



吉田亮
(情報・システム研究機構 統計数理
研究所 ものづくりデータ科学研究
センター・教授 センター長)

課題名：データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出

概要・目標

分子動力学シミュレーションに基づく高分子物性自動計算プログラムRadonPyを用いて、データ駆動型研究に資する世界最大の高分子物性データベースを構築する。多数の大学・企業・国研の連合体を形成し、データベースを共同で開発する。

実施体制・関係機関・詳細

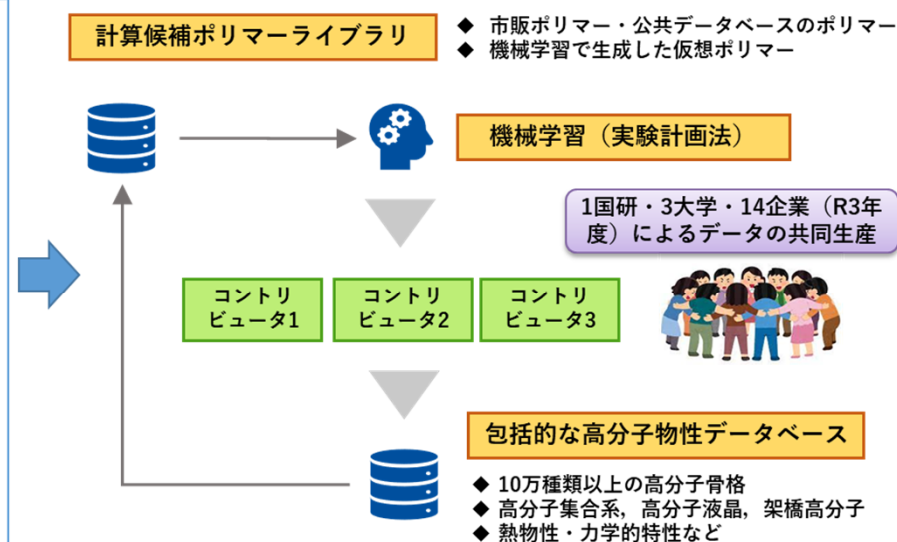
データ科学の先進技術と独自の高分子自動計算の技術、1国研・3大学・14企業による産学の強力なパートナーシップ、そして我が国のフラグシップスパコン「富岳」の計算資源を融合し、10万種類以上の高分子骨格を包含する前人未踏の高分子物性データベースを創出する。

RadonPy

- LAMMPSによる高分子物性計算の自動化を支援するPythonライブラリ
- 力場の割り当て、初期構造生成、エラー処理、平衡・非平衡MDによる物性評価までの全工程を完全に自動化
- 高分子集合系、高分子液晶、架橋高分子
- 最新版：アモルファスポリマーや延伸配向したポリマーの14物性の自動計算に対応

- | | |
|--------------------------|---------------------------------|
| • Thermal conductivity | • Isentropic compressibility |
| • Thermal diffusivity | • Bulk modulus (isothermal) |
| • Density | • Isentropic bulk modulus |
| • Radius of gyration | • Speed of sound |
| • Specific heat capacity | • Thermal expansion coefficient |
| • Specific heat capacity | • Linear expansion coefficient |
| • Compressibility | • Dielectric constant (static) |

代表機関：統計数理研究所
協力機関：東京工業大学
連携機関：
東京大学
東京薬科大学
三菱ケミカル株式会社
JSR株式会社
出光興産株式会社
株式会社ダイセル
横浜ゴム株式会社
三井化学株式会社
株式会社日本触媒
東洋紡株式会社
株式会社アスミス
東ソー株式会社
旭化成株式会社
日東電工株式会社
住友ベークライト株式会社
株式会社デンソー



想定される具体的成果

- **【データ駆動型高分子材料研究のデータ基盤】** 10万種類以上の高分子骨格を包含する世界最大の高分子物性データベースを創出する。複数物性の同時分布を観測し、物性空間のパレートフロンティアの位置や構造的特徴を解析することで、高分子科学の体系的知識を獲得する。
- **【マテリアルズインフォマティクス基盤技術】** 高分子物性自動プログラムと分子設計の機械学習アルゴリズムを統合したベイズ最適化による自動分子設計のプログラムを開発する。
- **【新材料創製】** データベースと機械学習を組み合わせることで、革新的な特性を有する新しいポリマーを発見