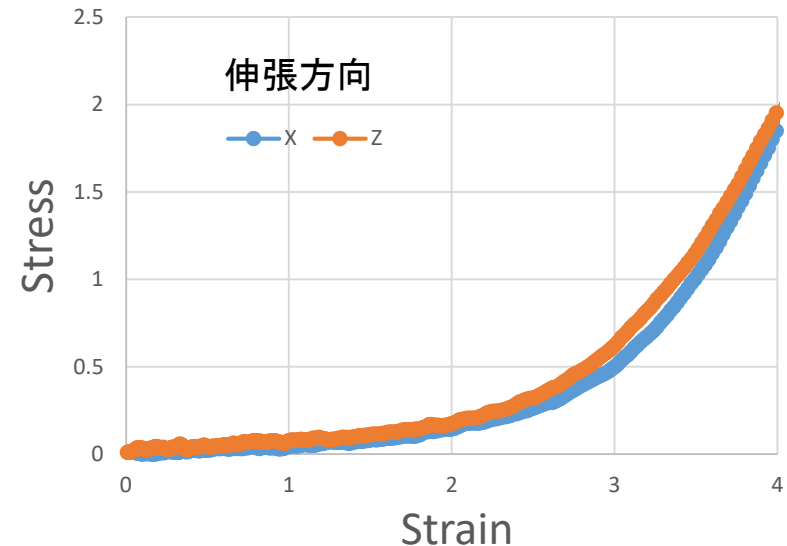


機械学習を活用した特徴量抽出に期待

発現する場合



発現しない場合

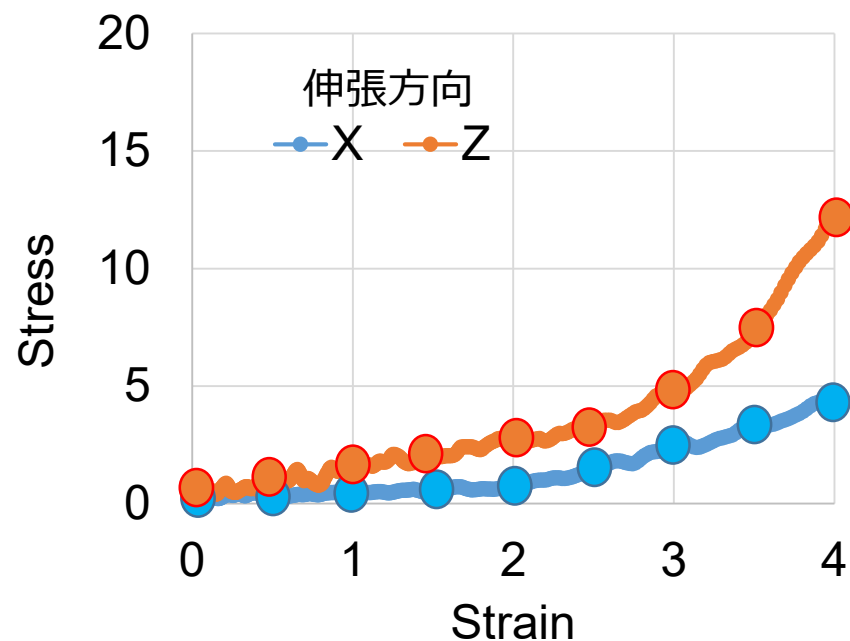


説明変数（特徴量）：

- 主鎖型か側鎖型か
- 電荷の有無
- 分子数
- 架橋密度
- 膨潤度
- 結合のバネ定数
- 相転移温度
- シミュレーション温度 など

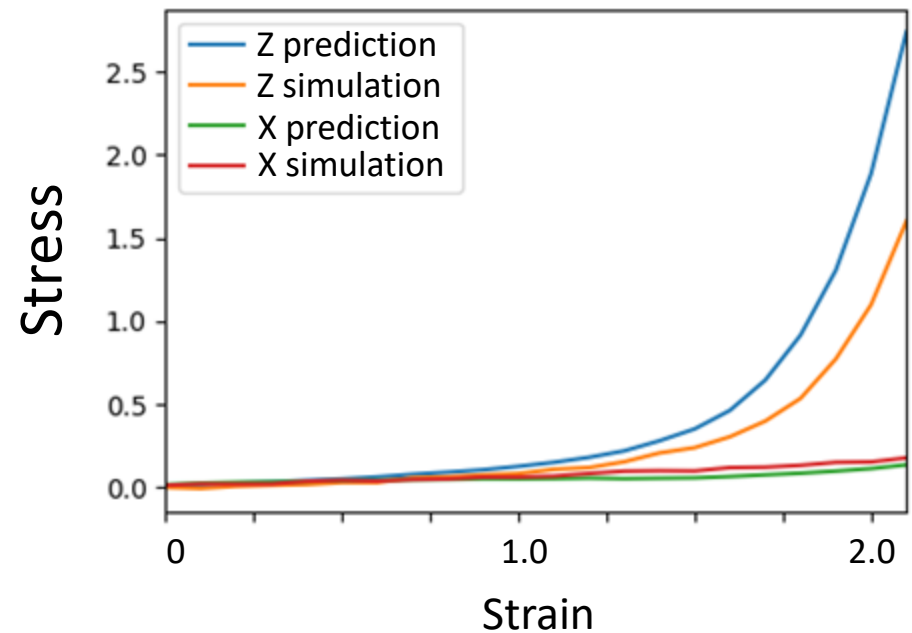
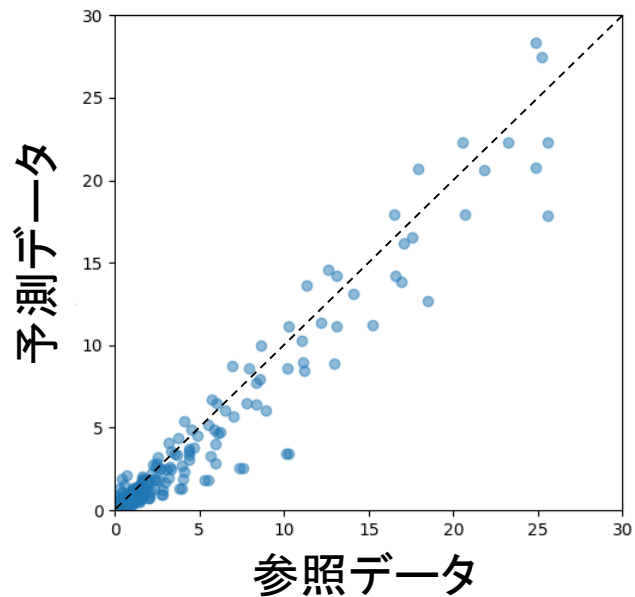
目的変数：S-S曲線

→サンプリングし、各ひずみごとに回帰



ランダムフォレスト法を用いた回帰分析を行い、
S-S曲線の再現を試みた

r^2 : 0.821
MSE : 1.33
MAE : 0.23



- ✓ 決定係数 $r^2 > 0.8$ を得た
- ✓ 考慮した記述子を用いて
シミュレーションにより得られたS-S曲線の再現に成功

重要な特徴量のランキング

順位	特徴量	重要度
1	引っ張り方向	0.2726
2	総分子数	0.2211
3	架橋密度	0.1650
4	GB粒子間の結合長	0.1016
5	主鎖型か側鎖型か	0.0857
6	膨潤粒子数	0.0528
7	LJ粒子数	0.0380
8	架橋中のLJ粒子数	0.0374
9	架橋部の結合長	0.0121
10	電荷の有無	0.0065

架橋設計の重要度が高い傾向

次の設計へフィードバック
架橋部分の影響を重点的に検証

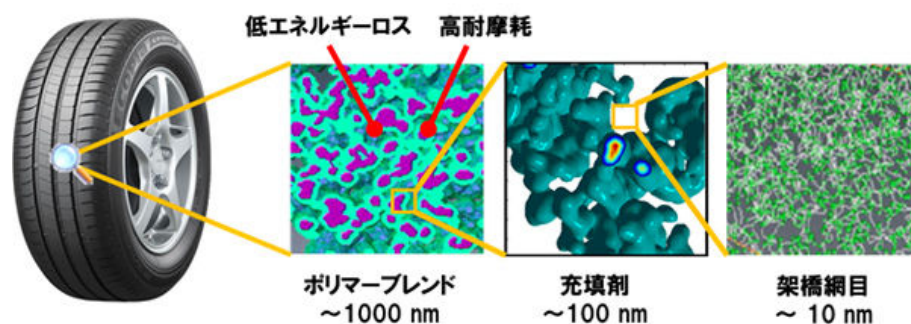
1. 拡張OCTAの開発
2. 液晶エラストマーの機械的特性予測
3. フィラー充填系高分子コンポジットの流動解析

微粒子添加による高分子材料設計

高分子材料 柔軟性・加工性 etc.
無機微粒子材料 光学特性・耐熱性 etc.



単独では得られない複合的な特性を有する材料の開発



高分子及び充填剤の配置をナノレベルで最適化することで、超低燃費タイヤ用ゴムを開発

http://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_100157.html

微粒子の分散を制御するため、
粒子表面特性や高分子系との相互作用、
混練方法の知見を得る必要がある



微粒子を添加した高分子系を扱える
汎用的なシミュレータの構築

Kyoto Advanced Particle Simulator for Electro-hydrodynamics (KAPSEL)

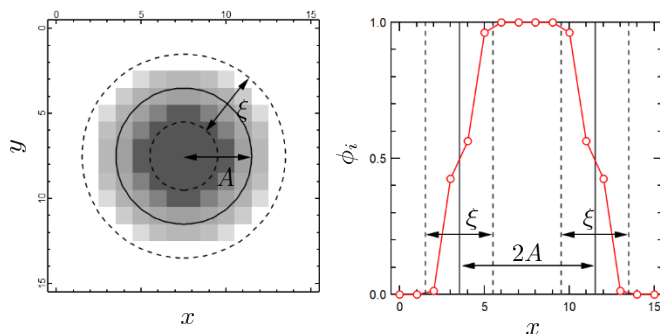
<http://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/kapsel/>

OCTAシステムにも同梱 <http://octa.jp>

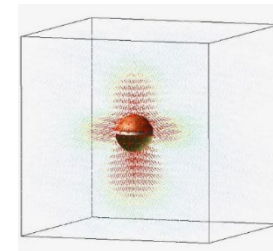
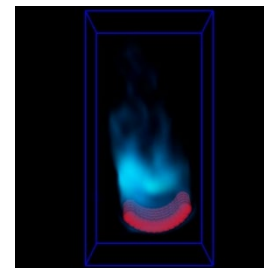
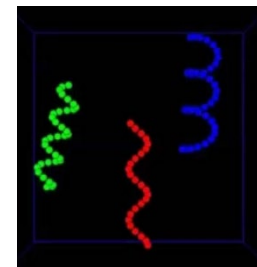
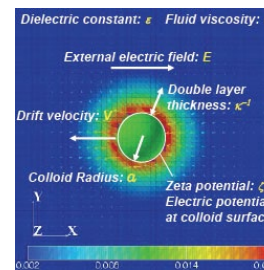
Smoothed Profile (SP) 法

粒子を関数で表現することで、構造格子を用いて粒子分散系をシミュレーションする

粒子部分で1、流体部分で0をとるような滑らかな関数を解析領域全体で定義する



Y. Nakayama and R. Yamamoto, *Phys. Rev. E*, **71**, 036707 (2005).



<http://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/kapsel/>

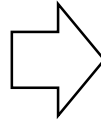
支配方程式

流体の運動: Navier-Stokes (NS) 方程式 (非圧縮ニュートン流体)

粒子の運動: Langevin方程式

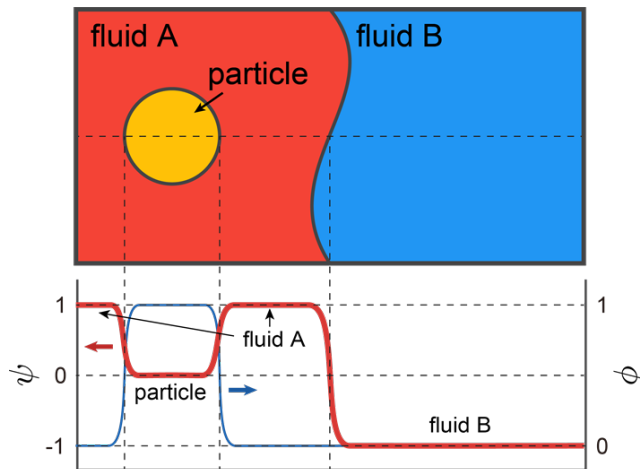
オリジナルKAPSEL

- 主に低粘性溶液中のコロイド分散、電気泳動などを対象としている



フィラー充填系コンポジットシミュレータ

- 高粘性溶液対応
- 粒子間相互作用拡張
- 2成分流体対応
- 高速、大規模計算対応(MPI並列)



流体と粒子を区別するオーダーパラメータ

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^N \phi_i(\mathbf{x}, t)$$

流体部分: 0
粒子部分: 1 をとる。

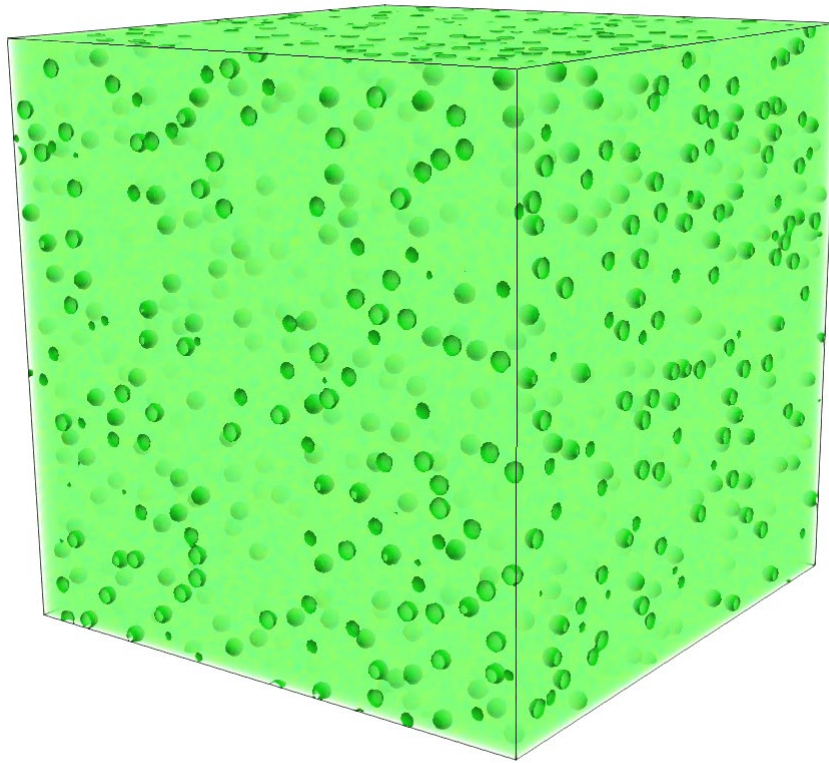
2成分流体を区別するオーダーパラメータ

$$\psi(\mathbf{x}, t)$$

A成分: 1
B成分: -1 をとる。

P.C. Hohenberg and B.I. Halperin,
Rev. Mod. Phys., **49**, 435 (1977).

対称組成系 せん断流動 粒子あり



対称組成系

粒子数 $N = 4096$
(赤の成分を好む)

せん断速度 $\dot{\gamma} = 0.01$

その他のパラメータ

メッシュ数: $NX = NY = NZ = 128$

時間刻み: $\tau_0 = \frac{\rho}{\eta k_{\max}^2}$

化学ポテンシャル:

$$\mu = a\psi^3 - b\psi - \alpha\nabla^2\psi + w\xi|\nabla\phi|^2 + 2d\psi\phi$$

$$a = b = \alpha = d = 1$$

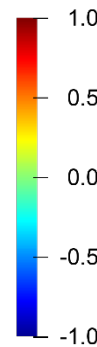
$$w = -1$$

易動度: $\kappa = 1$

粘度: $\eta = 1$

密度: $\rho = 1$

層構造を一時的に形成するものの、その後
2相に分離する



深層学習による定常流れの予測

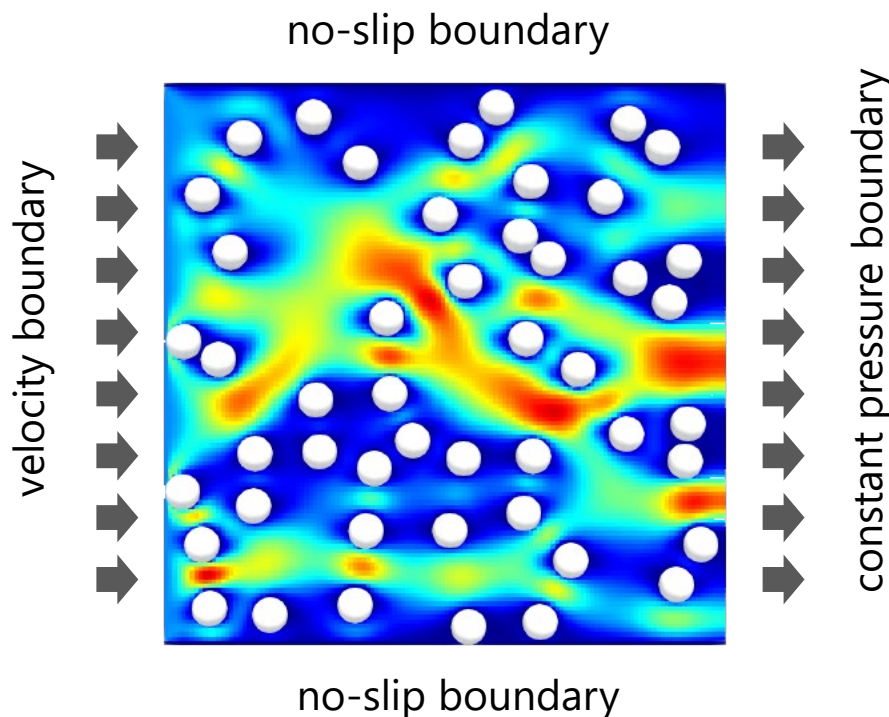
時間発展の各ステップにおいて、定常流れを求める際の収束計算の計算負荷が大



深層学習による定常流れ計算の高速化

モデル系

$$u = 0.1$$
$$v = 0$$



no-slip boundary

格子数: $N_x = N_y = 128$

格子幅: $d = 1$

粒子半径: $A = 4$

界面厚み: $\xi = 2$

時間刻み: $\Delta t = 0.1$

動粘性係数: $\nu = 1$

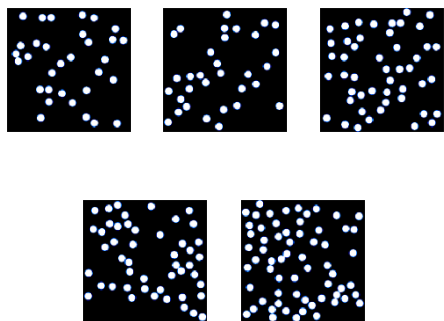
密度: $\rho_f = \rho_p = 1$

反復計算により、定常流れを求めた

粒子を過ぎる流れの学習

input

粒子識別関数



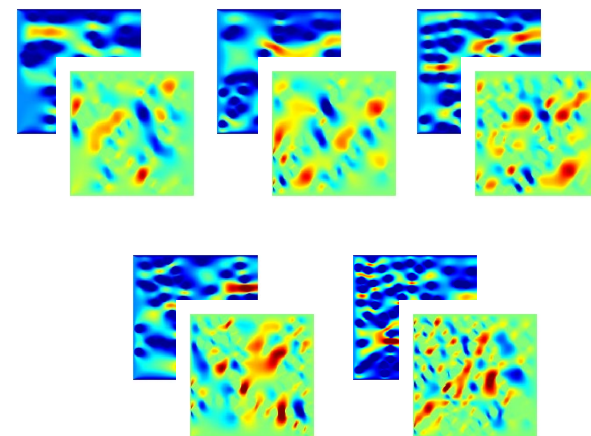
32/48/64粒子ランダム配置
150000セット(反転を含む)

network

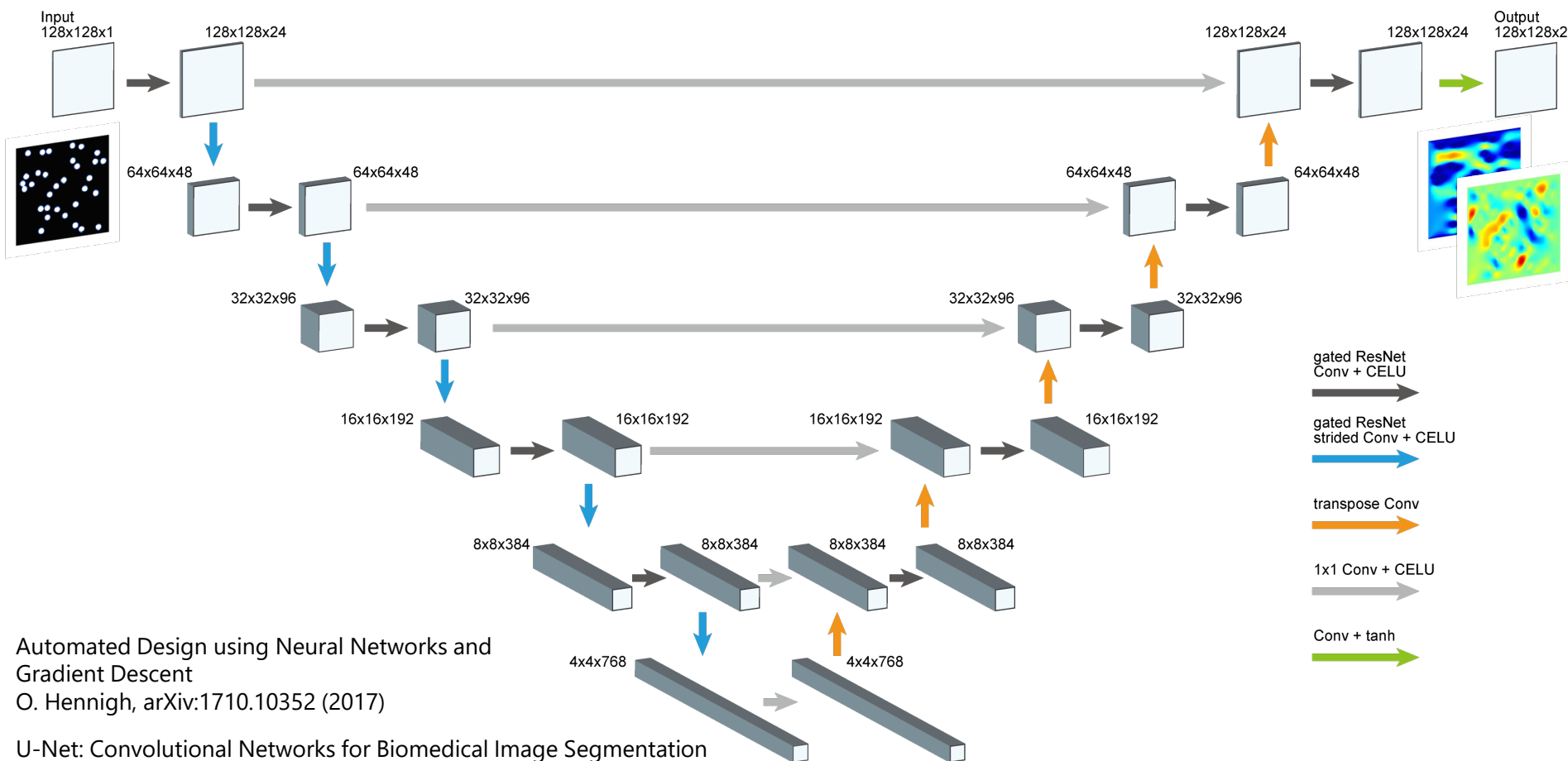


output

定常流れ場



ネットワークアーキテクチャ

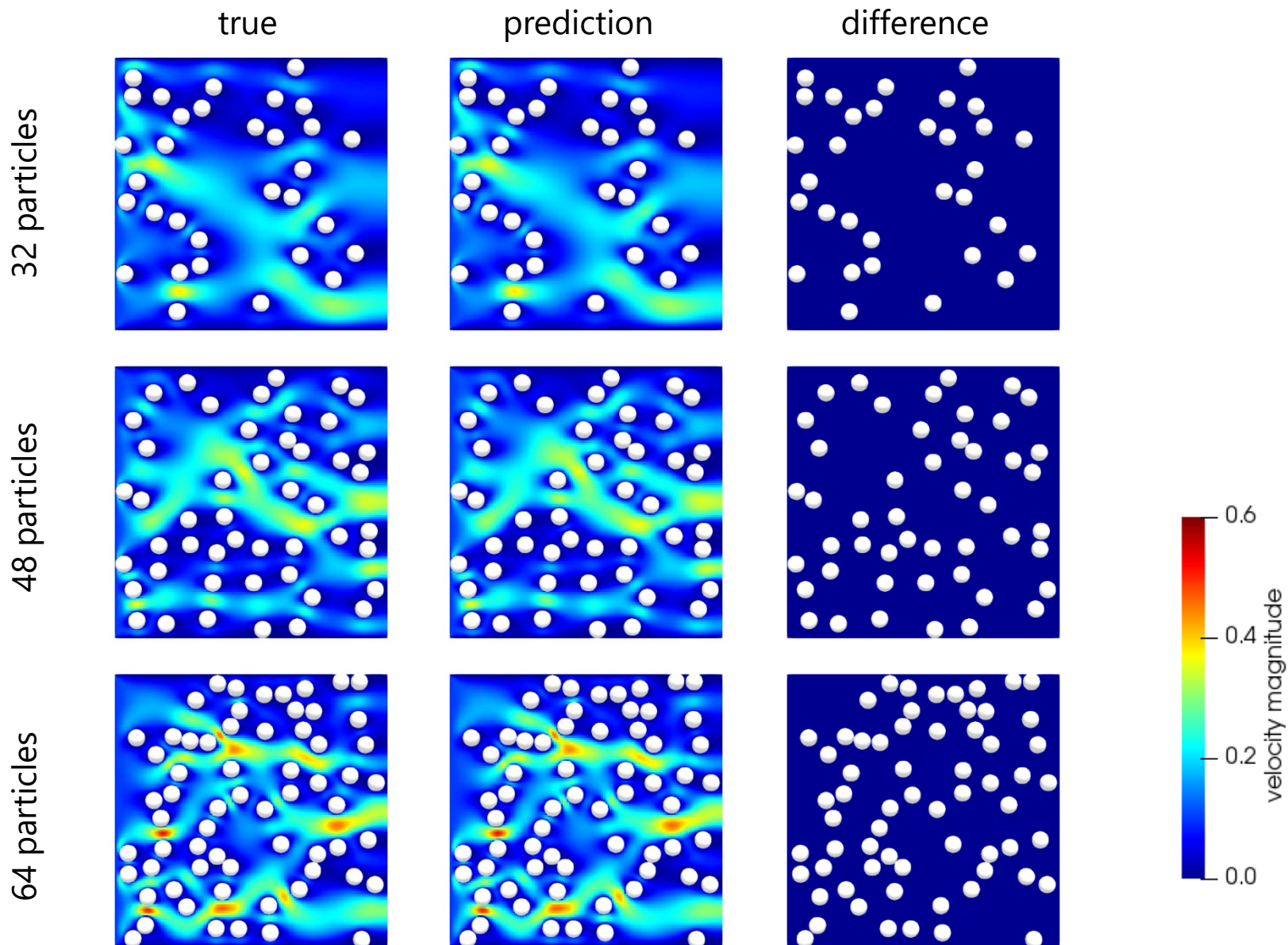


Automated Design using Neural Networks and Gradient Descent
O. Hennigh, arXiv:1710.10352 (2017)

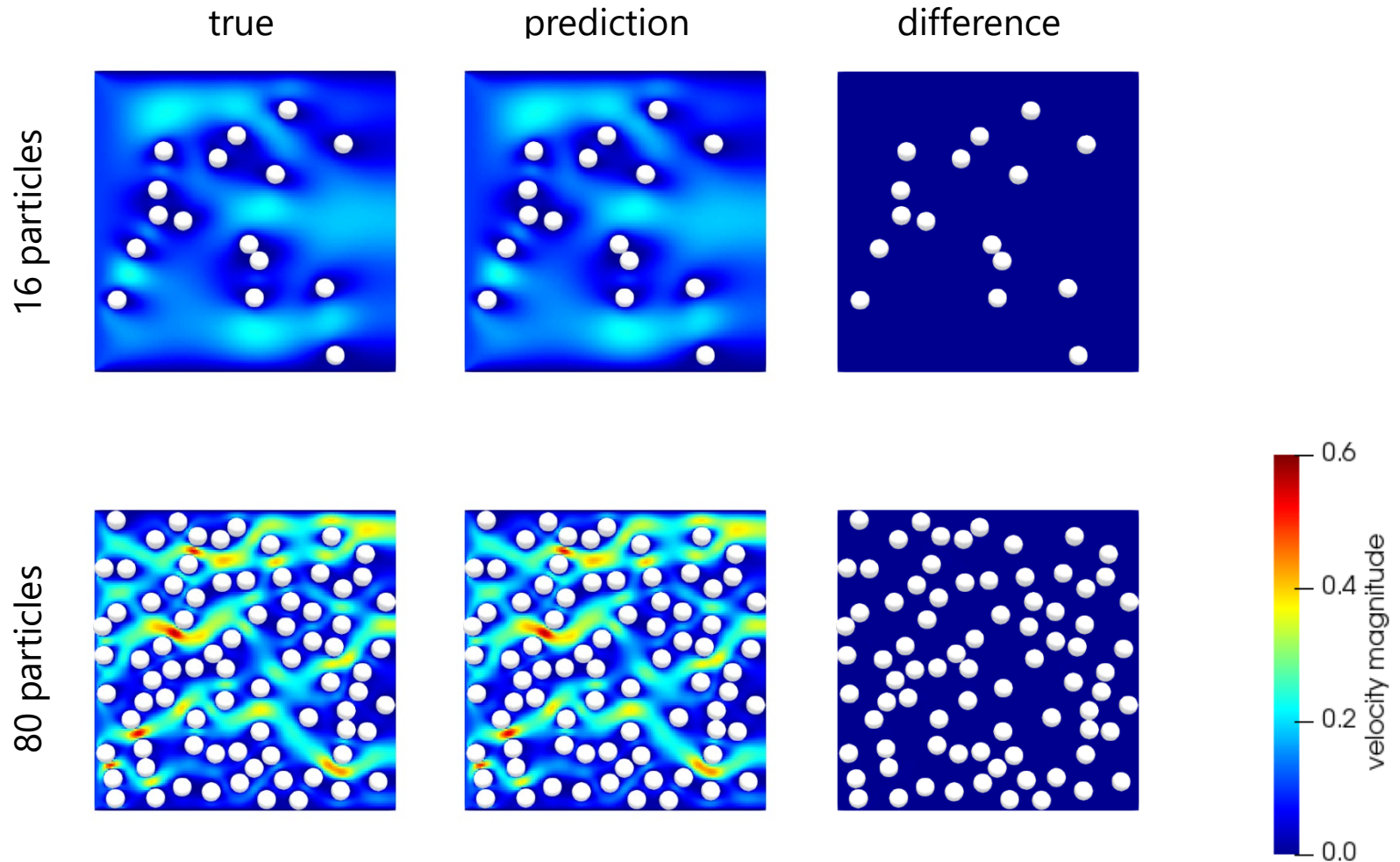
U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation
O. Ronneberger, P. Fischer, and T. Brox, arXiv:1505.04597 (2015)

Wide Residual Networks
S. Zagoruyko and N. Komodakis, arXiv:1605.07146v4 (2017)

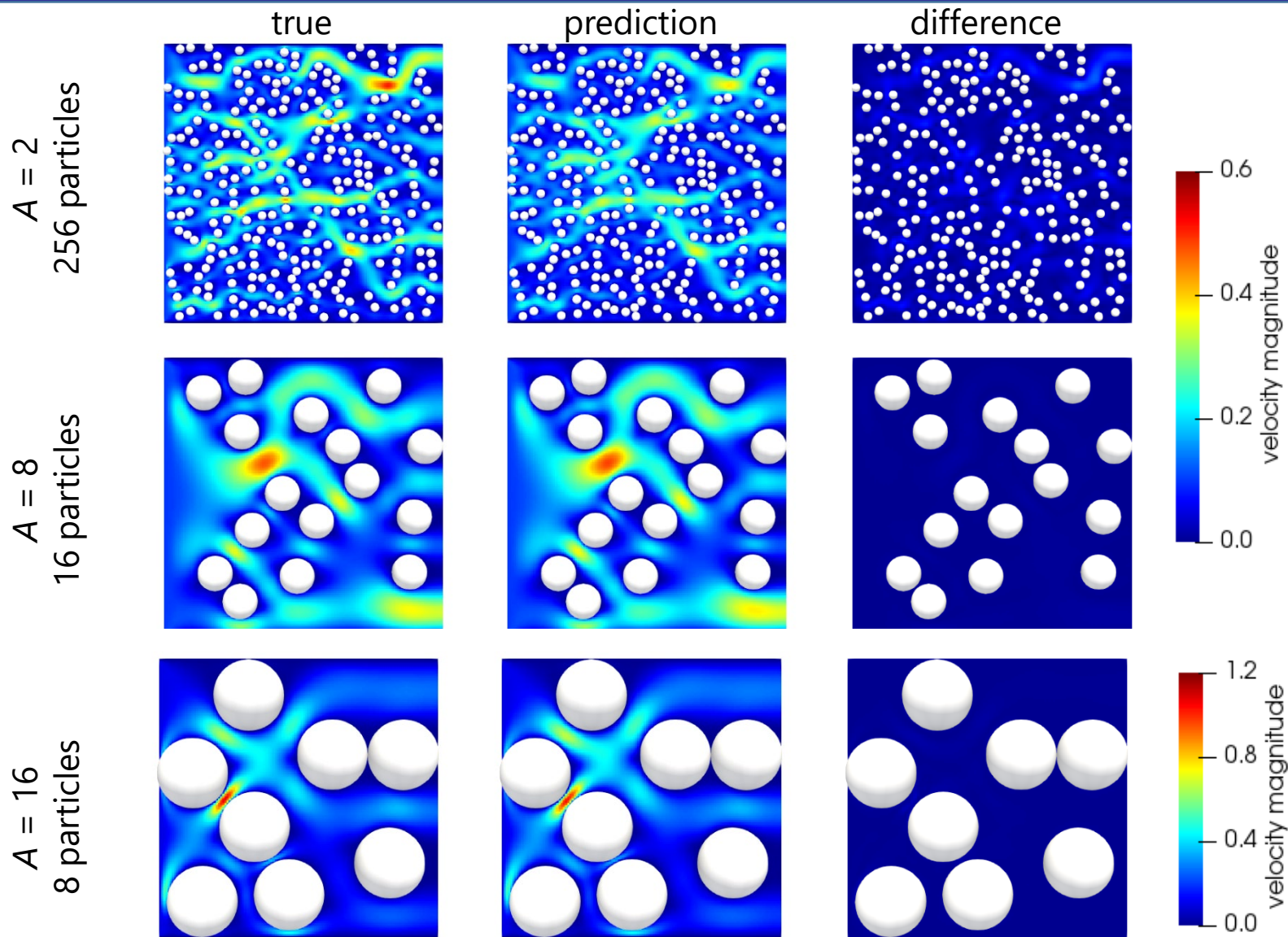
Understanding and Improving Convolutional Neural Networks via Concatenated Rectified Linear Units
W. Shang, K. Sohn, D. Almeida, and H. Lee, arXiv:1603.05201 (2016)



定常流れ場(未知粒子濃度)



定常流れ場(未知粒子サイズ)



未知粒子濃度、粒子サイズでも高精度で流れ場を予測 → 時間発展の高速化

超超プロジェクト今後の計画

第1期(3年)

第2期(3年)

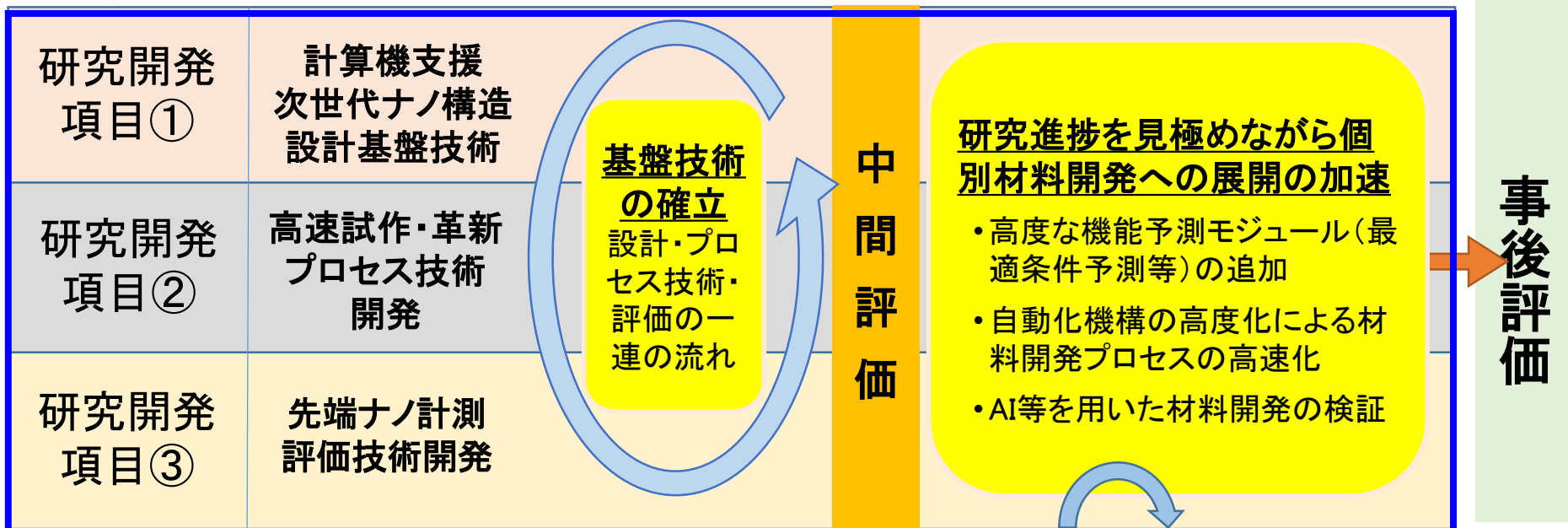


個別技術の開発

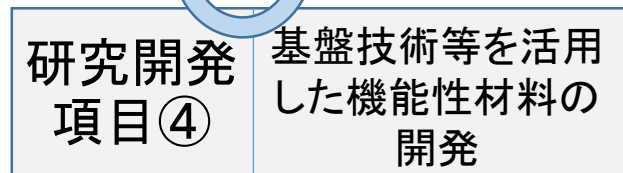
モデル材料等を利用した
一連の流れの確立

基盤技術システムの高度化、および
革新的機能性材料の自動創製

<委託事業>



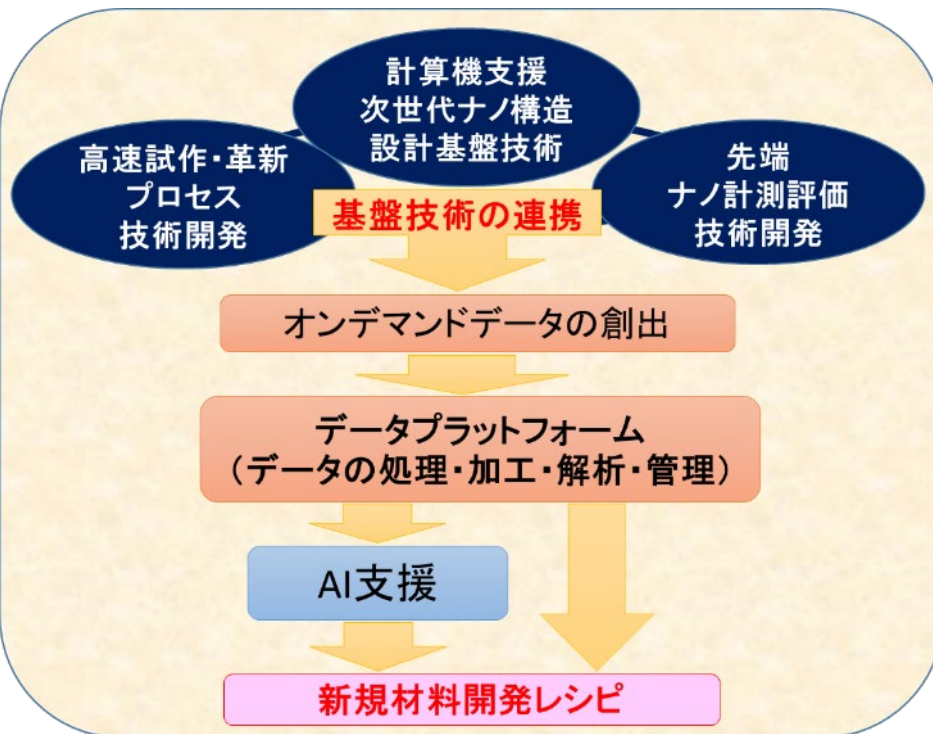
<助成事業>



NEDO基本計画

成果の実用化に向けての取組

材料設計プラットフォーム



拠点の
構成要素



産総研を拠点と位置付けて、個々の要素を一括して産業界へ提供

- ・産総研コンソーシアム
- ・共同研究
- ・コンサルティング
- ・共用設備 等