

研究タイトル：

# IoT ディープラーニングによる新しい材料開発



氏名： 山田 一雅 / YAMADA Kazu-masa E-mail: yama@hakodate-ct.ac.jp

職名： 教授 学位： 博士(工学)

所属学会・協会： 日本金属学会, 日本磁気学会

キーワード： 材料学, 鉄系材料, 分子動力学法, 拡散係数, 情報処理材料, アモルファス, 緩和現象

技術相談  
提供可能技術：  
 ・原子の拡散係数の測定  
 ・Python による数値処理とディープラーニング基礎環境化  
 ・光と磁気に関連した材料の基礎と応用

## 研究内容： IoT ディープラーニングによる新しい材料開発と可視化原子拡散研究の提案

### IoT ディープラーニングによる新しい材料開発

#### ～3D AVS Player 動画可視の自動化のための数値処理の研究, 特に分子動力学法による鉄基金属材料中の原子拡散の可視化～

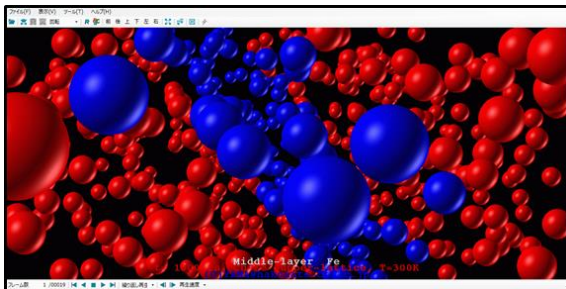
情報処理材料学にとりこんでいる。便利な 3D AVS Player は、AVS/Express や MicroAVS の可視化結果を 4D アニメーション(再生しながら視点変更が可能)で再生できる、これらを IoT ディープラーニングによる新しい材料開発で展開している。

※3D AVS Player は、現在、日本語、英語、中国語に対応し、MS-Windows 32bit および 64bit 版の2種類が無料で配布されている。

本研究では、Python オープンソースライブラリをディープラーニングに応用した新しい材料開発、特に分子動力学法による鉄基金属材料中の原子拡散の可視化を目的とした研究を行う。使用するデータは力学には限らない、様々なものが使用できる。さらに、特に分子動力学法の最大の長所である原子の拡散係数を唯一の手段で数値的に探索できることに着目し、この結果を定量的・定性的な両面から、特に鉄基金属材料中の原子拡散に応用し、高密度磁気記録材料等の光および磁気の両面に密接な材料の新しい機能開発に供する。

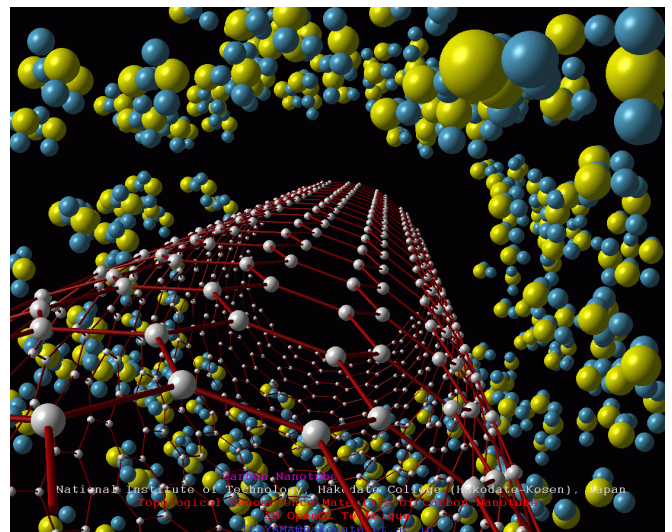
上記の材料の構造の結果に可視化技術を適応し、材料の熱的安定性の議論により広範囲な視点で迫るものである。

以下(左)は、鉄系材料中の多層膜の熱的な原子の拡散を時間的に追跡し、可視化させた一コマであり、このような結果をもとに新しい構造材料や磁性材料が期待できる。また以下(右)は、炭素系材料中の水和性を時間的に追跡し、可視化させた一コマであり、このような結果をもとに例えば薬品が効率よく体内に運び込まれる仕組みの応用に期待できる。



左図 全ての原子位置を計算機から割り出し、かつ視点が臨機応変に変更できる 4D 動画の Fe 多層膜の例。

右図 炭素系グラフェン (graphene)材料中の水和性を時間的に追跡し、可視化させた結果をもとに例えば薬品が効率よく体内に運び込まれる仕組みに応用。



## 提供可能な設備・機器：

### 名称・型番(メーカー)

2D 科学散布図 PDF 作成ソフト動作環境群	3D 科学図 Python 動作環境群
4D アニメーションファイル自動生成動作環境群	