

jh180020-ISJ

高分子材料の破壊・構造形成時の 2 次元散乱パターンと ディープラーニング分析技術の開発

萩田 克美 (防衛大学校)

概要 本研究課題では、高分子材料中でナノ構造体の動態をとらえる放射光実験データ解析技術の開発として、2次元散乱パターン(2DSP)のデータから、Deep Learning (DL)によって、物性値を推定できる可能性を、シミュレーションで生成した大量のデータ探ることを目指す研究である。第一に、高分子材料の破壊や構造形成時における 2DSP の挙動評価を、粗視化 MD シミュレーションで実現する手法を確立させた。ナノ粒子充填高分子系では、粗視化 MD シミュレーションから得た 2DSP の統計的挙動が、ナノ粒子とポリマーの相互作用に応じて変化することを確かめ、実験結果を再現することを明らかにした。ブロックコポリマーの相分離構造では、形成される構造の系統的な変化に応じて、2DSP が系統的に変化することを明らかにした。次に、2DSP に対する DL 分析を実現するために、大量なデータの効率的な作成や、DL 分析の手法に関する基盤的な検討を実施した。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

- ・北海道大学
- ・名古屋大学
- ・大阪大学

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

(3) 参加研究者の役割分担

参加研究者	役割分担
萩田 克美 (防衛大)	総括、手法高度化、高速化検討、可視化ベースの統合解析環境の検討
大宮 学 (北海道大)	マルチサイト連携利用技術の検討
LEE CHONHO (大阪大)	VR 可視化、Tensorflow 等での Deep Learning の効率的実施方法の検討
荻野 正雄 (名古屋大)	JPHCN-DF 圧縮によるストレージ処理系の検討。大規模可視化検討
伊達 進 (大阪大)	広義のストレージ処理システム検討、大規模可視化技術検討

参加研究者	役割分担
村島 隆浩 (東北大)	高分子相分離構造の伸張流などの変形下での構造と機能に関する計算実施
岩岡 伸之 (鶴岡高専)	高分子相分離構造の伸張流などの変形下での構造と機能に関する計算実施

2. 研究の目的と意義

本研究課題の最終目的は、高分子材料中でナノ構造体の動態をとらえる放射光実験データ解析技術の開発である。これまでの大規模計算の計算結果を直接議論する研究スタイルとは異なり、新規の研究として、Deep Learning (DL)とシミュレーションを組み合わせ、DL の活用可能性を目指す検討を行った。

本研究課題では、高分子材料の系における 2次元散乱パターン(2DSP)に関して、シミュレーションの観点で詳しく検討した。高分子材料においては、一軸延伸下での破壊や構造の変化について、異方的な 2DSP の挙動を計測することで、内部状態の構造的情報を得ている。

本研究課題では、第一に、粗視化 MD シミュレーションによって、実験結果と比較して妥当な 2DSP の挙動が評価できることを確立させた。

第二に、系統的に条件を変えた粗視化 MD シミュ

レーションから、2DSP データを効率よく、JHPCN などの複数のスパコン等を利用して作成する仕組みの検討に焦点を充てた。

本研究課題の背景として、材料中のナノ構造の動態を観測するニーズは高いが、計測手段は限られ、得られる情報は限定されるという実験上の課題がある。材料中の nm レベルの構造は、表面を切削して観察する破壊測定で可能であるが、破壊測定では構造変化をとらえることはできない。一方で、散乱などを用いた非破壊測定では、時分割測定ができるものの、逆空間の 2DSP などの一部の情報が欠落した情報しか観察できない。これらの部分情報をうまく統合して情報処理すること（DL など）で、材料中のナノ構造の動態を、できるだけ詳しく把握したいと考えている。

特に「破壊測定の断面像から（3次元構造のモデリングをせずに）2DSP の予測が可能であるか？」「2DSP から（背後にある structure-properties relation をもとに大規模 MD 計算をせずに）物性が予測できるか？」の問いに対し、現時点で実現できることを見だし、実現可能な精度を知ることが、本研究の目指すところである。

例えば、ポアソン比が 0.5 より小さい高分子材料を延伸させると、ポイドが発生し、破壊の要因となる。3次元構造体の中で、ナノスケールのポイドの形成の実空間での動態観察は困難であるが、放射光実験による 2次元散乱パターンの時分割測定で、動態に関する情報を得ることができる。また、高分子相分離系のナノ構造は、集束イオンビーム-走査電子顕微鏡（FIB-SEM）などの破壊測定で 3次元構造観察を得ることができるが動態を観測できない。（なお、最近、東北大 陣内らにより、TEM フォルダに延伸装置を組み込んだ in situ TEM 観察で、延伸させた超薄切片において、フィルター界面からナノポイドが成長する挙動が観察されているなどの実験的進展もある。）両者において、非破壊測定である 2次元散乱パターンの挙動から、3次元ナノ構造の動態やそれに起因した物性の挙動を、DL 技術で予測できる可能性や限界の把握が、本研究の目的と言える。

また、挙動が似ている異なるシミュレーションの結果の間での転移学習が有効に機能するののかについて調べることも本研究の目的である。これは、現実材料実験では大量データ取得が困難であることが多いため、シミュレーションで生成した学習結果を活用し、学習の性能を高める転移学習を有望視しているからである。

本研究では、大規模粗視化 MD シミュレーションと、DL は、解析技術の開発手段として活用する。特に、前段階の大量のデータを作成する効率を高める研究に注力した。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

将来のスパコン環境を見据えた技術検討には、JHPCN 拠点の構成教員との情報交換やディスカッションが、非常に有意義である。これまでも関連の課題で協力いただいております、拠点構成教員の実力や信頼は高いと考えている。

本研究課題では、複数の拠点のスパコンを用いて、キャパシティーコンピューティングを行う課題である。複数の拠点のスパコンを用いたシミュレーション実施、大規模データの処理、そして、可視化の効率的な実施のために、構成拠点の教職員の専門的な協力を得て、協働することが最良な方法である。これまでも、シミュレーションによる研究をしたい研究者側と、構成拠点の教職員の能力を相補的に合わせて、研究者側はシミュレーション技術の向上につながり、構成拠点側としてはシステムの利用を通じて他のユーザーの利便性の向上に資するなどの実益もあった。今後も協力・協働体制を継続し、ユーザーと構成拠点の連携により、広く計算科学・計算機科学の発展に貢献できると考えている。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

今年度の新規課題につき、該当しない。

しかしながら、前々年度までの JHPCN 課題実施で蓄積した技術的ノウハウを生かして、研究課題を遂行するものである。これまで、フィルター充填高分子材料のモデルの提案と基礎的検討を実施し

てきました。

H28 年度の JHPCN 課題では、本研究課題に関連するものとして、下記のテーマを検討した。

- (1) シア流動下の高分子メルトの 2DSP の評価 (研究成果リスト・学術論文 1 0)
- (2) 高分子メルトの延伸破壊・ナノボイド形成 (研究成果リスト・学術論文 3)
- (3) 粒径分散を持つフィラー系の 2DSP の評価 (研究成果リスト・学術論文 1 4)
- (4) シア流動下の Clay 充填高分子材料の 2DSP の評価 (研究成果リスト・学術論文 4)

上記のテーマについては、H30 年度中に検討を深め、すべて論文出版した。

5. 今年度の研究成果の詳細

本研究課題では、高分子材料の物性と高分子材料の構造や 2DSP が、相関関係を持つことが前提と考えている。粗視化 MD シミュレーションでは、高分子材料の構造と物性を同時に評価することができる。3次元構造から形式的に計算できる 2DSP と物性の相関を DL で分析予測できるかが、本研究課題の主たる関心である。

その実現のためには、現時点では、「形式的に計算した 2DSP が実験観察を適切に再現しているか?」「大量のデータを如何に効率よく得るか?」が、課題である。従って、本年度は、下記の 2 項目を進めた。

- ・粗視化 MD シミュレーションから 2DSP を計算する手法の開発と整備
- ・複数のスパコンを利用し、実質的なキャパシティーコンピューティング作業を効率化するツールの検討と整備

特に、様々な系における 2DSP の計算手法を確立させる検討を、重点的に進め、論文出版させた。

- ・架橋高分子ネットワークのナノ破壊起点と 2DSP の関係
- ・フィラー充填高分子材料系でのナノ破壊起点と 2DSP の関係
- ・高分子相分離の構造形成と 2DSP の関係

また、2DSP から逆問題として異方的な 3次元構

造を推定する手法も検討した。

加えて、ナノ粒子充填高分子系で 2DSP への影響が大きい因子である有機無機界面の相互作用について、ナノコンポジットの有機無機界面の相互作用をデータから学習等する手法の検討を行った。

(1) 粗視化 MD 計算から 2DSP を計算する手法の開発と整備 1 (ポリマーネットワーク)

架橋高分子ネットワークのナノ破壊起点と 2DSP の関係については、研究成果リスト・学術論文 3 として出版した。

この論文では、Kremer-Grest 模型の粗視化 MD で再現したポリマーメルトを、ポアソン比 (0.4, 0.46, 0.5) を仮定して、一軸延伸させ、ナノボイドの形成を確認した。ここで、ポアソン比 0.46 は、ナノ粒子充填高分子系のポアソン比である。ポアソン比 0.4 は、手法確認のために用いた。システムサイズは、数十 nm の領域を再現した。ナノボイドが形成すると、2DSP に反映されることを検証した。得られた結果は、フランス ESPCI の Creton グループが観測した結果と一致していた。この手法確認により、有機無機界面の相互作用の違いを考慮した粗視化 MD シミュレーションで 2DSP に対する相互作用依存性が検討できる見通しを得た。

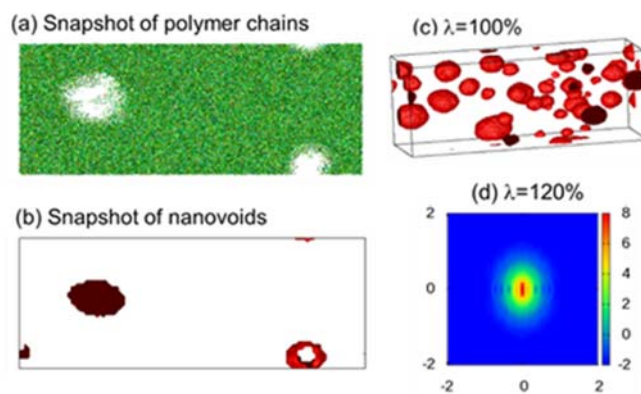


図 1 ポリマーメルトの一軸延伸破壊のイメージ。(a)鎖のスナップショット、(b)ナノボイドのみのスナップショット、(c)大きな系、(d)2DSP。

(2) 粗視化 MD 計算から 2DSP を計算する手法の開発と整備 2 (フィラー充填高分子)

フィラー充填高分子材料系のナノ破壊起点と

2DSP の関係については、研究成果リスト・学術論文 17 として出版した。

フィラー充填高分子材料系における一軸延伸破壊は、ナノ粒子とポリマーの間の相互作用により異なる破壊挙動を示すことが知られている [Hagita-Morita-Takano, Polymer 2016 等]。図 2 に示すように、相互作用が引力的な場合、凝集破壊となり、斥力的な場合は、界面破壊となる。個々で、ポアソン比は、現実の材料のフィラー充填高分子材料の値である 0.46 を仮定した。

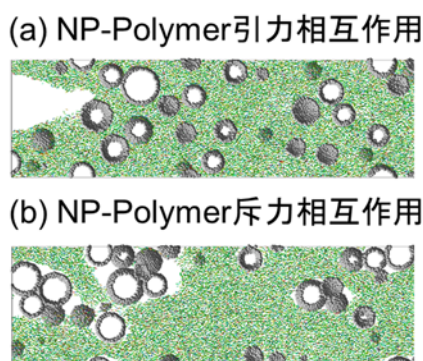


図 2 フィラー充填高分子材料系の一軸延伸破壊のイメージ。ポアソン比は、0.46 を仮定。

ナノ粒子とポリマーのコントラストを変え、実験で期待される 2DSP と、ナノボイドのみに焦点をあてた 2DSP を計算した。その結果を図 3 に示す。引力的相互作用の場合に、ナノボイドの成長に対応した中心部分のピークの増大が観察された。

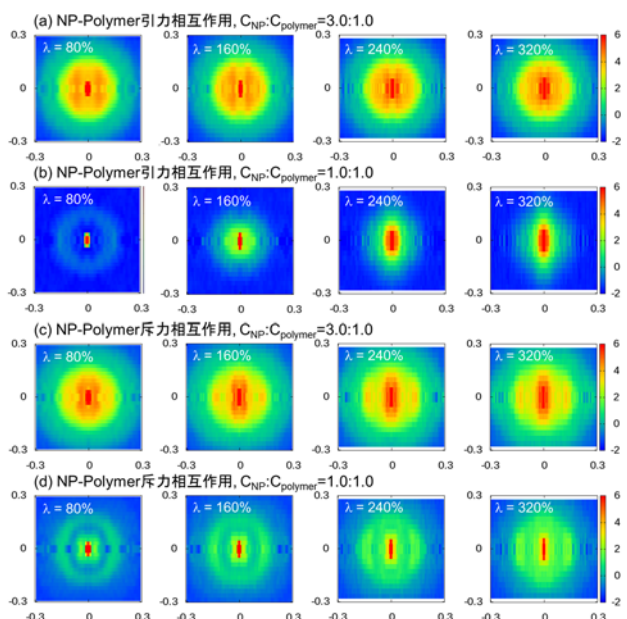


図 3 延伸したフィラー充填高分子材料系の 2DSP。

実験的には、相互作用が引力的な場合と斥力的な場合で、scattering invariant (Q) と呼ばれるモーメント量が、特徴的な振る舞いを示すことが知られている。引力的な場合に、 Q は延伸率の増大に対してキックを持つ。シミュレーションで得た 2DSP から計算した Q を図 4 に示す。実験で知られる事実をよく再現していることから、粗視化 MD でナノ粒子とポリマーの間の相互作用を変えた系の 2DSP 解析は妥当であると確認できた。これにより、2DSP の画像から物性を相関評価するなどの DL 解析が期待できる見通しを得た。

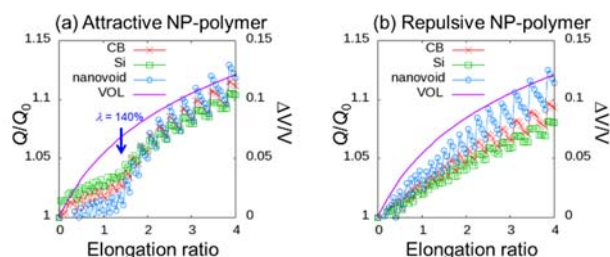


図 4 scattering invariant の挙動。

(3) 粗視化 MD 計算から 2DSP を計算する手法の開発と整備 3 (ブロックコポリマー)

高分子相分離の構造形成と 2DSP の関係については、研究成果リスト・学術論文 13 として出版した。

この検討では、A 粒子と B 粒子の 2 種の粒子で作られた高分子鎖 (ABA ブロックコポリマー) を考えた。図 5 (a) に示すように、A 粒子間は引力的で、そのほかは斥力的である。A 粒子のガラス転移温度以下にして、A 粒子がガラス状に堅く凝集するようにした。なお、この温度では、B 粒子は、ガラス転移温度以上であり、ゴムのような性質を示す。本研究では、図 5 (b) に示す fraction が異なる高分子鎖のメルトを扱った。

この系について、一軸延伸させた。その結果を図 6 に示す。また、A8B48A8 について、一軸延伸の断面像と、2DSP を図 7 に示す。図 6 のスナップショットから、ガラスドメインが連結している時に伸ばされている様子がわかる。図 7 から延伸率が大きいと 2DSP にスポットが生じることがわかる。これらの挙動から、構造由来の 2DSP の画像と物性

の間での相関を評価・予測するなどの DL 分析が期待できる見通しを得た。

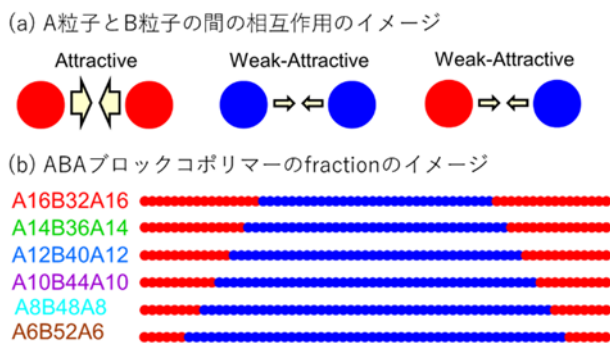


図 5 ABA ブロックコポリマーのイメージ。(a) A 粒子と B 粒子の間の相互作用イメージ、(b) 各フラクションの ABA ブロックコポリマーのイメージ。

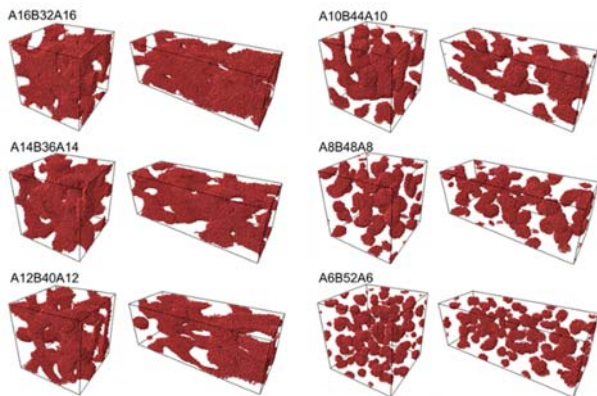


図 6 一軸延伸のスナップショット。

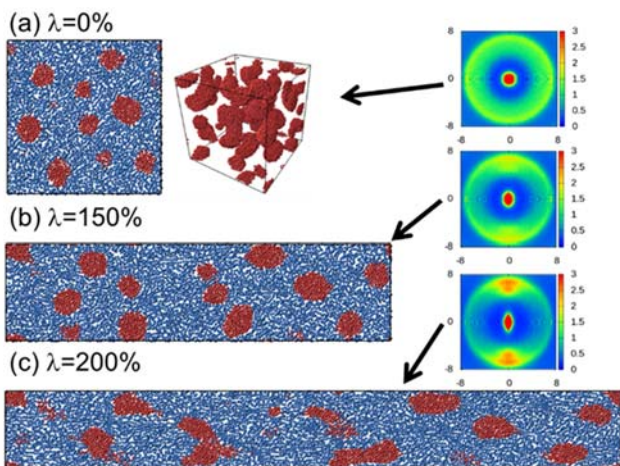


図 7 一軸延伸の断面像と、2DSP。

図 8 は、SS カーブに対応して 2DSP が系統的に変化する様子を示している。これにより、2DSP の挙動から推定する形で、SS カーブの点をマップできることが期待される。この対応関係は、画像ベースの特徴抽出にあたるので、DL が有効であると

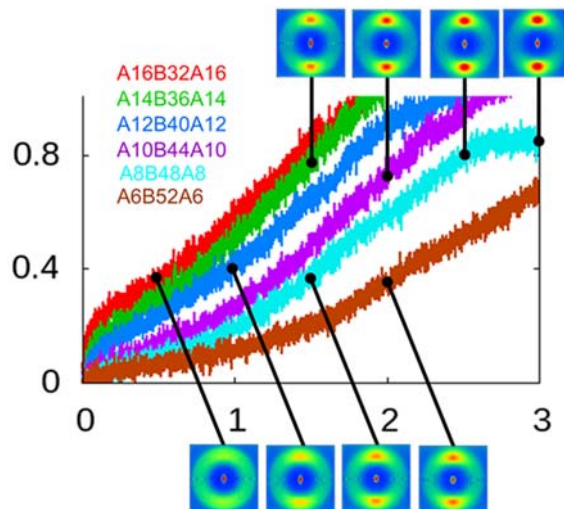


図 8 SS カーブに対応した 2DSP。

(4) 複数のスパコンを利用し、実質的なキャパシティーコンピューティング作業を効率化するツールの検討と整備

2DSP などの大量データ生成のために、ジョブの実行管理、データ処理の効率化において、「クラウド上でのロボット化」が、重要な情報システム技術であると考えられる。

最初に、センター間での python ベースの遠隔制御ツールとして、paramiko を利用したツールを試作した。関係者に対して技術情報を提供し、各々が種々の技術検討をすることで、実践的な動作確認を進めた。

併せて、スクリプトベースで、SMILES 記法から LMAMPS の入力ファイルを作る EMC ツールを利用して、ロボットの計算の実用化の準備を行った。

その知見を生かし、研究成果リスト・学術論文 8 と 11 を出版した。

また、python ベースでの LAMMPS データの可視化ソフトとして急成長している OVITO について、スクリプトベース可視化の可能性を、検討し、ロボットの計算の準備を行った。

今後は、これらのツールの各自の利用情報や工夫などを集約し、組み合わせることで実用的なツールとして利用できるようにしていく考えである。

(5) 2DSP から 3 次元構造を推定する PM-2DpRMC 法の妥当性の検討

2DSP から 3 次元構造を逆問題として推定モデリングする手法として、PM-2DpRMC 法を開発し、その妥当性検証を行った。PM-2DpRMC 法は、過去の JHPCN 課題でプロトタイプコードを完成させていたが、実践的な妥当性検証が遅れていた。

研究成果リスト・学術論文 15 にて、ゲル中にナノ粒子が充填された系の粗視化 MD 計算で、相互作用により延伸中の 2DSP で特徴的な振る舞いを示すことを明らかにした。この論文で得た 2DSP を教師データとして、PM-2DpRMC 法で 3 次元構造を推定し、構造の統計的な性質が一定程度再現されることを確認した。この成果は、研究成果リスト・学術論文 19 として、論文投稿中である。この結果から、2DSP に対する DL 分析も、物性の推定において有効であることと期待できる。

ゴム材料系におけるフィラーの構造については、研究成果リスト・学術論文 1 で実空間の 3 次元構造を計測し、学術論文 2 で RMC 法の有効性を示し、学術論文 16 で 3D-VR を活用した詳細観察について検討した。これらの知見を生かし、フィラー充填ゴム材料の PM-2DpRMC 解析を進めている。

(6) ナノコンポジットの有機無機界面の相互作用をデータから学習等する手法の検討

ナノコンポジットの有機無機界面において、相互作用は、破壊／接着などの挙動で重要な役割を果たしている。このような系のシミュレーション手法として、ReaxFF 法が注目されている。ReaxFF の力場は、多数の DFT 計算のデータから学習・フィッティングした粗視化力場と見なすことができる。この粗視化により、DFT 計算よりも遙かに多くの数の原子を扱うことが可能となる。非線形探索問題としての学習には、教師データ補充や学習方法検討の半自動化ツールとキャパシティーコンピューティングの組み合わせが重要と考えられる。

大阪大学サイバーメディアセンターの協力を得て、LAMMPS の ReaxFF パッケージや、ReaxFF の力場を非線形探索問題として推定するツールに関する

情報交換のセミナーを開催して、関連技術について検討を進めた。特に、ReaxFF 力場の改良／昨背については、SCM 社の ADF パッケージを活用し、効率的な方法を検討した。また、更に効率化するために、python ツールの開発を検討した。

ReaxFF 法の MD 計算でさまざまな材料毎の相互作用や破壊などのマクロ挙動をシミュレートし、粗視化 MD 計算などを通じたマルチスケールシミュレーション計算も考慮しつつ、2DSP を通じた DL 等での相関分析を、実用的な材料開発に応用することが将来の目標である。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

本研究課題では、高分子材料の構造に由来した 2DSP から、破壊や構造形成などに関する構造情報や物性について、DL 分析などでの相関解析の可能性について検討した。特に、「形式的に計算した 2DSP が実験観察を適切に再現しているか?」「大量のデータを如何に効率よく得るか?」について検討を進めた。

架橋高分子ネットワークやフィラー充填高分子材料系における延伸破壊（初期のボイド形成）やブロックコポリマーの相分離構造の形成や変形に関して、粗視化 MD シミュレーションで 2DSP を評価する手法について、論文出版し、確立させた。

また、粗視化 MD 計算で得た 2DSP から、3 次元構造の統計的性質を、逆問題として一定の精度で推定できることを確かめることができた。

これらの研究に加えて、いくつかの研究を論文出版することで、多角的に、粗視化 MD 計算での 2DSP の評価手法を確立させることができた。

一方で、DL 等での相関分析の可能性を検討するために、大量の 2DSP データを粗視化 MD 計算で得るためのツールの試作検討も行った。実際に、DL 検討する前段階として、大量のデータの作成作業の効率を高めることは、重要な課題である。今後も、引き続き、作業効率の良い HPC システムの利用方法を検討していきたい。

加えて、DL 分析の HPC 的効率化や、DL の基盤技術である非線形探索法の活用などの検討すること

ができた。特に、ReaxFF 法により、さまざまな材料の個性を調べ、その 2DSP との相関について、DL 分析を行う研究に発展させたい。

実際に 2DSP のデータを大量に作成し、DL 分析の有効性検討を行うためには、大容量の計算資源が必要である。このような大容量の計算資源の獲得と計算実施は将来の課題として考えている。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

1. K. Hagita, T. Higuchi, H. Jinnai, Super resolution for asymmetric resolution of FIB-SEM 3D imaging of silica nanoparticles in SBR. *Scientific Reports*, 2018, 8, 5877.
2. K. Hagita, T. Tominaga, T. Sone, Large-scale reverse Monte Carlo analysis for the morphologies of silica nanoparticles in end-modified rubbers based on ultra-small-angle X-ray scattering data. *Polymer*, 2018, 135, 219-229.
3. K. Hagita, Two-dimensional scattering patterns of polymers in elongated polymer networks and composites. *Polymer*, 2018, 147, 247-259.
4. K. Hagita, Y. Shudo, M. Shibayama, Two-Dimensional Scattering Patterns and Stress-Strain Relation of Elongated Clay Nano Composite Gels: Molecular Dynamics Simulation Analysis. *Polymer*, 2018, 154, 62-79.
5. Y. Shudo, A. Izumi, K. Hagita, T. Yamada, K. Shibata, M. Shibayama, Diffusion Behavior of Methanol Molecules Confined in Cross-linked Phenolic Resins Studied using Neutron Scattering and Molecular Dynamics Simulations. *Macromolecules*, 2018, 51, 6334-6343.
6. A. Izumi, Y. Shudo, K. Hagita, M. Shibayama, Molecular dynamics simulations of cross-linked phenolic resins using a united-atom model. *Macromolecular Theory and Simulations*, 2018, 27, 1700103.
7. N. Iwaoka, K. Hagita, H. Takano, Multipoint Segmental Repulsive Potential for Entangled Polymer Simulations with Dissipative Particle Dynamics. *J. Chem. Phys.*, 2018, 149, 114901.
8. K. Hagita, Y. Senda, Molecular Dynamics Studies on Pressure-Induced Structural Change of Poly(4-methyl-1-pentene) Melts, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 2018, 87, 114803.
9. T. Murashima, K. Hagita, T. Kawakatsu, Elongational viscosity of weakly entangled polymer melt via coarse-grained molecular dynamics simulation, *日本レオロジー学会誌*, 2018, 46, 207-220.
10. K. Hagita, T. Murashima, N. Iwaoka, Thinning Approximation for Calculating Two-Dimensional Scattering Patterns in Dissipative Particle Dynamics Simulations under Shear Flow, *Polymers*, 2018, 10, 1224.
11. K. Hagita, S. Fujiwara, N. Iwaoka, Structure Formation of a Quenched Single Polyethylene Chain with Different Force Fields in United Atom Molecular Dynamics Simulations, *AIP Advances*, 2018, 8, 115108.
12. K. Hagita, S. Fujiwara, N. Iwaoka, An Accelerated United-Atom Molecular Dynamics Simulation on the Fast Crystallization of Ring Polyethylene Melts, *J. Chem. Phys.*, 2019, 150, 074901.
13. K. Hagita, K. Akutagawa, T. Tominaga, H. Jinnai, Scattering Pattern Analysis of Stress-Strain Relations on Phase-separated ABA Block Copolymers under Uniaxial Elongating Simulations, *Soft Matter*, 2019, 15, 926-936.
14. K. Hagita, Effect of diameter distribution on two-dimensional scattering patterns of a rubber model filled with carbon black

and silica NPs, *Polymer*, 2019, 160, 65-72.

15. K. Hagita, Two-Dimensional Scattering Patterns of Coarse-grained Molecular Dynamics Model of Filled Polymer Gels during Uniaxial Expansion, *Polymer*, 2019, 166, 155-168.
16. K. Hagita, S. Matsumoto, K. Ota, A Study of Commodity VR for Computational Material Sciences, *ACS Omega*, 2019, 4, 3990-3999.
17. K. Hagita, Nanovoids in uniaxially elongated polymer network filled with polydisperse nanoparticles via coarse-grained molecular dynamics simulation and two-dimensional scattering patterns, *Polymer*, 2019, in press. DOI: 10.1016/j.polymer.2019.04.040
18. K. Hagita, H. Morita, Effects of Polymer/Filler Interactions on Glass Transition Temperatures of Filler-Filled Polymer Nanocomposites, (投稿中).
19. K. Hagita, Particle-Mesh Two-Dimensional Pattern Reverse Monte Carlo Analysis on Filled-Gels during Uniaxial Expansion, (投稿中).

(2) 国際会議プロシーディングス

なし

(3) 国際会議発表

1. K. Hagita, 3D Modeling and Simulations of Morphologies in Filler-filled Rubbers 4th International Congress on 3D Materials Science (3DMS) 2018, 2018 年 6 月, Helsingør, Denmark (招待講演)
2. K. Hagita, Coarse grained MD simulations for filler-filled polymer network systems, Symposium on Modeling Supra-molecular Structures with LAMMPS 2018 年 7 月, Philadelphia, USA.
3. T. Murashima, "Coarse-Grained Molecular

Dynamics Simulation of Elongational Flow of Polymer Melts" First International Conference on 4D Materials and Systems (4DMS) 2018 年 8 月, Yamagata, Japan

(4) 国内会議発表

1. 萩田 克美, 樋口 剛志, 陣内 浩司, ゴム中フィラーの大容量 3D 実像から評価した小角散乱プロファイルの検討, 高分子学会 年次大会 (2018.5)
2. 萩田 克美, ユナイテッドアトム模型の見直しと高分子溶融体の構造圧力変化の予測, つくばソフトマター研究会 (2018.6)
3. 萩田 克美, 高分子材料の計算物理の現状と展望, 第 56 回高分子材料自由討論会 (2018.6)
4. 萩田 克美, ReaxFF 法による高分子系材料の破壊に関する HPC 活用の基盤的準備研究, 平成 29 年度名古屋大学 HPC 計算科学連携研究プロジェクト成果報告会 (2018.7)
5. 萩田 克美, 3次元構造観察における機械学習技術の活用検討, SCANTECH2018 日本顕微鏡学会 (2018.8)
6. 萩田 克美, 仙田 康浩, デンドリマー側鎖をもつ高分子溶融体の構造圧力変化の予測, 日本物理学会 秋季大会 (2018.9)
7. 萩田 克美, ゴム中ナノ粒子のネットワーク構造の離散幾何解析と構造機能相関解明, 新学術領域「離散材料」領域会議 (2018.11)
8. 萩田 克美, 材料物性予測の高分子計算物理的アプローチと展望, 高分子学会 2018 東海シンポジウム「高分子計算科学とその利用」(2019.1)
9. 萩田 克美, ゴム材料のナノ構造観察におけるディープラーニング技術の応用検討, レオロジー学会 高分子加工技術研究会 第 90 回例会 (2019.3)
10. 萩田 克美, 高野 宏, 複数のトラジェクトリデータ記録による時間相関関数の効率的な評価方法, 日本物理学会 第 74 回年次大会

(2019. 3)

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

1. プレスリリース「ディープラーニングなど AI 技術を活用した超高速の 3 次元高分解能観察技術の開発に成功」

http://www2.tagen.tohoku.ac.jp/lab/news_press/20180412/

http://www2.tagen.tohoku.ac.jp/lab/news_media/20180413/

日本経済新聞電子版 (2018/04/12)

日本経済新聞電子版_プレスリリース
(2018/04/12)

日刊工業新聞 (2018/04/13)

日経産業新聞 (2018/04/13、6 面)

日刊工業新聞 (2018/04/13、29 面)

EE Times Japan (2018/04/16)

※Yahoo! ニュース、TechEyesOnline 等に転載あり

2. 萩田 克美, 高分子素材の分子シミュレーションの応用. 月刊ソフトマター (2018. 6) 16.
3. 萩田 克美, 松本 茂紀, Unity と HTC VIVE を利用したシミュレーション結果の 3D-VR 表示入門, 大阪大学サイバーメディア HPC ジャーナル, (2018. 8) 21-28.
4. 萩田 克美, 高分子材料研究におけるディープラーニング活用の入門的事例紹介, 高分子学会誌, (2018. 12) 97, 684-685.