

全原子分子動力学シミュレーションによる高分子物性自動計算

最新版：14物性の自動計算に対応
(2021/09/16)

- ◆ Thermal conductivity
- ◆ Thermal diffusivity
- ◆ Density
- ◆ Radius of gyration
- ◆ Specific heat capacity C_p
- ◆ Specific heat capacity C_v
- ◆ Compressibility (isothermal)
- ◆ Isentropic compressibility
- ◆ Bulk modulus (isothermal)
- ◆ Isentropic bulk modulus
- ◆ Self-diffusion coefficient
- ◆ Thermal expansion coefficient
- ◆ Linear expansion coefficient
- ◆ Dielectric constant (static)

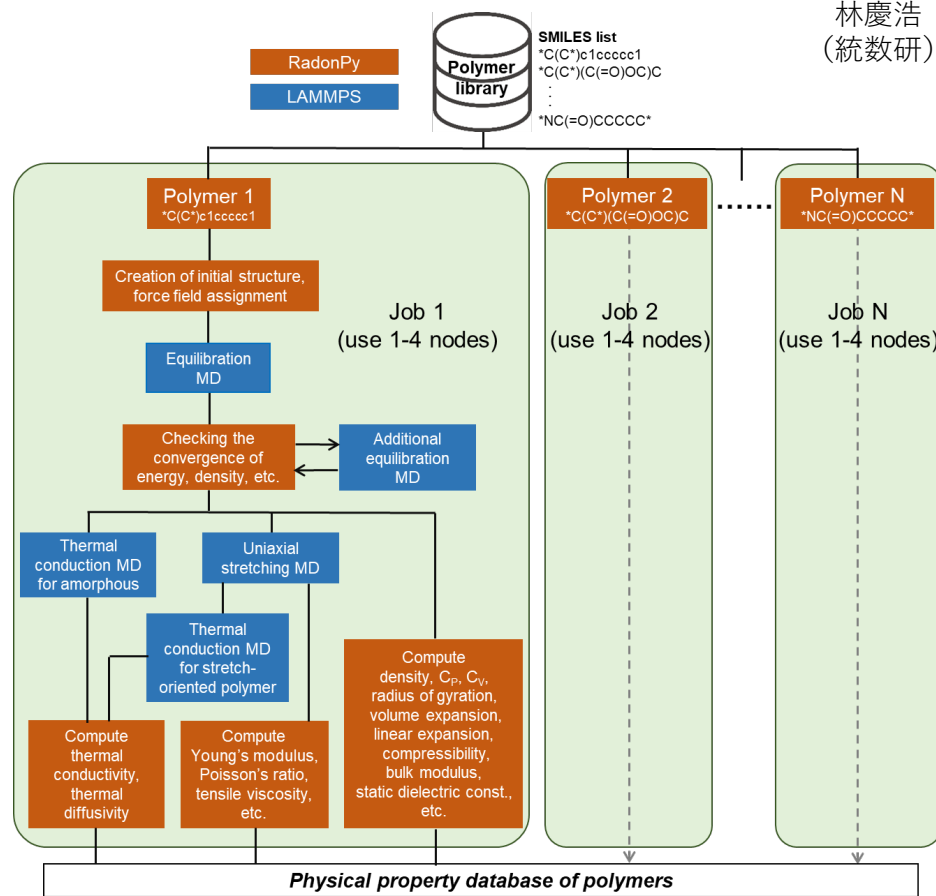
- 力場の割り当て、初期構造生成、エラー処理、平衡・非平衡MDによる物性評価までの全工程を完全に自動化
- 高分子集合系、高分子液晶、架橋高分子
- 最新版：アモルファスポリマーや延伸配向したポリマーの自動計算に対応

R_n RadonPy (open source software)

古典分子動力学計算ソフトウェアLAMMPSによる高分子物性計算を自動化するPythonライブラリ



林慶浩
(統数研)



産学連合体による高分子物性データベースの共創

10⁵-10⁷ポリマーの包含する世界最大の高分子物性データベースの創出

複数の大学・企業・国研によるデータの共同生産・共有

計算候補ポリマーライブラリ

- ◆ 市販ポリマー・公共データベースのポリマー
- ◆ 機械学習で生成した仮想ポリマー



機械学習（実験計画法）



1国研・3大学・14企業（R3年度）によるデータの共同生産

コントリビュータ1

コントリビュータ2

コントリビュータ3



包括的な高分子物性データベース

- ◆ 10万種類以上の高分子骨格
- ◆ 高分子集合系, 高分子液晶, 架橋高分子
- ◆ 熱物性・力学的特性など



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

革新的特性を有する高分子材料の予測と発見

分子設計の機械学習アルゴリズムと高分子物性自動計算システムの融合

機械学習の予測は内挿的である。したがって、機械学習だけではデータが存在しない未踏領域に存在する革新的な材料を予測できない。そこで、外挿的な予測を実現するために計算機内に仮想的なラボラトリーワークフローを構築し、実験計画法に基づいてデータの取得（シミュレーションによる物性評価実験）とモデルの再学習を反復しながら、モデルの予測可能な範囲を段階的に拡大していく。

