

戦略的テーマ 2. 高分子科学と AI の融合：データ駆動型研究による材料科学の新たな研究パラダイム

セッションオーガナイザー

(アルプスアルパイン(株)・東北大学工学研究科つながる価値共創研究所) 谷口 義尚
E-mail: yoshinao.taniguchi@alpsalpine.com

<趣旨>

本戦略的テーマは「高分子科学と AI の融合」を中心に据え置き、材料科学全体におけるデータ駆動型アプローチの発展を見据えた議論を行うことを目的としています。

近年、人工知能 (AI) およびマテリアルズ・インフォマティクス (MI) の進展により、膨大な実験データ、計算機シミュレーション結果、画像/スペクトル情報などを統合的に解析するデータ駆動型研究が現実味を帯びています。AI・MI を活用したデータ駆動型研究により、従来は研究者の経験や試行錯誤に大きく依存していた材料開発を、より合理的かつ効率的に進めることが可能になってきました。

一方で、高分子材料は分子構造、分子量分布、高次構造、集合状態などの多階層要因が複雑に絡み合う系であり、AI の有効活用には、手法の導入にとどまらず、高分子化学・物性物理に基づくドメイン知識との適切な融合が不可欠です。本テーマでは、AI・機械学習の基礎、シミュレーションとの連携、実験自動化やハイスループット実験、データ基盤整備、生成モデルや自律実験、そして産学連携による実装を一体として捉え、高分子研究の新たな研究パラダイムを議論する場とします。

本テーマは、基礎から応用、最先端技術から産業展開まで多様な段階を包含し、AI の初学者から中堅・上級の研究者、企業の技術者まで、幅広い立場の参加者が相互に学び合える構成を目指します。特に、次世代を担う若手研究者による先進的・萌芽的な成果の共有に加え、長年にわたり高分子科学や材料研究を牽引してこられた熟達研究者の知見や経験を交えた議論を通じ、「高分子科学 × AI」の融合が新たな研究テーマの創出へとつながることを期待します。

本テーマの趣旨にご関心をお持ちの皆様による、関連研究の発表および活発な討論を広く歓迎いたします。

<研究分野>

- 2-1. 高分子科学における人工知能の基礎理論・手法
- 2-2. データ駆動型アプローチによる高分子材料設計、物性予測、解析
- 2-3. AI 支援による物性予測・構造解析、産業応用および社会実装

<英訳 (テーマ名および研究分野) >

2: Fusion of Polymer Science and Artificial Intelligence: A New Research Paradigm Enabled by Data-Driven Approaches

2-1) Fundamental theories and methodologies of artificial intelligence in polymer science

2-2) Data-driven approaches for polymer materials design, property prediction, and analysis

2-3) AI-assisted property prediction and structural analysis, industrial applications, and societal implementation