

令和 4 年 6 月 2 日現在

機関番号：82626

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2017～2021

課題番号：17H06464

研究課題名(和文)高分子高次構造の階層的シミュレーション

研究課題名(英文) Hierarchical simulation of higher-order structure of polymer

研究代表者

青柳 岳司 (Aoyagi, Takeshi)

国立研究開発法人産業技術総合研究所・材料・化学領域・総括研究主幹

研究者番号：50786241

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 40,100,000円

研究成果の概要(和文)：伸縮性のある繊維や合成皮革など、日々の生活に広く用いられているゴムや柔らかい樹脂材料を改良するために、コンピューターシミュレーションとAIを用いて材料設計を効率化する方法論の研究を行った。これらの材料は異なる成分がつながった高分子(ブロックコポリマー)よりなり、異なる成分が混ざらないことにより、複数の相が入り組んだ複雑な構造(マイクロ相分離構造)を示す。このようなブロックコポリマーやマイクロ相分離構造から、伸び縮みの性質(弾性)を効率的に予測する方法論を確立し、様々な用途に対して目的とする弾性を示す材料設計を行う道筋を示すことが出来た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究において、工業的にも、日々の生活にも広く用いられているゴム、樹脂等の高分子材料の性能を、試行錯誤を繰り返すことなく計算機シミュレーションとAIで設計し、最小限の実験で開発を行うことが出来る道筋を提案した。特に分子から実在の材料まで幅広いスケールを対象として計算機シミュレーションとAIを適用することは、学術的にも先端技術であり、このような方法論が広く普及すれば省資源、カーボンニュートラル実現などに寄与するという意味で社会的意義も大きい

研究成果の概要(英文)：In order to improve the properties of soft resin materials widely used in daily life, such as elastic fibers and synthetic leather, we developed methodologies to accelerate material design using computer simulation and AI. These materials are composed of polymers in which different components are connected (block copolymers) and exhibit multi phase complex structures (microphase-separated structure) because the different components do not mix. We have established a methodology to efficiently predict the elastic properties from the structure of block copolymers and microphase-separation, and have shown the way to design materials that exhibit the desired elastic properties for various applications.

研究分野：高分子物性

キーワード：ブロックコポリマー ミクロ相分離 ニューラルネットワーク 粗視化分子動力学 自己無撞着場理論
熱可塑性エラストマー 軟質樹脂

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

高分子材料は、分子鎖、相分離構造等様々な階層でネットワーク構造を形成し、その構造が材料機能に大きく寄与することが知られている。しかしながら、そのようなネットワーク構造を詳細に観察する方法は乏しく、構造と機能との間を定量的に解析する方法が求められていた。

計算機シミュレーションを用いた高分子材料の物性予測、機能設計は1980年代頃より継続的に行われているが、過去においてはシミュレーションとして取り扱いやすい理想的な系、すなわち高分子とは言っても分子量数千〜数万程度の比較的低い分子量で単分散のもの、かつ平衡構造が主に取られ、現実的な高分子材料の機能設計への適用は限定されていた。しかしながら本研究開始時点において、理論、計算機ハードウェア、ソフトウェアの進歩により、現実的な分子量、複雑構造なども徐々に取り扱えるようになってきており、その重要性が向上していた。

研究代表者は、高分子シミュレーション研究に長年携わり、特に高分子の多階層な構造を取り扱うために分子動力学(MD)と自己無撞着場(SCF)を組み合わせた Density biased Monte Carlo(DBMC)法[1]というマルチスケールシミュレーション手法を提案し、相分離により形成される高次構造を MD シミュレーションというミクロな手法で取り扱うための初期構造生成を可能にしている。さらに、この手法を用いてブロックコポリマーの弾性挙動[2]、ポリマーブレンド界面の剥離挙動[3]などの研究を行ってきた。

同時に、これら高分子鎖が形成するネットワーク構造は離散幾何学の解析の対象と考えられるが、当時、高分子のネットワーク構造を幾何学的に解析するアプローチはそれほど一般的ではなく、より積極的な適用が求められていた。

さらに、このような数学的なアプローチに加えて、2011年米国で立ち上がった“マテリアルゲノム”計画を発端とし、理論、実験、シミュレーションに次ぐ第4の科学と呼ばれるインフォマティクス利用による材料設計、マテリアルズ・インフォマティクスが注目され、高分子材料分野においても適用が模索されるようになっていた[4]。

これらシミュレーションと離散幾何学の融合に加えて、インフォマティクスを利用したアプローチを取り入れることにより、多面的な見地から、高分子材料の機能発現機能解明および材料設計の高度化が求められていた。

2. 研究の目的

高分子材料の有する多階層なネットワーク構造の代表的なものとして、(1)高分子鎖のネットワーク、(2)相分離により成形されるドメイン構造のネットワークが存在する。そして、それらのネットワーク構造は材料機能にダイレクトに結びついている。例えばガラス状ブロックとゴム状ブロックを含むブロックコポリマーからなる熱可塑性エラストマーは、ミクロ相分離構造によりハードドメインが物理架橋点として働くがゆえに、エラストマーとしての性質を示す(図1)。その際、図に示すように異なるハードドメインを橋掛けるブリッジ鎖と、同じドメインで終結するループ鎖が存在し得るが、この場合エラストマーとしてのゴム弾性はブリッジ鎖のみが担うこととなるため、ブリッジ鎖の組成は物性を制御する上で重要な因子となる。

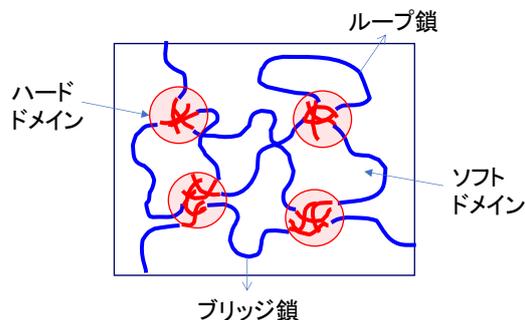


図1 熱可塑性エラストマーモデル(トリブロックコポリマー)の分子鎖構造

一方、ミクロ相分離構造においても、ブロック組成と相溶性により様々な相分離構造を示す。図2にジブロックコポリマーおよび対称トリブロックコポリマーが形成する典型的な相分離構造

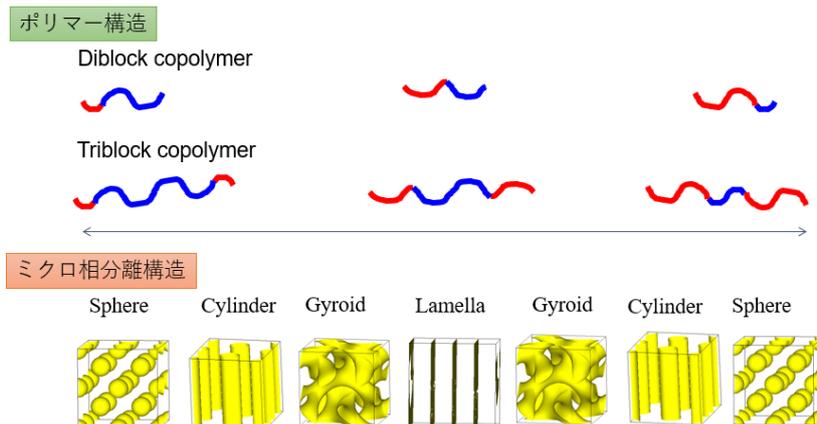


図2 ブロックコポリマーのミクロ相分離構造の例

造を示す。このようにマイクロ相分離構造においてもダブルジャイロイド(DG)構造を代表として、ネットワーク(共連続)構造を示す。ハードドメインが孤立している熱可塑性エラストマーに対して、ハードドメインがネットワーク構造を形成した場合、同じ化学種からなる高分子でもハードドメインネットワークのエネルギー弾性によりエラストマーとしては機能しない。このような高分子材料は軟質樹脂として幅広く用いられており工業的には重要な材料である。

今回の研究においては、計算機シミュレーションにより高分子鎖及び相分離構造が形成するネットワーク構造の解析により、材料機能機構の解明を行うことを目的とする。加えて材料設計の高度化、高速化のため、機械学習を用いた相分離構造の解析、構造-物性相関解析を行い、最終的に求める機能を発現する高分子鎖を設計する逆問題を解決することを目的とする。

3. 研究の方法

DBMC法により作成したマイクロ相分離構造を有するブロックコポリマーの粗視化モデルを、粗視化MDシミュレーションで伸長することにより応力-ひずみ挙動を得る(図3)。またその際に高分子鎖および相分離構造のネットワーク構造変化を解析することにより、ネットワーク構造と物性との因果関係の解析を行った。

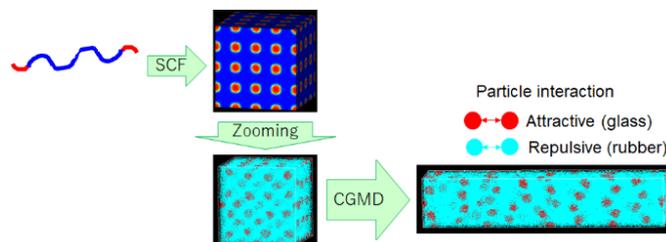


図3 階層的シミュレーションによる弾性挙動解析

一方、機械学習においては、SCF計算により得られる相分離構造、データとしては規則格子点上の各ブロックの体積分率を用いた3D畳み込みニューラルネットワーク(3D-CNN)、および鎖長、ブロック分率、非対称度などの高分子構造を記述子としたニューラルネットワークを持って、安定相や応力-ひずみ(S-S)カーブとの回帰を行った。さらに高分子構造とS-Sカーブの回帰を行った学習セットを用いて、ベイズ最適化によりターゲットとするS-Sカーブを再現する高分子鎖の設計を行った。

また、熔融高分子鎖のネットワークが示すからみあいによる粘弾性を予測するために、すでに提案されている3種のスリップスプリングモデルをコンピュータプログラムに実装し、比較検証を行った。

一連のシミュレーションはOCTAシステム[5]のSUSHIおよびCOGNACを用い、機械学習に関してはTensorFlow[6]を用いている。

4. 研究成果

本研究で検討を行った以下の4項目に関して研究成果を述べる。

(1) 階層的シミュレーションによるBCC球状構造とダブルジャイロイド構造を持つ熱可塑性エラストマー/軟質樹脂の弾性解析[7]

図4にBCC球状構造とDG構造を有するトリ(ジ)ブロックコポリマーのS-Sカーブのブリッジ分率依存性を示す。Mooney-Rivlin式により解析を行った結果、BCC球状構造の場合、ゴム弾性はブリッジ分率にほぼ比例する結果が得られ理論による予測を再現した。一方DG構造の場合は、ハードドメインの形成するネットワークの効果で、低ひずみ領域において大きなエネルギー弾性を示すと同時に、ブリッジ分率の依存性が低いという結果が得られた。詳細な解析により、同一ドメインで終結するループ鎖においても、位置が離れている場合、応力発現に寄与することが明らかになった。

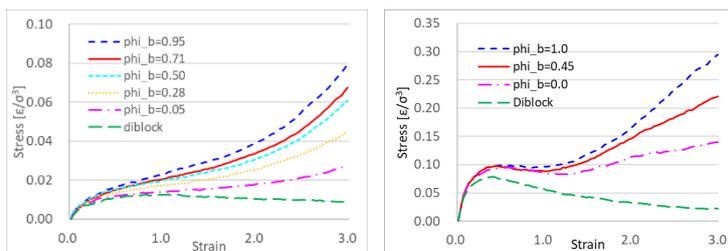


図4 BCC球状構造(左)とダブルジャイロイド構造(右)を有するブロックコポリマーのS-Sカーブ。

また、BCC球状構造とDG構造において、伸長方向の異方性を検討した結果、DG構造においては実験事実[8]と一部異なる結果が得られ、世の中で広く用いられているビーズスプリングモデルの高分子ガラスに適用する際の課題を明らかにした。

(2) 深層学習によるブロックコポリマーマイクロ相分離準安定構造からの相図予測[9]

SCF計算によりブロックコポリマーのマイクロ相分離構造を求める際、自由エネルギー極小化の過程で準安定状態に陥ることが多く、正確な相図を描くためには初期状態の設定、高精度の自由エネルギー極小化など多くの労力を要する。そこで3D-CNNを用いてラフなSCF計算から得られる準安定構造と本来の安定相との回帰を行い、各種ブロックコポリマーの安定相を効率

的に予測することを試みた。図5にABジブロックとAB₂スター型高分子鎖において学習した3D-CNNにより予測した安定相と、正しい相図の比較を示す。この結果予測した安定相はおおむね精緻なSCF計算により得られた相図を再現することが示され、相図予測の効率化が期待される。

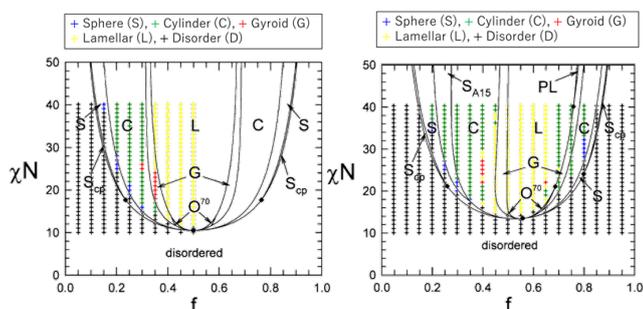


図5 予測した安定相と正しい相図の比較。(左) ABジブロック、(右) AB₂スター

(3) 階層的シミュレーションと機械学習の連携による熱可塑性エラストマー／軟質樹脂の物性予測と逆設計

図3に示すような階層的シミュレーションにより、エラストマーモデルのS-Sカーブを予測することが可能であるが、材料設計のための多くのサンプルを用いたスクリーニングを実施するためには、多大な計算リソースを必要とする。そこで一定数のシミュレーションより得られた結果を学習することにより、新たな高分子構造、あるいはマイクロ相分離構造を与えた場合のS-Sカーブを予測する機械学習の検討を行った。図6にその概要を示すが、回帰に加えてターゲットとするS-Sカーブを再現する高分子鎖の逆予測についても検討を進めた。

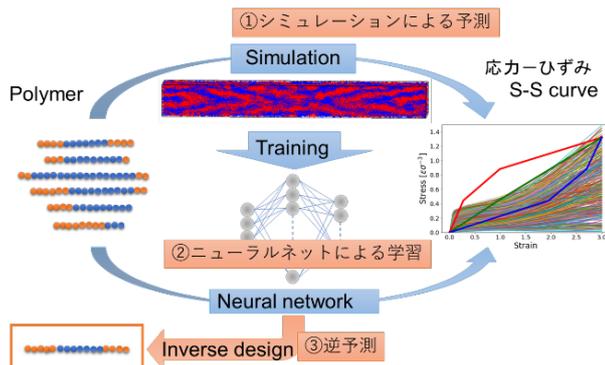


図6 機械学習による熱可塑性エラストマー／軟質樹脂の特性予測の流れ

(3)-1 高分子鎖構造からのS-Sカーブ予測[10]

高分子鎖構造を鎖長、ブロック分率、非対称度（ジブロック(0.0)⇔対称トリブロック(0.5)との間で変化する値）の3パラメータで定義し、一定の範囲内でランダムに選択したパラメータに基づいて決定した高分子鎖構造を用いて、マイクロ相分離構造をモデリングし、S-Sカーブをシミュレーションにより求めた。そして、高分子構造とS-Sカーブの相関をニューラルネットワーク(NN)で学習した。検証に用いた未学習の高分子鎖のS-Sカーブのシミュレーション結果と、学習済みNNによる予測を図7に示す。図に示すようにNNにより高い精度でS-Sが予測できることが示された。

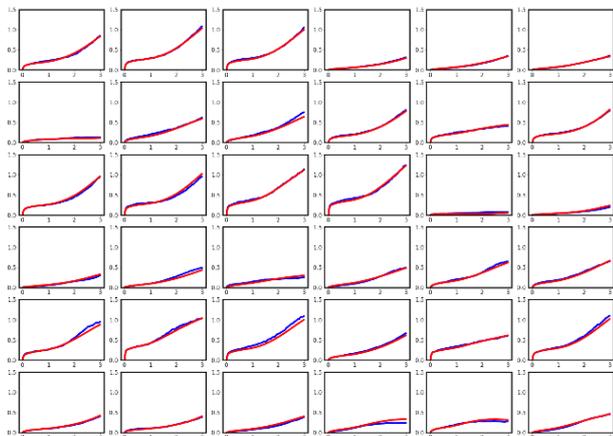


図7 ニューラルネットワークによるS-Sカーブの予測 (赤線) シミュレーション、(青線) 予測

さらにこの学習したNNとベイズ最適化を用いて、任意に与えたS-Sカーブを再現する高分子鎖の逆設計を行った。その結果を図8に示す。図には学習に用いたデータの中で目標に一番近いS-Sカーブ(細線)を示すが、これに比較して最適化により得られた高分子鎖構造のS-Sカーブはターゲットに、より近い結果が得られていることが分かる。さらに提案された高分子鎖構造を用いて階層的シミュレーションを用い、シミュレーションした結果も、期待するS-Sカーブを示すことを確認した。この結果より所望の物性を与える高分子鎖構造の逆設計の道筋を示すことが可能になることが示された。

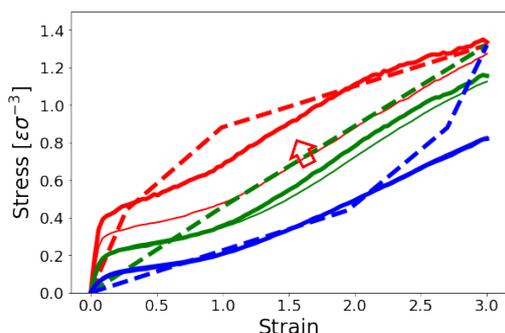


図8 ベイズ最適化により得られた高分子鎖のS-Sカーブ。(点線) ターゲット、(太線) 最適化後、(細線) 最適化前

(3)-2 ミクロ相分離構造からの S-S カーブ予測[11]

高分子構造に加えて、ミクロ相分離構造も材料機能に影響を与えることが知られている。すなわち同じ高分子構造であってもミクロ相分離構造が異なる場合、異なる特性を与える。そのため、今回の研究においては高分子鎖構造のみではなく、ミクロ相分離構造と S-S カーブの相関に関しても解析を行った。SCF 計算において、ミクロ相分離構造は規則格子上の各ブロックの体積分率で表されるため、各点のデータは周囲の空間のデータと密接に関連する。そのようなデータを扱うため、図 9 に示すような 3D-CNN を用いたネットワークにより学習を行った。高分子鎖構造は ABA 対称トリブロックに限定し、同一の高分子鎖より 20 種の異なるミクロ相分離構造を作成し、各々より得られた S-S カーブを回帰した結果を図 10 にしめす。この結果よりミクロ相分離構造の違いによる S-S カーブも良好に予測できることが明らかになった。

また、(3)-1 の高分子構造と(3)-2 のミクロ相分離構造両者を記述子として組み合わせることで学習を行うことにより、さらに回帰の精度が上がることを期待される。検討の結果ブロック分率で学習を行った学習セットをベースにして、ミクロ相分離構造を用いて転移学習を行うという手順が有効であることが明らかになった[12]。

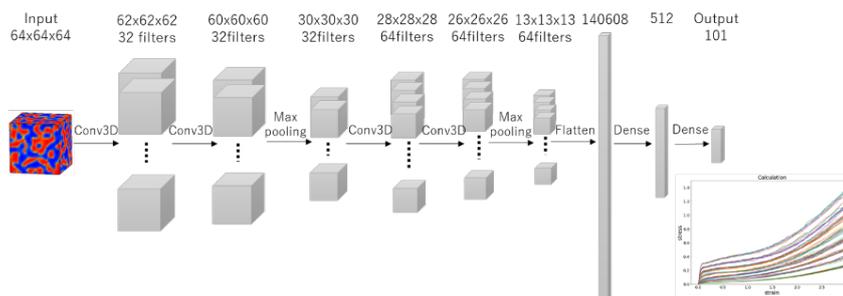


図 9 ミクロ相分離構造と S-S カーブの回帰のための 3D-CNN 構造

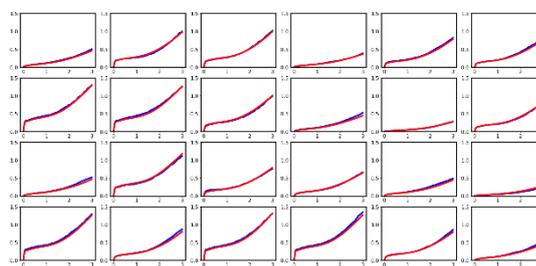


図 10 3D-CNN によるミクロ相分離構造からの S-S カーブの予測 (赤線) シミュレーション、(青線) 予測

(4) 各種スリップスプリングモデルの実装と比較検証[13]

高分子鎖は溶融状態において、複雑にからみあったネットワーク構造を取り、そのからみあいの効果により、複雑な粘弾性挙動を示す。からみあいの時空間スケールを粗視化 MD を用いて検討するには、非常に計算コストがかかるため、高分子材料の成型加工条件の最適化などのため、スクリーニングを行うことは困難である。そこで、より粗視化を進めてからみあいを明示的に定義し、高分子鎖の運動を再現するスリップスプリングモデルが提案されている[14]。本研究においてスリップスプリングを実際の材料開発に適用できるように OCTA/COGNAC に、既存の 3 種の計算モデルを実装し、モデル間の比較、検証を行った。この検討により、解析の目的に応じたモデルおよびパラメータの選択に指針を示し、高分子鎖のからみあい、ネットワーク構造による材料機能発現機構の解明、材料設計に有用な知見を与えることが出来た。

<引用文献>

- [1] T.Aoyagi, et al, *Comput. Phys. Commun.*, **145**, 267-279 (2002).
- [2] T.Aoyagi, T.Honda and M.Do, *J.Chem.Phys.*, **117**, 8153-8161 (2002).
- [3] T.Aoyagi, *Nihon Reoroji Gakkaishi*, **37**, 75-79 (2009).
- [4] J.D.Audus, J.J.de Pablo, *ACS Macro.Lett.*, **6**, 1078-1982 (2017).
- [5] <https://octa.jp/>
- [6] <https://www.tensorflow.org/>
- [7] T.Aoyagi, *Polymer*, **243**, 124624 (2022).
- [8] B.J.Dair, et al, *J. Mater. Sci.* **35**, 5207-5213 (2000).
- [9] T.Aoyagi, *Comput.Mater.Sci.*,**188**,110224 (2021).
- [10] T.Aoyagi, *Comput.Mater.Sci.*,**207**,111286 (2022).
- [11] T.Aoyagi, *MRS Advances*, **6**, 32-36, (2021)
- [12] H.Kawaguchi, M.Ito, T.Aoyagi, T.Ohnishi, *J.Comput.Chem.Jpn.*,**20**,100 (2021).
- [13] T.Aoyagi, *Nihon Reoroji Gakkaishi*, **49**, 79-86 (2021).
- [14] 例えば T.Uneyama, Y.Masubuchi, *J.Chem.Phys.*, **137**, 154902 (2012).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 14件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 11件）

1. 著者名 Aoyagi Takeshi	4. 巻 243
2. 論文標題 Coarse-grained molecular dynamics study of elasticity of block copolymers with cubic symmetrical morphology	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Polymer	6. 最初と最後の頁 124624 ~ 124624
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.polymer.2022.124624	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Aoyagi Takeshi	4. 巻 207
2. 論文標題 Optimization of the elastic properties of block copolymers using coarse-grained simulation and an artificial neural network	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 111286 ~ 111286
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2022.111286	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Hagita Katsumi, Aoyagi Takeshi, Abe Yuto, Genda Shinya, Honda Takashi	4. 巻 11
2. 論文標題 Deep learning-based estimation of Flory-Huggins parameter of A-B block copolymers from cross-sectional images of phase-separated structures	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 12322
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-91761-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 KAWAGUCHI Hironobu, ITO Mariko I., AOYAGI Takeshi, OHNISHI Takaaki	4. 巻 20
2. 論文標題 Prediction of Stress-Strain Curve of Block Copolymers Using Transfer Learning of 3D Convolutional Neural Network.	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 100 ~ 102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2021-0037	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Aoyagi Takeshi	4. 巻 6
2. 論文標題 High-throughput prediction of stress-strain curves of thermoplastic elastomer model block copolymers by combining hierarchical simulation and deep learning	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 MRS Advances	6. 最初と最後の頁 32~36
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1557/s43580-021-00008-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Aoyagi Takeshi	4. 巻 49
2. 論文標題 Evaluation of the Slip-Spring Dissipative Particle Dynamics Code for Practical Studies in Polymer Rheology	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nihon Reoroji Gakkaishi	6. 最初と最後の頁 79-86
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1678/rheology.49.79	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Mariko Ito, Sadato Yamanaka, Takeshi Aoyagi and Takaaki Ohnishi	4. 巻 1
2. 論文標題 Quantification of microphase separated structures from the viewpoint of multifractal	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of the 2020 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2020)	6. 最初と最後の頁 480-483
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoh-ichi Mototake, Sadato Yamanaka, Takeshi Aoyagi, Takaaki Ohnishi and Kenji Fukumizu	4. 巻 1
2. 論文標題 Topological data analysis for microdomain patterns of block copolymer	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of the 2020 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2020)	6. 最初と最後の頁 517-520
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 本武 陽一、山中 貞人、青柳 岳司、大西 立顕、福水 健次	4. 巻 19
2. 論文標題 位相幾何的データ分析によるブロックコポリマー準安定構造の自由エネルギー推定	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 169 ~ 171
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2021-0009	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 KAWAGUCHI Hironobu, ITO Mariko I., YAMANAKA Sadato, AOYAGI Takeshi, OHNISHI Takaaki	4. 巻 19
2. 論文標題 Largest Connected Component and Free Energy of Microphase Separated Structures.	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 136 ~ 138
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2021-0001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 青柳 岳司	4. 巻 65
2. 論文標題 ソフトマテリアルのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 トライボロジスト	6. 最初と最後の頁 653 ~ 658
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.18914/tribologist.65.11_653	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Aoyagi Takeshi	4. 巻 188
2. 論文標題 Deep learning model for predicting phase diagrams of block copolymers	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 110224 ~ 110224
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commat.2020.110224	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 ITO Mariko I., YAMANAKA Sadato, AOYAGI Takeshi, OHNISHI Takaaki	4. 巻 18
2. 論文標題 Multifractal Analysis of Microphase Separated Structure in Block Copolymers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 214 ~ 216
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2019-0043	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 AOYAGI Takeshi	4. 巻 19
2. 論文標題 Computational Simulation for the Study of the Shape and Size of Polymer Chains by Using Coarse-grained Molecular Model	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Oleoscience	6. 最初と最後の頁 469 ~ 474
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5650/oleoscience.19.469	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 青柳岳司	4. 巻 67
2. 論文標題 高分子材料へのマテリアルズ・インフォマティクスの適用事例	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 工業材料	6. 最初と最後の頁 69-74
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計25件 (うち招待講演 14件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 青柳 岳司
2. 発表標題 階層的シミュレーションと深層学習による熱可塑性エラストマー弾性挙動の高速予測
3. 学会等名 第70回高分子討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 青柳 岳司
2. 発表標題 高分子レオロジーの実用的研究のためのスリップスプリング散逸粒子動力学コードの評価
3. 学会等名 第69回レオロジー討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 青柳 岳司
2. 発表標題 高分子界面・相分離構造を対象とした粗視化シミュレーション
3. 学会等名 第179回粘着研究会例会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takeshi Aoyagi
2. 発表標題 High-throughput prediction and optimization of stress-strain curve of thermoplastic elastomer
3. 学会等名 International Conference on Discrete Geometric Analysis for Materials Design（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takeshi Aoyagi
2. 発表標題 High-throughput prediction of stress-strain curve of thermoplastic elastomer
3. 学会等名 Pacifichem 2021（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 青柳岳司
2. 発表標題 シミュレーションとAIによる高分子材料開発
3. 学会等名 第69回高分子討論会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 青柳岳司
2. 発表標題 粗視化シミュレーションと機械学習の連携による高分子材料の高次構造設計
3. 学会等名 化学工学会第51回秋季大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 青柳岳司
2. 発表標題 粗視化シミュレーションと深層学習による熱可塑性エラストマー弾性特性の高速予測
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takeshi Aoyagi
2. 発表標題 High-Throughput Prediction of Stress-Strain Curve of Thermoplastic Elastomer Model Block Copolymers by Combining Hierarchical Simulation and Deep Learning
3. 学会等名 2020 MRS Spring/Fall Meeting（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Takeshi Aoyagi
2. 発表標題 High-Throughput Prediction of Stress-Strain Curve of Thermoplastic Elastomer Model Block Copolymers with Various Chain Structure by Combining Hierarchical Simulation and Deep Learning
3. 学会等名 APS March Meeting 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takeshi Aoyagi
2. 発表標題 Computational Study of the Microphase-Separated Structure and Elastic Property of Block Copolymers
3. 学会等名 MRM2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 青柳岳司
2. 発表標題 OCTAを基盤とする粗視化シミュレーションの産業利用
3. 学会等名 高分子学会講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 青柳岳司
2. 発表標題 高分子界面・相分離を対象とした粗視化シミュレーション
3. 学会等名 接着界面科学研究会Part 第7回例会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeshi Aoyagi
2. 発表標題 Classification of Metastable Structures in Microphase-Separated Block Copolymers using Deep Learning
3. 学会等名 International Symposium: Polymers and networks via topology and entanglement (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 青柳岳司
2. 発表標題 シミュレーションとAIの連携による機能材料設計への取り組み
3. 学会等名 第67回関西CAE懇話会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 青柳岳司
2. 発表標題 シミュレーションとインフォマティクスの融合による高分子材料開発の新展開
3. 学会等名 山口大学第4回ジョイントセミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeshi Aoyagi
2. 発表標題 Theoretical Calculation and Machine Learning study for the Microphase-Separated Structure and Elastic Property of Block Copolymers
3. 学会等名 Physical Aspects of Polymer Science 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeshi Aoyagi
2. 発表標題 Predicting Stress-Strain Behavior of Thermoplastic Elastomer by Theoretical Calculation and Deep Learning
3. 学会等名 APS March Meeting 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山中 貞人、青柳 岳司
2. 発表標題 機械学習を用いたブロック共重合体におけるメソ構造の分類
3. 学会等名 日本物理学会第74年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Aoyagi, S. Yamanaka
2. 発表標題 Prediction of the Stable Morphology of Block Copolymer by using SCF Calculation and Deep Learning
3. 学会等名 APS March meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Yamanaka, T. Aoyagi
2. 発表標題 Classification and prediction of the mesophases of block copolymers
3. 学会等名 APS March meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Aoyagi
2. 発表標題 Computational Study of the Morphology and Property of Block Copolymers
3. 学会等名 International Symposium: Polymers Meet Topology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Aoyagi
2. 発表標題 Challenge to Soft Material Development by Computer Simulation and Informatics
3. 学会等名 IPC2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 青柳 岳司、山中 貞人
2. 発表標題 粗視化分子動力学によるジャイロイド相の弾性挙動解析
3. 学会等名 第 66回レオロジー討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takeshi Aoyagi
2. 発表標題 Study of the Stress-Strain response of Co-continuous Phase of ABA Block Copolymer
3. 学会等名 Bridging the Scales in Soft Matter Simulations (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	義永 那津人 (Yoshinaga Natsuhiko)		
研究協力者	山中 貞人 (Yamanaka Sadato)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------