

戦略的テーマ 4. 高分子科学におけるシミュレーションとデータサイエンスの最前線

セッションオーガナイザー
(JSOL) 小沢 拓
E-mail: ozawa.taku@jsol.co.jp

<趣旨>

材料及び生命科学の分野において高分子は重要な役割を担っており、その振る舞いや特性を評価、理解するために様々なシミュレーションやデータサイエンスの手法が開発され、多くの対象に適用されてきました。

高分子が形成する多階層（マルチスケール）構造を扱うには、それぞれのスケールに適したシミュレーションモデルを用いることはもちろん、スケール間の連携が必要になることもあり、多くの議論と研究がなされています。一方で、シミュレーション技術を用いたアプローチだけでは、モデリングの手間や計算時間が課題となり、特に産業界では CAE などの他分野と比べて普及の妨げとなっていた面もあります。そのような中、帰納的なアプローチであるデータサイエンスの手法が期待を集め、マテリアルズ・インフォマティクスなどのキーワードで適用が進められており、データ不足などの課題はありつつも、近年成果が共有されてきています。これらの技術を融合させる研究も進められており、シミュレーション結果の解析や高速化、高精度化のためにデータサイエンス技術が用いられることもありますし、データサイエンス側の視点でもシミュレーション技術の活用が重要となっています。

いずれの技術においても、高分子の分野ではマルチスケール特性や成形プロセスの影響も重要になることから難易度が高く、今まで高分子科学の分野で培ってきた知識を避けて通ることはできません。また、これらの技術の実用課題への適用は言うまでもなく重要ですが、一方で基礎研究分野への適用によっても普遍的な理解につながり、さらに応用分野に派生していくことが期待されます。

このような状況の中、本テーマでは「高分子科学におけるシミュレーションとデータサイエンスの最前線」と題して、産業応用として重要な課題から、物性と理論をつなぐ高分子科学の基礎研究としての課題まで、広く発表を募集します。幅広い分野に関わる研究者が会して、この分野の今後の展開につながる討論をしたいと考えています。是非、下記の分野で研究に取り組まれている皆様に、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>

- 4-1. 高分子科学のためのマルチスケール・シミュレーション
- 4-2. 高分子科学のためのデータサイエンス
- 4-3. 高分子科学のためのシミュレーションとデータサイエンスの連携
- 4-4. 高分子科学のための高速・大規模シミュレーション