

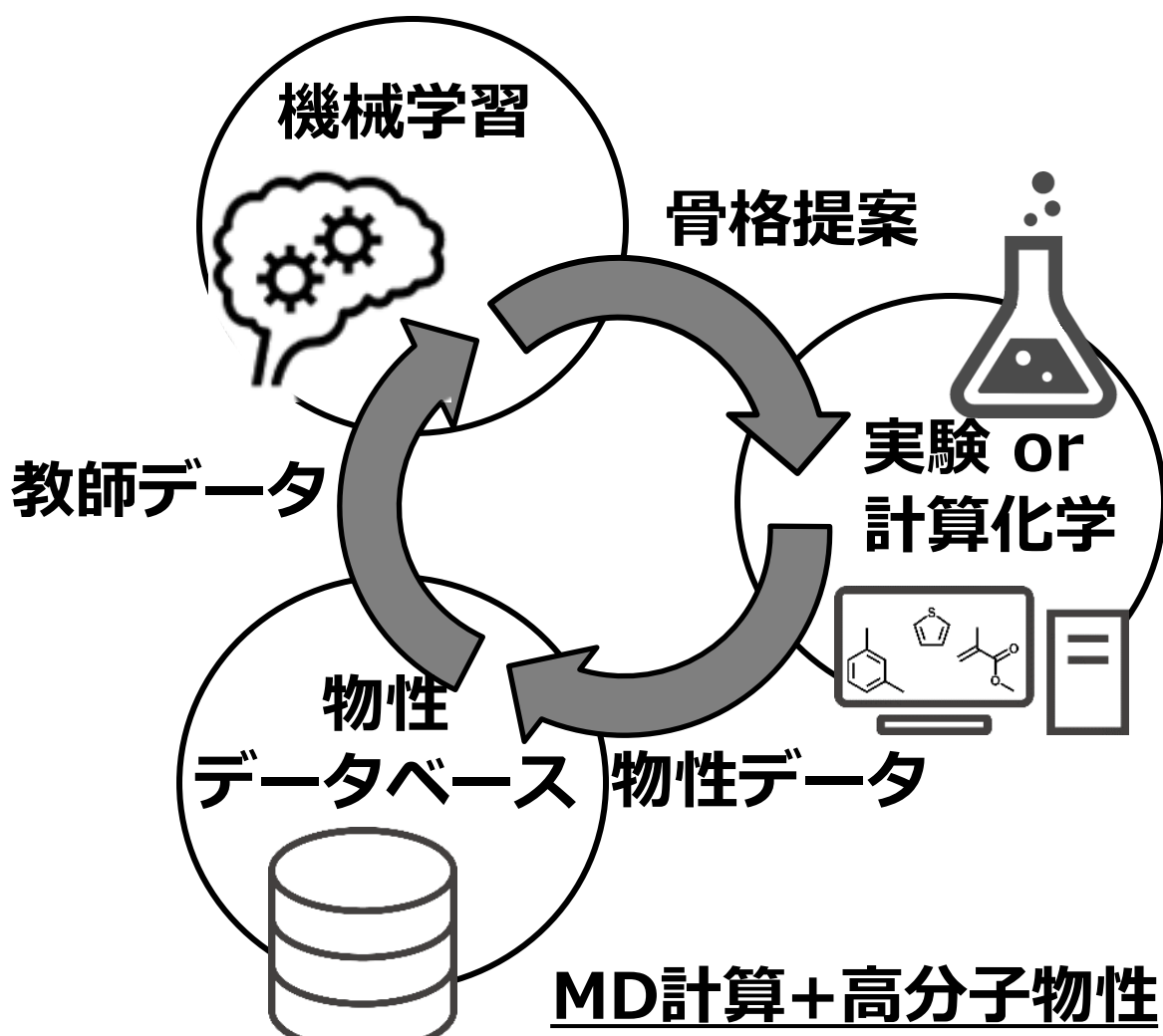
高分子物性自動計算システムRadonPyの開発と 産学連携による高分子物性データベースの共創

林 慶浩 データ科学研究系 助教

背景

材料データとデータ科学・計算科学を融合した材料研究の新しい形態“マテリアルズインフォマティクス（MI）”が大きな注目を集めている。一方で、データ科学に資する高分子材料の物性データベースは、現時点では存在していない。MIを高分子材料に適用するために、高分子材料の計算物性データベースと、完全自動化された高分子物性計算システムの開発を行った。

データ駆動型材料探索



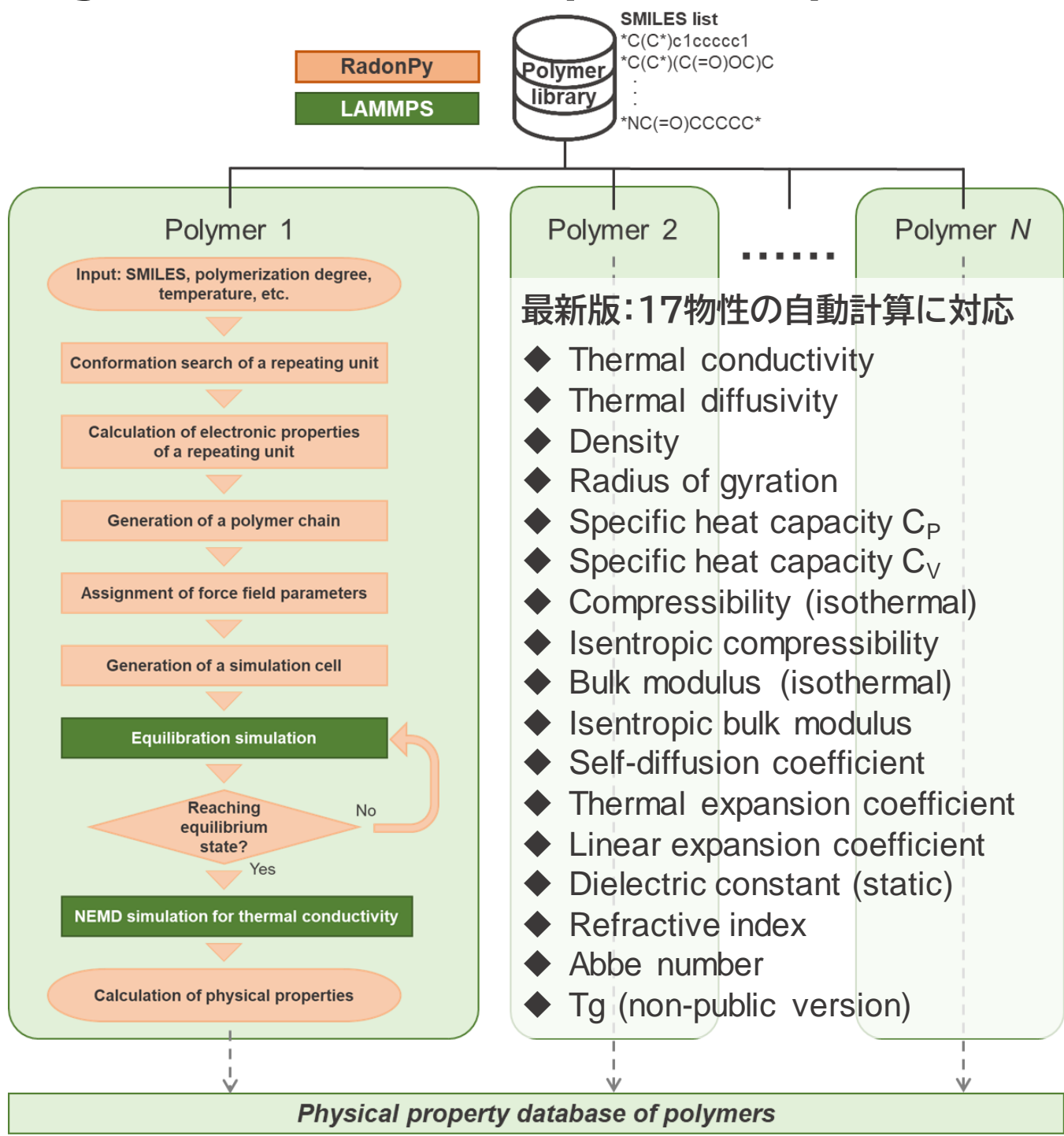
課題：高分子物性データの乏しさ、
MD自動計算の困難さ

分子動力学（MD）計算による 高分子物性自動計算システムRadonPyの開発

Y. Hayashi et. al., npj Comput. Mater. 8:222 (2022)
Source code: <https://github.com/RadonPy/RadonPy>

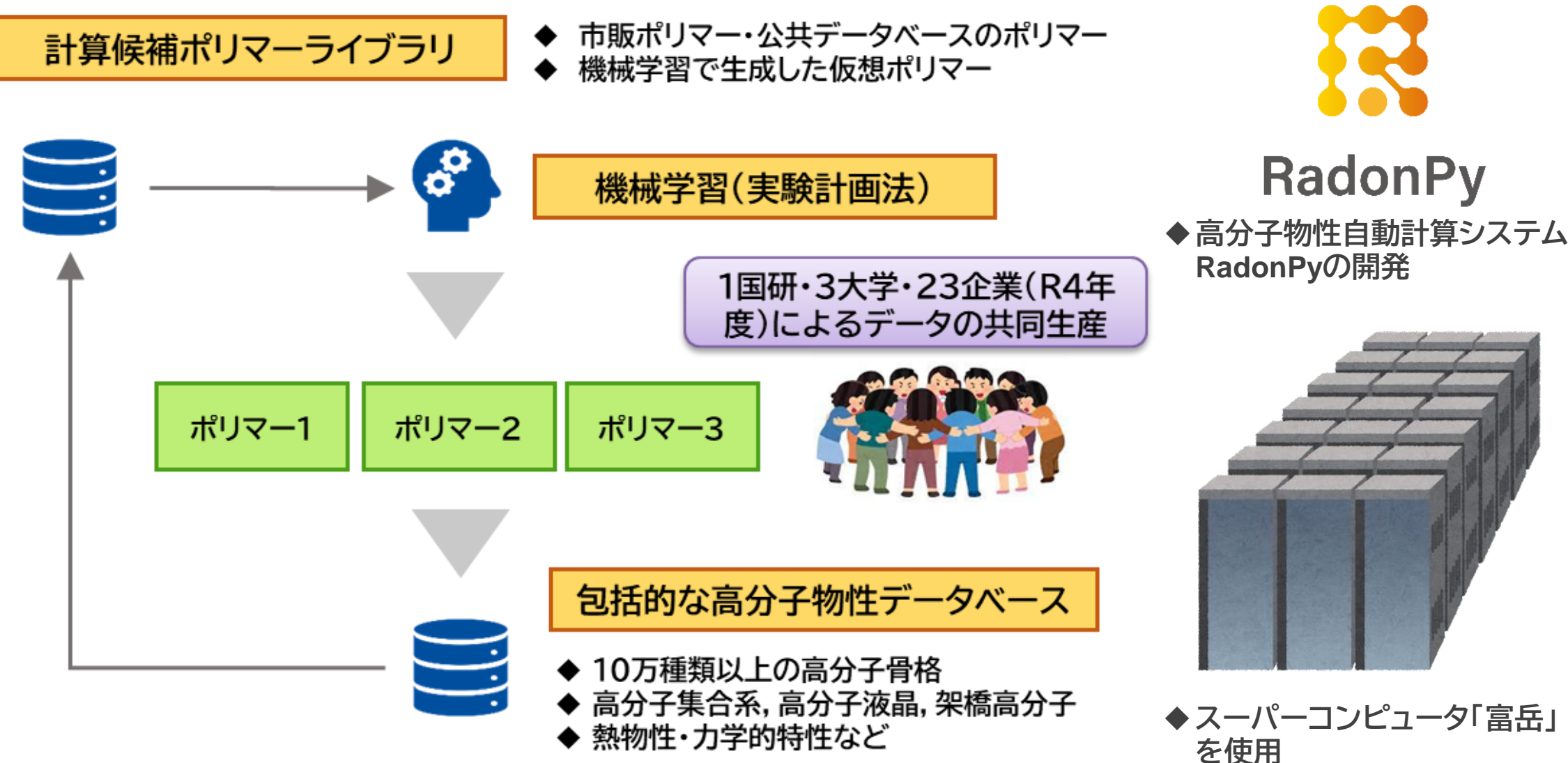


- ノウハウの多い高分子MD計算に必要な一連の工程を完全自動化
- オープンソースソフトウェアのみで構成（LAMMPS, Psi4, RDKit）
- 誰でも適切な物性計算ができるよう調整された計算プロトコルを実装（MD計算の民主化）
- 実験系研究者・他分野（データ科学等）研究者の参入によるオープンイノベーションの促進

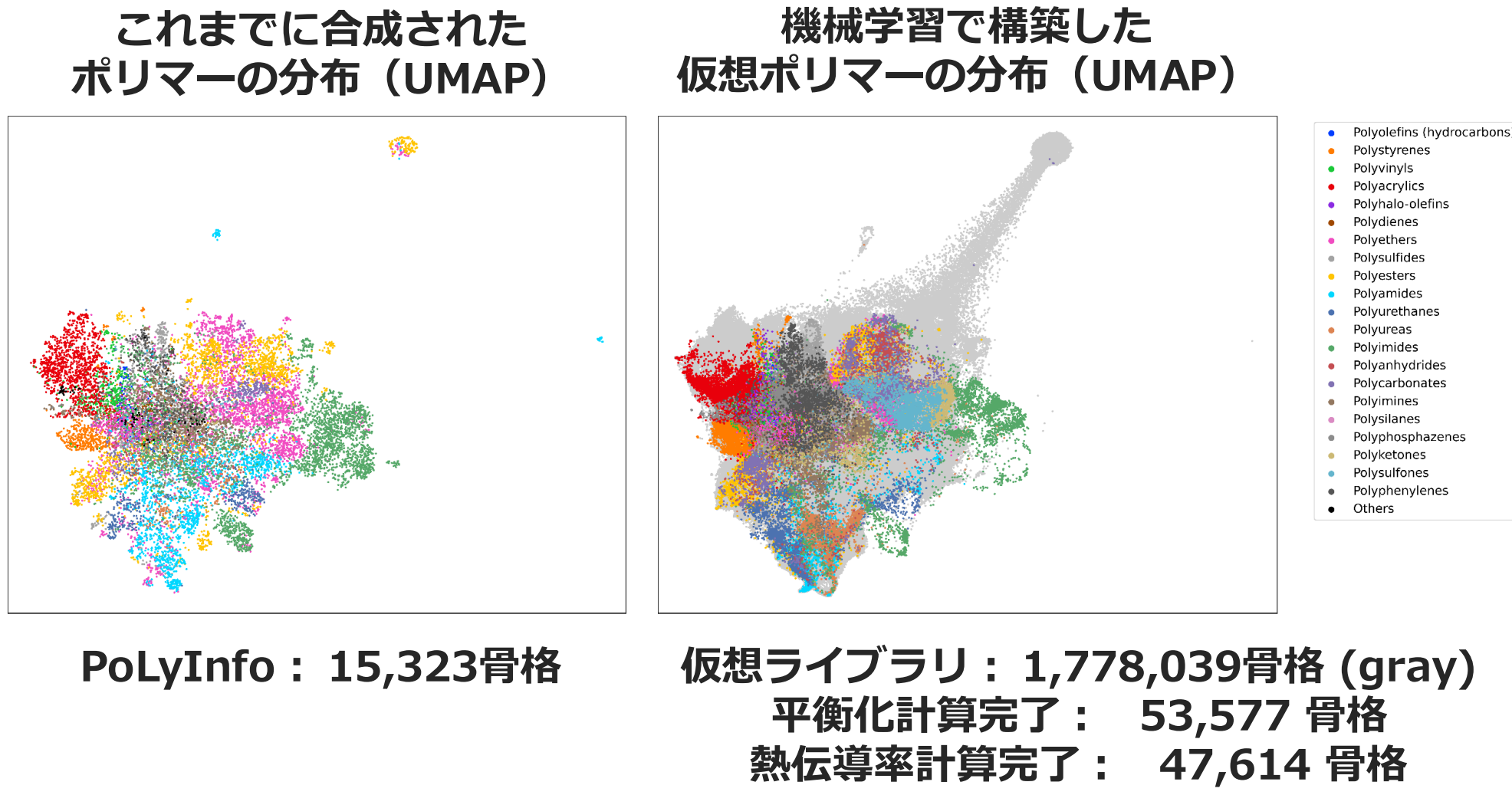


スパコン「富岳」を利用した10⁵-10⁷ポリマーの包含する 世界初の体系的な高分子物性データベースの創出

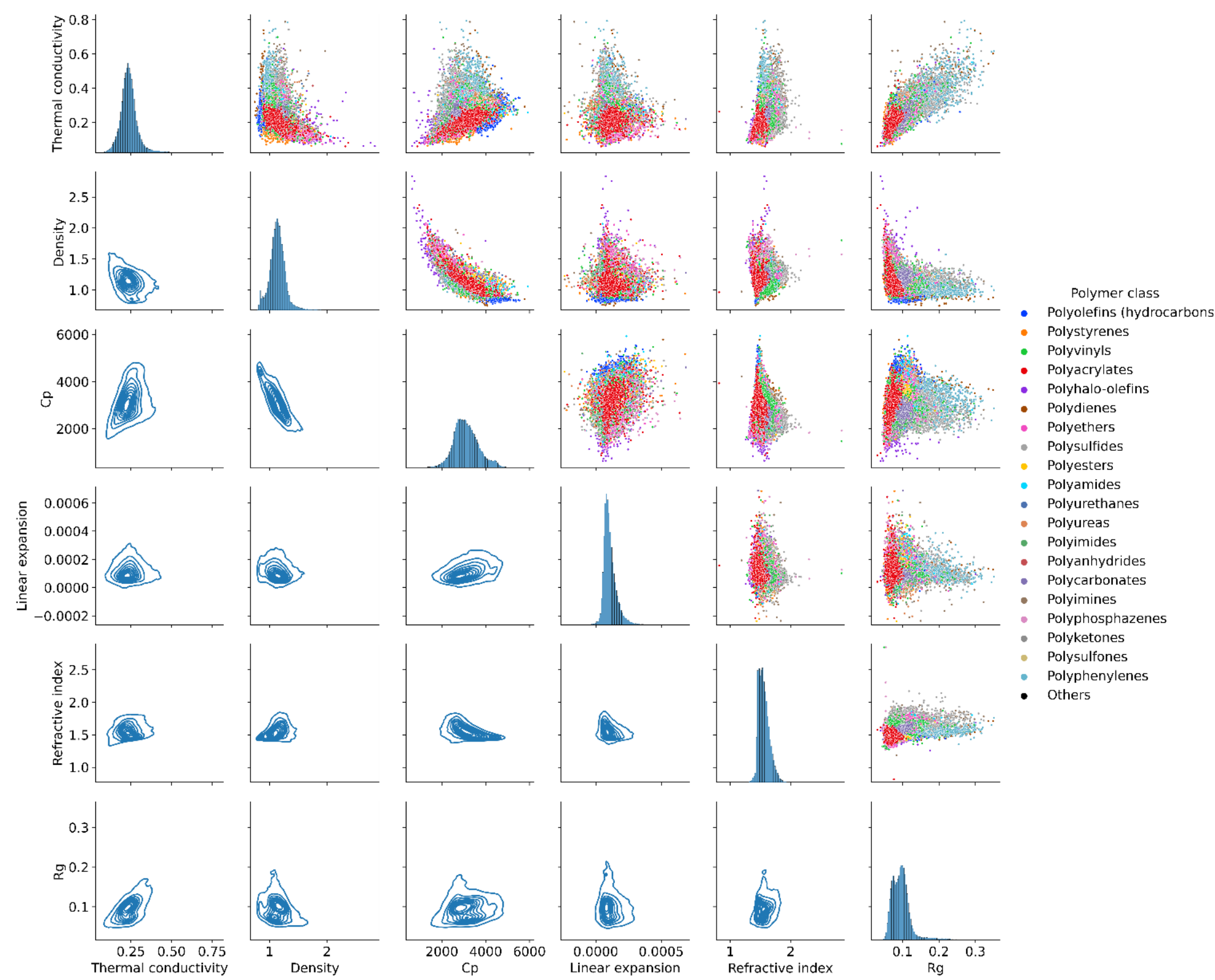
- 統数研・3大学・23企業が組織の垣根を越えてデータを共同生産・共有
- 「富岳」成果創出加速プログラム「データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出」（代表：吉田亮 教授）
- JST COI-NEXT「再生可能多糖類植物由来プラスチックによる資源循環社会共創拠点」『課題6:高分子インフォマティクス・機械学習』（課題6リーダー：林慶浩）



物性計算結果



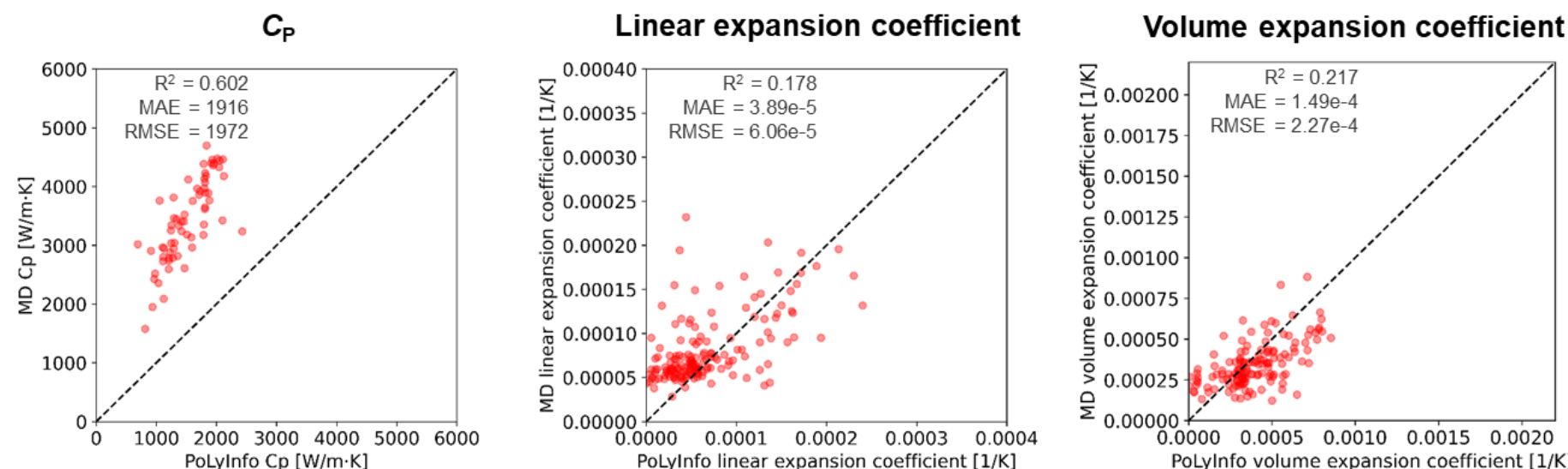
物性値の同時分布（47,377ポリマー）



計算値と実験値のギャップを埋める転移学習

- 転移学習: 関連する元ドメインの学習モデルやデータを目標ドメインに活用するための方法論
- MD計算値をソースタスクとし、PoLyInfoの文献データをターゲットタスクとして転移学習を実施
- 量子効果の有無に起因するCpの過大評価を補正
- 線膨張係数・体積膨張係数のばらつきを低減

(a) MD simulation



(b) Transfer learning

