

AIMaP 研究集会等実施報告書

(Part 1/4) 名称・重点テーマ・キーワード等

項目	内容
名称	SIP 高分子 MI クラスターシンポジウム
採択番号	2018A014
重点テーマ	高分子劣化・破壊、不均一アモルファス構造解析、クラック伝搬、材料実験画像解析、マイクロ・マクロ階層構造解明
キーワード	高分子材料、マイクロ相分離、計算トポロジー解析、フェーズフィールド法、機械学習
主催機関	東北大学材料科学高等研究所
運営責任者	西浦 廉政
開催日時(開始)	2018/10/01 10:00
開催日時(終了)	2018/10/01 18:30
開催場所	東京大学駒場キャンパス ENEOS ホール

(Part 2/4) 最終プログラム・参加者数

項目	内容
最終プログラム	<p>詳細プログラム : https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp//SIP/index_symposium.html</p> <p>プログラム</p> <p>10:00 - オープニング</p> <p>10:10 - 10:25: 高分子 MI クラスター概要説明 西浦 廉政(東北大学材料科学高等研究所)</p> <p>「高分子 MI クラスター成果と展望」</p> <p>10:30 - 11:10: 招待講演 小石 正隆(横浜ゴム株式会社)</p> <p>「ゴム材料開発のためのマテリアルズ・インフォマティクス」</p> <p>11:20 - 11:50: D71 ユニット 藤元 伸悦(新日鉄住金化学株式会社)</p> <p>「構造用高分子材料の実用型最適設計・総合評価支援ツールの開発」</p> <p>11:50 - 12:30: 招待講演 D66 ユニット 大久保 雅隆(産業技術総合研究所)</p> <p>「CFRP 開発に貢献する分子スケールから主翼サイズの先端計測」</p> <p>12:30 - 14:00: 昼食+ポスター</p> <p>14:00 - 14:40: 招待講演 青柳 岳司(産業技術総合研究所)</p> <p>「シミュレーションによる高分子材料の高次構造と物性予測」</p> <p>14:50 - 15:20: D75 ユニット 山下 雄史(東京大学先端科学技術研究センター)</p>

	<p>「原子・分子スケールにおける高分子の計算・理論解析：高分子材料設計支援に向けて」</p> <p>15:20 - 15:45: 休憩</p> <p>15:45 - 16:15: D72 ユニット 平岡裕章(京都大学・高等研究院、理化学研究所・革新知能統合研究センター)</p> <p>「トポロジカルデータ解析を用いた材料開発の可能性」</p> <p>16:15 - 16:45: D74 ユニット 志澤 一之(慶應義塾大学)</p> <p>「分子鎖挙動に基づく熱硬化性高分子の巨視的な力学的パフォーマンスに関する非線形 FEM 解析」</p> <p>16:45 - 17:15: D70 ユニット 栗山 卓(山形大学大学院有機材料システム研究科)</p> <p>「高分子材料の寿命評価(耐候性、疲労・クリープ)」</p> <p>17:15 - 18:30 交流会 + ポスター</p>
参加者数	数学・数理科学:12 人、 諸科学: 23 人、 産業界: 37 人、 その他: 3 人


(Part 3/4) 論点・現状・今後の展開

項目	内容
当日の論点	<p>当日は台風の影響で大きく参加者の減少が見込まれたが、幸い 70 名を超える盛会となった。9 つの講演が実施され、とくに招待講演として企業から横浜ゴムの小石氏より、タイヤ製造過程における機械学習の応用例を提示していただいた。タイヤはころがり性能、濡れ性能、摩耗性など多目的最適化が求められる。とくにタイヤに混ぜるフィラーという微粒子の形状、材質、混入比率は、その強度に大きく影響を与えるが、その最適化は依然として trial and error の部分も多く、その判定のために高精細な MD シミュレーションと機械学習を併用することで、大幅な改善が見られるという内容であった。マルチスケールランダムモデルなど、そこで採用される数理モデルについて多くの質疑がなされた。数学的には平岡氏によるパーシステントホモロジーの材料分野への応用例と今後の可能性が示された。不定形、不均一系にホモロジーのアイデアを取り込んだ PD 解析は材料以外の分野へも応用可能であり、実際アモルファスではない金属系への適用についても議論がなされた。その他、高分子 MI クラスターの各チームからの報告がなされ、全体として複雑系である高分子材料の理解と新規材料創製のための数理的方法論も含めた包括的議論ができた。</p>
研究の現状と課題(既にできていること、できていないことの切り分け)	<p>材料の 3 次元構造及びそのパフォーマンス評価における数学的記述子を見つけることは、容易ではない。とくに高分子のような結晶構造をもたないアモルファスに対しては、適切なものがなかったといえる、それに対しポロジ的手法、とくに PD による特徴付けは新たな扉を開いたと言える。しかしながら、静的形状ではなく、時間的な材料パフォーマンスを示す良い記述子は未開拓のみである。これは材料劣化を取り上げてわかるように、どのような部分を取り出せば、強い材料と言えるかは、劣化を生じさせる駆動力に大きく依存し、単一の記述子では難しいことからわかる。</p>
新たに明らかになった課題	<p>マイクロ情報によるマクロな材料パフォーマンスの評価、とくに時間方向の劣化等の材料パフォーマンスを適切に記述する数学的指標の構築。</p>

今後解決すべきこと、今後の展開・フォローアップ

材料創製プロセスにおける非平衡状態の記述のための数的手法の開発、新たな解析的手法、さらに機械学習に代表される AI 的手法により、これまでにない新たな数理的記述子が発見、適用され高分子材料の新たな一面が明らかになってきたが、上の新たな課題でも述べたマイクロ情報によるマクロな材料パフォーマンスの評価及び時間方向の劣化等の材料パフォーマンスを適切に記述する数学的指標の構築については、第二期 SIP で継続できれば、そこでの主要課題とする予定である。

(Part 4/4) 写真

項目	内容
添付写真 1	 <p>SIP高分子ミクラーター シンポジウム</p> <p>https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/SIP/index_symposium.html</p> <p>2018年10月1日(月) 10:00~18:30</p> <p>会場 東京大学駒場キャンパス ENEOSホール (東京都目黒区駒場4-6-1)</p> <p>参加費 無料 (事前参加登録不要)</p> <p>講演者 青柳 浩明 国立研究開発法人産業技術総合研究所 副所長 教授 「シミュレーションによる高分子材料の多次構造と物性予測」 小石 正隆 株式会社 住友化学 住友化学 小石研究室 研究員 「ゴム材料開発のためのマテリアルズ・インフォマティクス」 大久保 雅隆 国立研究開発法人産業技術総合研究所 上席インベシジョンコーディネーター 「CFRP開発に貢献する分子スケールから実サイズの大規模計算」</p> <p>【詳細プログラムは下記をご参照ください】 https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/SIP/index_symposium.html</p> <p>SIP AIMaP JAIMR</p> <p>【主催】総務局イノベーション推進プログラム(SIP)高分子ミクラーター 【共催】文部科学省教育政策 AIMaP(愛知拠点: 九州大学IMR) 東北大学材料科学高等研究所(AIMR)</p> <p>お問い合わせ先: 西浦 康政 Email: nishura@tohoku.ac.jp</p>

添付写真 2



添付写真 3



添付写真 4

