

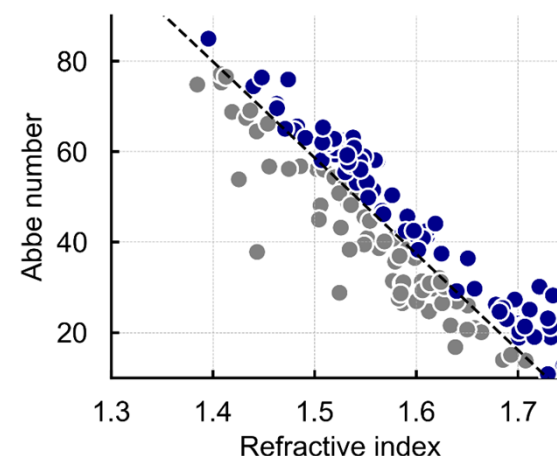
データ駆動型高分子材料研究における統計的機械学習と分子シミュレーションの融合

総合研究大学院大学 複合科学研究科 統計科学専攻 南條 舜

- **目的** データ駆動型高分子材料研究における問題点を乗り越えるための方法論の実証
- **内容** 実験計画法と高分子物性自動計算の融合技術を実装し、一例として高屈折率・高アッベ数高分子を探索
- **結果** 実験データが殆ど存在しない**未踏領域に存在する高分子の候補を複数発掘**

文献 1 の図 1

屈折率とアッベ数の間には経験的な限界線が存在



実験計画法と高分子物性自動計算の融合により
収集された高分子の物性計算結果

- ・ 利用した計算機 SQUID 汎用 CPU ノード群 (15,000 ノード時間)
- ・ 利用したソフトウェア RadonPy^[2]

[1] Ando S. (2015). Control of Refractive Indices of Optical Polymers : Theoretical Prediction and Molecular Design Method . *Japanese journal of optics*, 44(8), 298-303.

[2] Hayashi, Y., Shiomi, J., Morikawa, J., & Yoshida, R. (2022). RadonPy: automated physical property calculation using all-atom classical molecular dynamics simulations for polymer informatics. *npj Computational Materials*, 8(1), 222.