

次世代計算科学グランドリーチプログラム 区分A 採択課題

# 高分子材料科学を変革する次世代AI計算基盤

吉田 亮

yoshidar@ism.ac.jp

統計数理研究所


マテリアルズインフォマティクス研究推進センター

理化学研究所 TRIP AGIS

材料・物性分野モデル開発プロジェクト  
ポリマーオミクスチーム

# 計算・実世界横断型高分子材料データベース創出

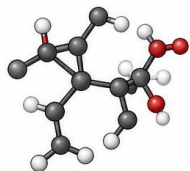
AI for Materials Scienceにおけるイノベーション実現の必要条件：体系的・包括的な学習データの創出

 **高分子材料 MDシミュレーション全自動化ソフトウェア**  
RadonPy Hayashi et al., RadonPy: automated physical property calculation using all-atom classical molecular dynamics simulations for polymer informatics. *npj Comput Mater* 8, 222 (2022).

- 62 物性の自動評価ワークフローを実装
- ホモポリマー, 共重合体, 架橋高分子, 高分子溶液など
- アモルファス, 延伸配向, 交流電場, 温度勾配, 温度・圧力など

スケール横断シミュレーション基盤・GPU / AI-ready対応

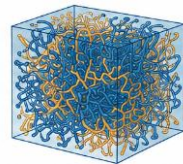
全原子分子動力学



粗視化分子動力学



メソスケール  
シミュレーション



世界最大規模の実世界データベース



Akiyama S

- Chemspeed + インライン計測
- 140 並列合成
- $\sim 10^4$ - $10^5$  データ / 年



Fujii M

- フローj自動合成 + インライン計測
- プロセスデータベース
- $\sim 10^4$  データ / 年

- NIMS 内藤昌信：共重合体高分子, 力学物性
- 東大 塩見淳一郎：複合材料, 熱放射塗膜
- 東京科学大 森川淳子：低誘電・高排熱高分子
- 理研 TRIP：市販ポリマーベンチマークデータセット
- 文献データ自動構造化 LLM



世界初の計算・実世界横断型高分子材料データベース PolyOmics+

Yoshida and Hayashi et al., Omics-scale polymer computational database transferable to real-world artificial intelligence applications. *arXiv*:2511.11626 (2025).

# 高分子材料科学 AI 基盤モデル創出

- AI for Materials Science や Physical AI の国内外動向と合流し、学習データのさらなる拡大を図る。
- 世界最大規模のマルチモーダルデータで学習されたAI基盤モデル（オープンな国産科学研究用 LLM）
- AI for Materials Science & Industry の中核的技術に

AI for Science 国内外動向と合流  
LLM/VLM-ready データ

マルチエージェントシステム  
オーケストレーション

世界最大規模の高分子材料データベース



学术论文



科学知識・ルール・ラボノート



高分子材料 LLM



仮説生成・研究計画立案



情報収集・要約



データ解析・予測・推論



シミュレーション



実験指示・最適化・実行



レポート作成