

環境循環型社会の実現に向けたポリマーインフォマティクスデータの基盤構築

佐藤 正寛¹, 熊田 亜紀子¹, 鈴木 豊太郎², 田浦 健次朗², 河村 光晶³, 嶋川 肇¹, 森 勇貴¹, 片瀬 大祐¹, 十二 綱輝¹

1. 東京大学大学院工学系研究科, 2. 東京大学大学院情報理工学系研究科, 3. 東京大学情報基盤センター

研究背景

ポリマー

- ポリマー材料は生活インフラとしての役割や機能性ポリマーとしての役割も果たし我々の生活に浸透する欠かせない材料である
- 材料設計の自由度の高さが特徴であり環境循環型の社会を目指してさらなる高付加価値・環境調和性が求められる

マテリアルズインフォマティクス

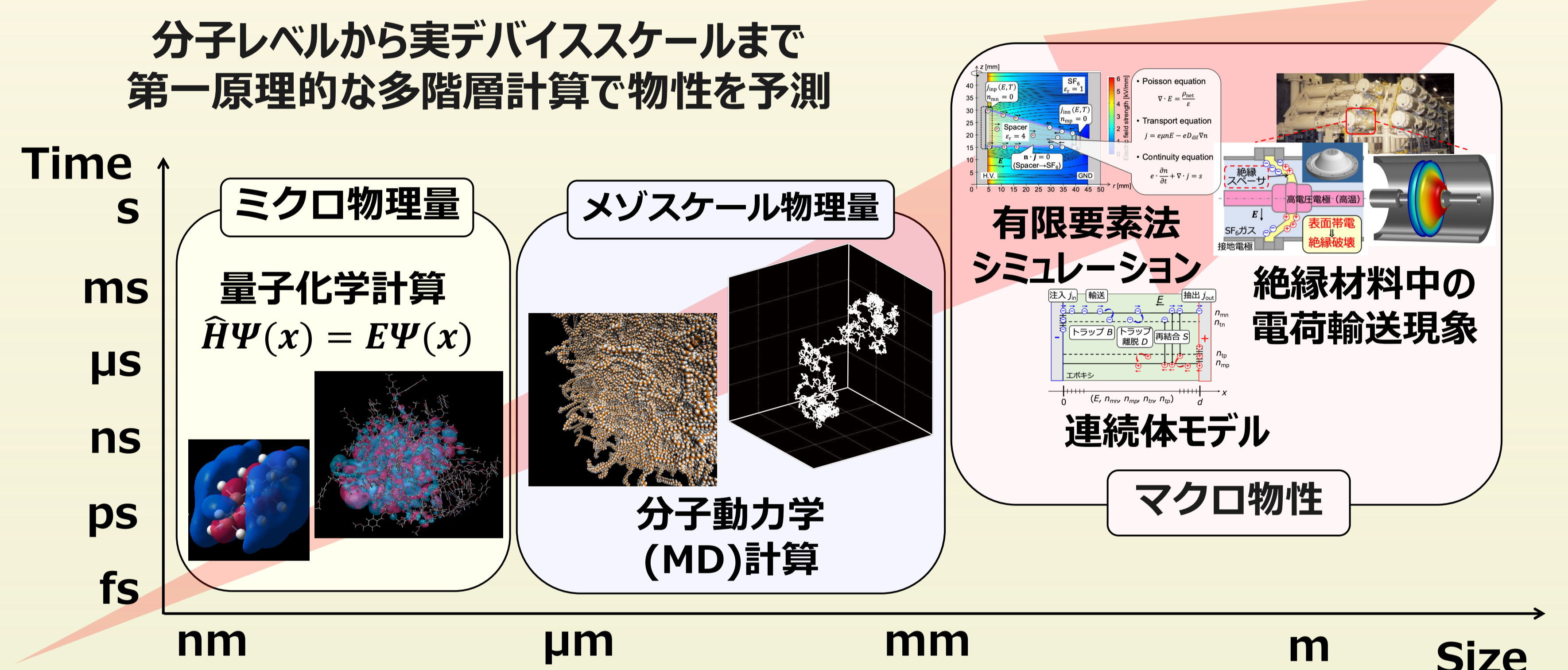
- 計算科学と情報処理技術を駆使したデータ駆動型の材料開発手法
- 「高自由度の材料設計における複合機能のコントロール」にも有効
→ ポリマー材料を対象とする「ポリマーインフォマティクス」が台頭
- 既存のAI技術にない材料科学にもとづいた特徴量設計・学習モデルが必要
- ポリマーの高自由度を特徴づけるうえで、計算科学のデータベースが未発達
→ ポリマー材料は役割の大きさに対し、開発推進のための環境整備が不十分

ポリマーインフォマティクスの基盤技術

- ポリマーの分子構造からマイクロ・メソスケールを経由してマクロ物性に至るまでの過程を定量的に評価

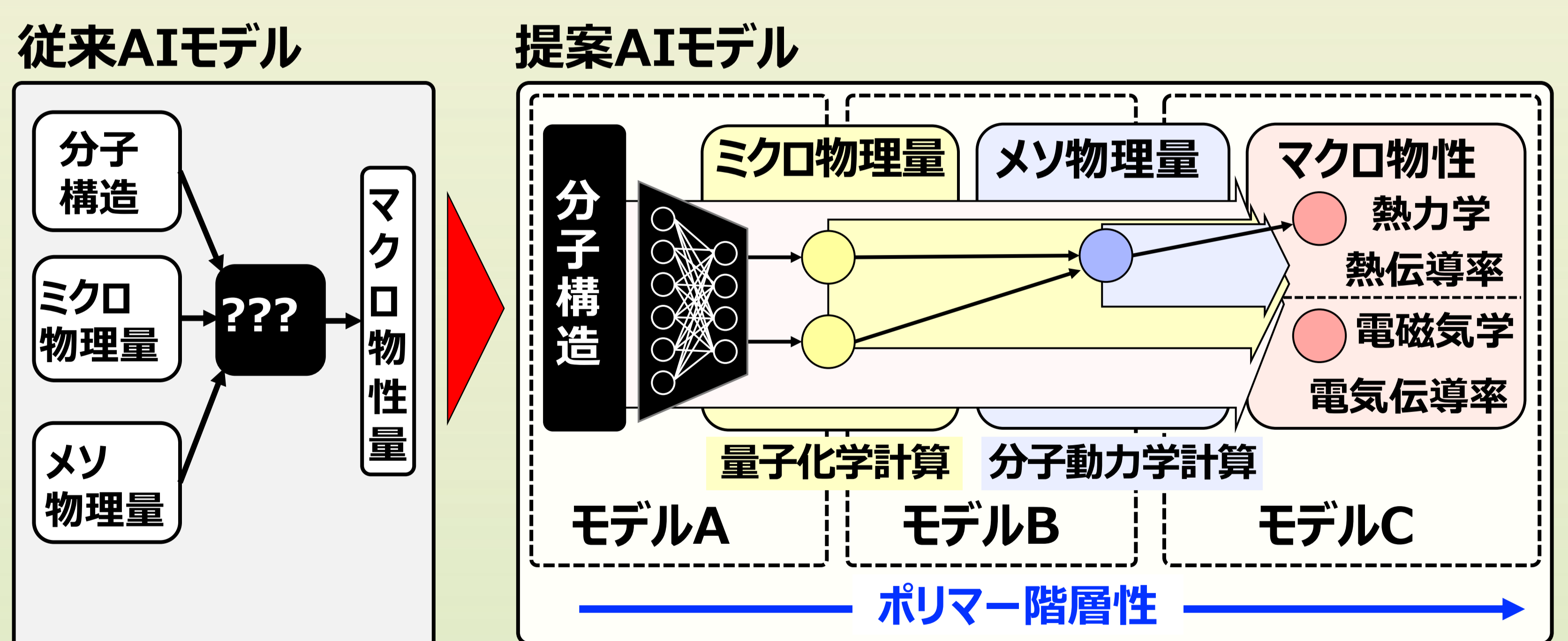
大規模情報基盤の必要性

- ポリマーの多階層性を考慮した計算を網羅的に行うためには大規模な計算資源が必要
- 計算科学の新たなデータベースを構築しデータ利活用を促す基盤が必要



ポリマー物理量推算のAIモデル構築

- ポリマーの多階層性を考慮し各スケールでの計算科学データを支配因子とする多段型のAIモデルを構築
- 各スケールの物理量の間にある相関関係を明示的に抽出することで、ブラックボックス化することなく、“外挿可能な(説明可能な)” AIモデルを実現



計算結果およびAIモデルのデータベース化

- 各種計算結果をmdx上に収集し検索・利用するためのデータベースを作成
- 物理量推算用AIモデルのハイパーパラメータや評価結果も共有が可能

