

# 戦略的テーマ 1. エネルギー・環境問題解決に向けた 高分子シミュレーション・データサイエンスの技術的課題と展望

セッションオーガナイザー  
(東北大学理学研究科) 村島 隆浩  
E-mail: murasima@tohoku.ac.jp

## <趣旨>

持続可能な社会の実現に向け、高分子材料への期待はかつてないほど高まっている。次世代電池の電解質膜、燃料電池用イオン交換膜、太陽電池封止材、CO<sub>2</sub>分離膜、バイオマスプラスチックなど、エネルギー・環境分野における高分子材料の重要性は増す一方である。これらの材料開発を加速するためには、従来の試行錯誤的なアプローチに加え、シミュレーション技術とデータサイエンスの有機的な活用が不可欠となっている。

しかしながら、高分子特有の技術的困難が実用的な材料設計への適用を依然として阻んでいるのが現状である。原子スケールから高分子鎖、さらにマクロな物性までをつなぐマルチスケールシミュレーションの接続性、高分子の長い緩和時間に起因する計算コストの増大、スモールデータ環境下での機械学習モデル構築、そしてプロセス条件-構造-物性の複雑な非線形相関の解明など、解決すべき課題は山積している。これらの課題は個々の研究者や分野内で認識されつつも、専門家の中で十分に共有され、解決に向けた集中的な議論がなされているとは言い難い。

したがって、本特定テーマでは、高分子シミュレーションおよびデータサイエンスを専門とする研究者が一堂に会し、エネルギー・環境問題への応用を見据えた際に直面する「技術的困難性」を共有し、その解決への道筋を探ることを目的とします。物理モデルに基づくシミュレーションの高度化から、インフォマティクスによるデータ駆動型アプローチ、さらには実験との融合に至るまで、多角的な視点から新規な高機能材料の創製と開発加速につながる討論を行いたいと考えています。

是非、この分野で活発な研究を展開されている貴方に、次のような特定テーマ分野で研究成果を発表し、高分子 DX の未来を拓く討論に参加していただきますようお願い申し上げます。

## <研究分野>

- 1-1. マルチスケールシミュレーションと粗視化モデルの高度化
- 1-2. 緩和・転移・結晶化挙動に向けた長時間シミュレーション
- 1-3. スモールデータ解析・不確実性評価と Physics-informed 機械学習
- 1-4. プロセス-構造-物性相関の解明と実験融合による材料設計

## <英訳 (テーマ名および研究分野) >

1: Technical Prospects of Polymer Simulation and Data Science for Solving Energy and Environmental Problems

1-1) Advancement of multiscale simulations and coarse-grained models

1-2) Long-time simulations for relaxation, transition, and crystallization behaviors

1-3) Small data analysis, uncertainty quantification, and Physics-informed machine learning

1-4) Material design via process-structure-property analysis and fusion with experiments