

令和4年度高性能汎用計算機高度利用事業

「富岳」成果創出加速プログラム

「データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出」

成果報告書

令和5年5月30日

大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構

吉田 亮

## 目次

1. 補助事業の目的.....	- 1 -
2. 令和4年度（報告年度）の実施内容.....	- 1 -
2-1. 当該年度（令和4年度）の事業実施計画.....	- 1 -
2-2. 実施内容（成果）.....	- 2 -
2-3. 活動（研究会の活動等）.....	- 8 -
2-4. 実施体制.....	- 9 -

## 補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム

データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出

### 1. 補助事業の目的

高分子物性自動計算システム RadonPy を用いて、データ駆動型材料研究に資する包括的な高分子物性データベースを構築する。

### 2. 令和4年度（報告年度）の実施内容

#### 2-1. 当該年度（令和4年度）の事業実施計画

##### (1) 「データ駆動型材料研究に資する体系的な高分子物性データベースの開発」

初年度の令和3年度にRadonPyの「富岳」への移植とチューニングが完了した。また、RadonPyによる計算物性と実験値の間の系統的な評価実験を実施し、アモルファスポリマー15物性の自動計算における計算条件・パラメータ設定を決定した。本年度はこの標準プリセットを用いて、データ生産を本格的に始動する。また、下記実施項目(2)において対象物性や系の拡張が完了した時点で、順次拡張プログラムをデータ生産プロセスに投入していく。さらに、適応的実験計画のアルゴリズムをデータ生産システムに導入することで、データベース構築に向けたワークフロー全体の効率化を図る。

##### (2) 「高分子物性自動計算ソフトウェアRadonPyの開発」

計算対象の物性（ガラス転移温度、溶媒和自由エネルギー、レオロジー物性など）とポリマー構造（熱硬化樹脂、1軸延伸配向ポリマー、結晶性高分子、高分子溶液など）を拡張しながら、順次RadonPyへの実装を進めていく。

##### (3) 「マテリアルズインフォマティクス基盤技術の創出とデータ駆動型材料研究の推進」

実施項目(2)で開発した高分子物性自動計算ソフトウェアと分子設計のための機械学習アルゴリズム（確率的分子生成モデル、ベイズ推論に基づく逆解析、適応的実験計画法など）を統合し、サイバー空間上で高分子材料設計を完全に自動化する仮想実験系を構築・実装する。また、高熱伝導高分子液晶の材料創製など、本研究で開発した計算技術の実証研究を推進する。

##### (4) 「プロジェクトの総合的推進」

本研究は、複数の国研・大学・企業が参画するコンソーシアム型の共同事業により推進される。このような大規模なプロジェクトを円滑に進めていくために、定期的に運営会議とテクニカルミーティングを開催し、参画機関の間で意見交換と情報交換を行っていく。また、論文発表・学会発表やホームページでの情報公開を通じて、プロジェクトの研究成果を積極的に発信していく。さらに、年度内に本プロジェクトの成果発表と情報発信を目的とする成果報告会を開催する。

## 2-2. 実施内容（成果）

本研究では、高分子物性全自動計算ソフトウェアRadonPyと「富岳」を用いて世界最大級の高分子物性データベースを開発し、データ駆動型高分子材料研究に資する体系的且つ包括的なデータプラットフォーム及び機械学習の基盤技術を整備する。

### (1) 「データ駆動型材料研究に資する体系的な高分子物性データベースの開発」

RadonPy は、全原子古典分子動力学（以下、MD: molecular dynamics）シミュレーションによる高分子物性計算を全自動化する世界初の Python オープンソースソフトウェアである（Hayashi et al., npj Comput Mater 8, 222 (2022)）。高分子の繰り返し単位の化学構造、重合度、温度等の計算条件を入力とし、ポリマー鎖の生成、電荷計算、平衡・非平衡 MD 計算、ポストプロセス段階での物性計算等、MD 計算の全工程を完全に自動実行する（図 1）。

公開した第1版には、熱物性、機械特性、光学特性を含む 15 種類の物性の自動計算アルゴリズムが実装されている。本事業では、「富岳」の大量のノードを用いて多数のポリマーの物性計算を並列に実行し、最終的に 10 万種類以上の分子骨格を包含するオープンデータベースを構築する。令和4年度は、8,451,067 ノード時間を使用して 47,614 個のアモルファスポリマーの 15 種類の物性の計算を実施した（熱伝導率以外の物性については、53,577 ポリマーの計算が完了）。ポリマー数の単純換算では、本データベースの規模は世界最大となる。

図 2 に示すように、データ生産の過程で大量のポリマーの複数物性の同時分布が鮮明に観測された。その結果、複数物性のトレードオフが形成するパレートフロンティアの位置とパレート解を構成するポリマー群の構造的特徴に関する体系的な知見が得られた。現在の計測・合成の実験技術では、このようなスケールで物性・物質空間を網羅的に観測することは不可能である。

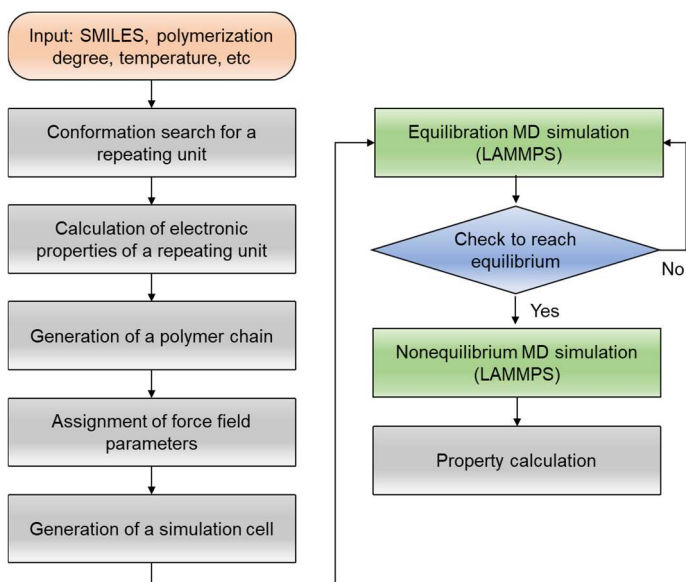


図 1: RadonPy のワークフロー

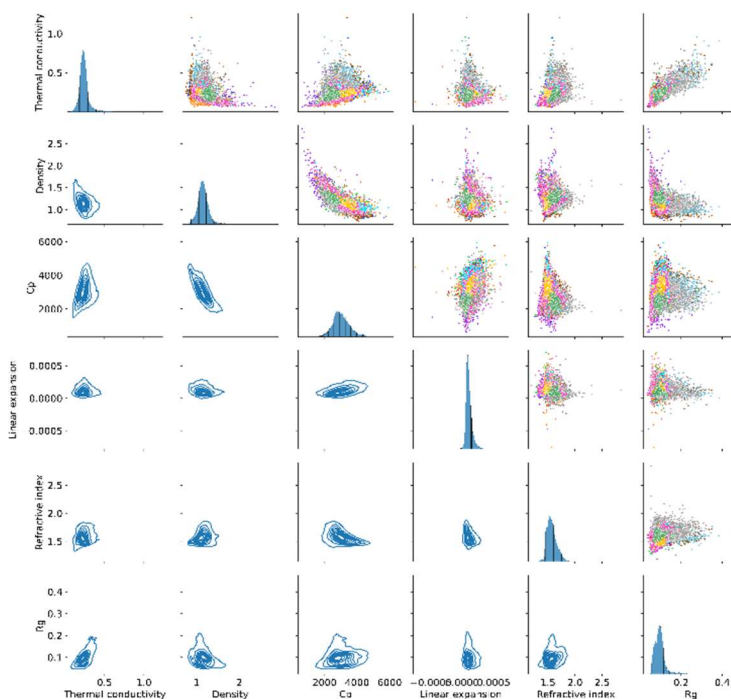


図 2: 様々な物性の同時分布とパレートフロンティア

熱伝導率のハイスループット計算では、プレートフロンティアを超える特異的なポリマーが同定された。通常のアモルファスポリマーの熱伝導率は高くても 0.2-0.3 W/mK ほどであることが知られているが、計算されたポリマーの一部に熱伝導率が 0.5 W/mK を超えるようなものが含まれていた (図 3)。これらのポリマーの構造的特徴を解析した結果、分子骨格の剛直性、水素結合可能なユニットが高密度で存在すること、水素結合や dipole-dipole 相互作用を介したメカニズムがアモルファスポリマーの高熱伝導化を実現していることが明らかになった (Hayashi et al., npj Comput Mater 8, 222 (2022))。

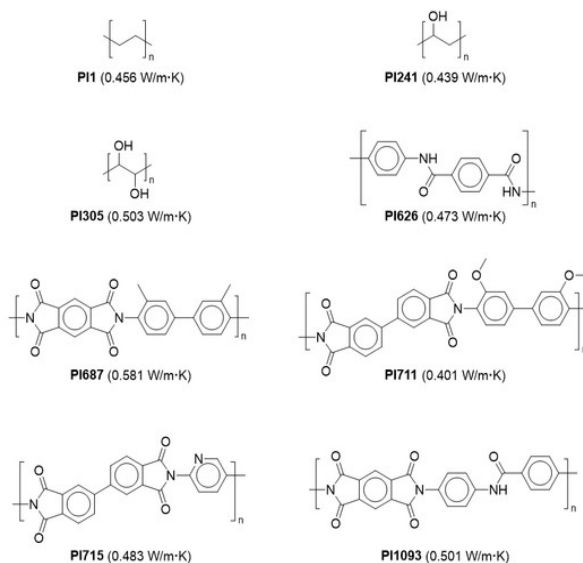


図 3: 熱伝導率が 0.5 W / (m · K) を超えるアモルファスポリマーが存在するという予想

また、生分解性ポリマーや熱硬化性樹脂、低分子化合物など、特定の応用領域を対象とした体系的なデータセットを構築するために、プロジェクト内いくつかのワーキンググループを設置した。生分解性ポリマーについては、本プロジェクト参画者の一部が JST COI-NEXT「再生可能多糖類植物由来プラスチックによる資源循環社会共創拠点」(代表機関 金沢大学) に参画し、再生可能バイオプラスチック製品に資する新材料の探索を推進する体制を構築した。

また、令和 4 年度に新たに開発したガラス転移温度とアッペ数の自動計算プログラムを令和 5 年度以降のデータ生産プロセスに投入するために、計算条件の評価・検討を実施した。

## (2) 「高分子物性自動計算ソフトウェア RadonPy の開発」

令和 4 年度は 15 種類 (非公開版には 17 物性の自動計算アルゴリズムを実装) の物性の自動計算を実装した RadonPy の第 1 版を公開し、論文を発表した。計算可能な系は、線状ポリマーのアモルファス状態、共重合体ポリマー、高分子溶液、1 軸延伸配向したポリマー等を含む (一部は現時点で非公開)。

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

**ソフトウェア** GitHub: <https://github.com/RadonPy/RadonPy>

### プレスリリース

- ・ **国内** 「全原子古典分子動力学法による高分子物性計算を全自動化する ソフトウェア RadonPy をリリース ～高分子材料物性大地図の作成に向けた第一歩～」 <https://www.ism.ac.jp/ura/press/ISM2022-08.html>
- ・ **海外** (EurekaAlert!) ”Automated simulation software creates a world map of polymer properties” <https://www.eurekaalert.org/news-releases/975212>

この成果は、日経新聞・日経産業新聞やウェブニュース（国内7件、海外7件）などの多くのメディアで取り上げられた。また、上記論文は、Nature グループの Online Attention スコア（論文の注目度を表す指標）において、同時期に出版された全論文中のトップ4%にランクインしている。

令和4年度は、ガラス転移温度とアッペ数の自動計算機能の実装が完了した。他にも、誘電特性、溶媒和自由エネルギー、レオロジー物性、架橋ポリマーや配向構造の自動計算プログラムの開発が進んでおり、実装・検証が完了次第、順次 RadonPy を更新していく予定である。

RadonPy には、多数の煩雑な手続きからなる MD 計算の全工程を自動化し、パイプラインを簡便に構築するための諸機能が実装されている。また RadonPy には、様々な骨格の高分子材料に適用可能な検証済みパラメータセットと計算条件（プリセット）が標準搭載されている。プリセ

ットの設定では、物質・材料研究機構の協力を得て PoLyInfo の実験データをベンチマークとして使用した。重合度等の計算条件や分子骨格の種類が計算値に与える影響、物性毎の予測精度や性能限界を徹底的に調べ、論文で報告した。このようなスケールで高分子物性 MD 計算の性能が系統的に検証された事例はほとんどない。

さらに、転移学習という機械学習の手法を用いて、計算物性の系統バイアスやばらつきを補正した（図4）。様々な高分子材料に対して普遍的に適用できる計算条件は存在しない。したがって、全自動計算で大量生産されるデータには、必ずバイアスとばらつきが生じる。また、実験条件や試料に関する非観測因子や計測系の特性により、実験値にもバイアスとばらつきが生じる。このような複雑な現実系と不完全な計算モデルの間のギャップを機械学習で埋められることが実証された。

また、本プロジェクトにおける最も大きな懸念材料であった電荷・分極率の計算モジュール（量子化学計算ソフトウェア Phi4）の富岳上での性能を大幅に改善することができた。Phi4 の A64FX での実行性能が x86 系に比べて大幅に低下していたため、令和4年度までは計算対象ポリマーの電荷計算を外部のスパコン（自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター NEC LX 2U-Twin2 サーバ 406Rh-2）で実行していたが、この問題が解消されたことで、令和5年度以降はデータ生産の効率が大幅に向上することが予想される。また、LAMMPS の実行性能も A64FX では x86 系に比べて4倍ほど低下していたが、RIST の協力の下でこの点についても性能が大幅に改善した。

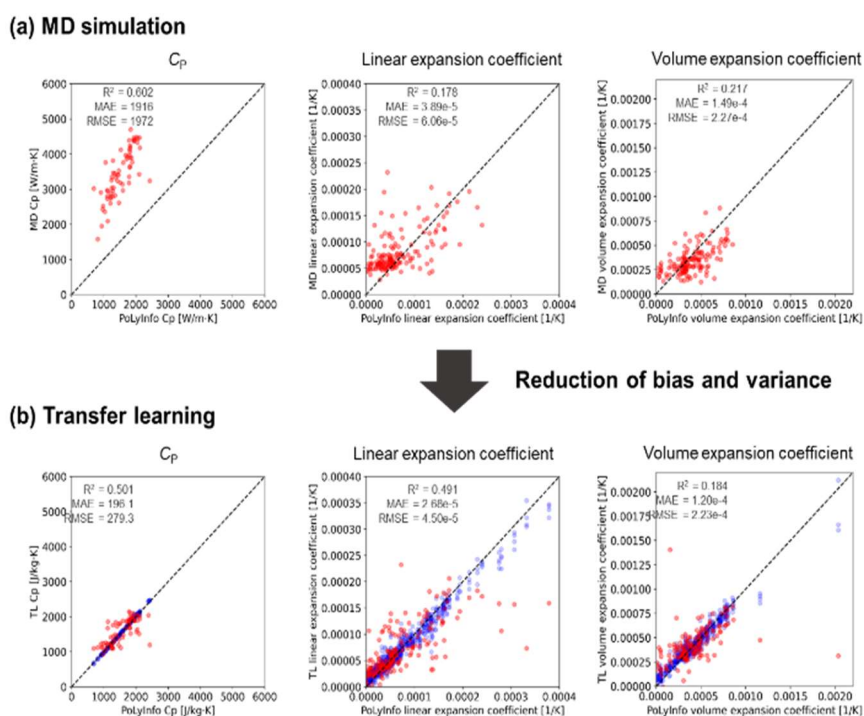


図4: 転移学習で実験値・MD 計算物性間の乖離を補正

### (3) 「マテリアルズインフォマティクス基盤技術の創出とデータ駆動型材料研究の推進」

以下の7項目 (A-G) を実施した。

#### A. ポリマー重合反応ルールを実装した仮想ライブラリ生成器

ポリマー合成において一般的に適用される22種類の重合反応ルールを実装した仮想ポリマー生成ソフトウェア SMiPoly とプレプリントを公開した。

**論文** Ohno, M., Hayashi, Y., Zhang, Q., Kaneko, Y., Yoshida, R., SMiPoly: generation of synthesizable polymer virtual library using rule-based polymerization reactions. ChemRxiv (2023). DOI: 10.26434/chemrxiv-2023-w54wn

**ソフトウェア** GitHub: <https://github.com/PEJpOhno/SMiPoly>

SMiPoly は、モノマー候補の有機低分子が与えられると、適用可能な重合反応ルールを用いて合成可能なポリマーを網羅的に生成する。例えば、購入可能な1,083種類のモノマーを用いることで、7種類のポリマータイプ (ポリオレフィン、ポリエステル、ポリエーテル、ポリアミド、ポリイミド、ポリウレタン、ポリオキサゾリドンの) からなる169,347種類のポリマーを作成できる。生成されたポリマーの分布を、これまでに合成された約16,000種類のポリマーと比較したところ、SMiPoly で生成されたポリマーのカバー率は48%、新規性は53%に達することが分かった。

#### B. 機能性分子と合成経路を同時に設計する機械学習アルゴリズム

**論文** Zhang Q, Liu C, Wu S, Yoshida R. Bayesian sequential stacking algorithm for concurrently designing molecules and synthetic reaction networks. ChemRxiv. (2022). DOI: 10.26434/chemrxiv-2022-5qp9

**ソースコード** GitHub: <https://github.com/qi-zh/Seq-Stack-Reaction>

設計変数は、反応ネットワークにおける反応物のセットとそのネットワークトポロジーからなる。設計空間は、購入可能な反応物質のすべての組み合わせからなるため非常に大きく、数百万以上のオーダーとなることもありえる。また、設計された反応ネットワークは、単純な多段階の直線的な反応経路にとどまらず、あらゆるトポロジーをとりうる。この組合せ問題を解決するために、単一ステップの反応を逐次的に積み上げて合成反応ネットワークを再帰的に設計する逐次モンテカルロアルゴリズムを開発した。本論文は、同掲載誌の Editor's choice に選定されて、プレスリリースが行われた。

#### プレスリリース

**国内** 最先端材料科学研究：機械学習による分子設計と反応経路の同時発見 人工知能で化学イノベーションにおける2つの重要課題を同時に解決

<https://kyodonewsprwire.jp/release/202305225775>

**海外** Machine intelligence for designing molecules and reaction pathways

<https://www.asiaresearchnews.com/content/machine-intelligence-designing-molecules-and-reaction-pathways>

#### C. 関係出力変数を予測する機械学習アルゴリズム

**論文** Iwayama, M., Wu, S., Liu, C., Yoshida, R., Functional output regression for machine learning in materials science. Journal Chemical Information and Modeling 62, 4837–4851 (2022). DOI: 10.1021/acs.jcim.2c00626

**ソースコード** GitHub: [https://github.com/yoshida-lab/XenonPy/blob/master/samples/kernel\\_neural\\_network.ipynb](https://github.com/yoshida-lab/XenonPy/blob/master/samples/kernel_neural_network.ipynb)

材料科学の教師あり学習では、分子の光吸収スペクトルや物性の温度依存性曲線、材料組織の電子顕微

鏡画像のように出力変数が超高次元で且つ学習に利用できるデータの量が限られているケースが多い。一方、このような少数データに基づく多次元出力変数の教師あり学習を対象とした体系的な研究はほとんど存在しない。本研究では、材料データを主な適用対象として、敵対的生成学習モデルと関数型出力変数のカーネル回帰に基づく多次元出力変数の予測手法を開発した。

#### D. アフィン転移学習

期待 $\ell_2$  損失関数を最小にするアフィン転移という転移学習・キャリブレーションのクラスを発見し、MD 計算物性と実験値のバイアス・バリエーションの補正における有効性を検証した。これは RadonPy データベースのキャリブレータの基盤技術につながる成果である。

論文 Minami, S., Fukumizu, K., Hayashi, Y., Yoshida, R., Transfer Learning with Affine Model Transformation. ArXiv (2022). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.09745>

ソースコード GitHub: <https://github.com/mshunya/AffineTL>

#### E. SPACIER: RadonPy 自動実験×キャリブレーション×生成 AI×適応的実験計画法

RadonPy による高分子物性自動計算、生成 AI 技術に基づく分子設計、ベイズ最適化による逐次的実験計画法からなるポリマー自動設計プログラムの実装と性能検証が完了した (図 5)。これにより任意の物性領域に存在するポリマーを自由自在に設計できるようになった。現在、RadonPy への実装・リリースの準備を進めている。

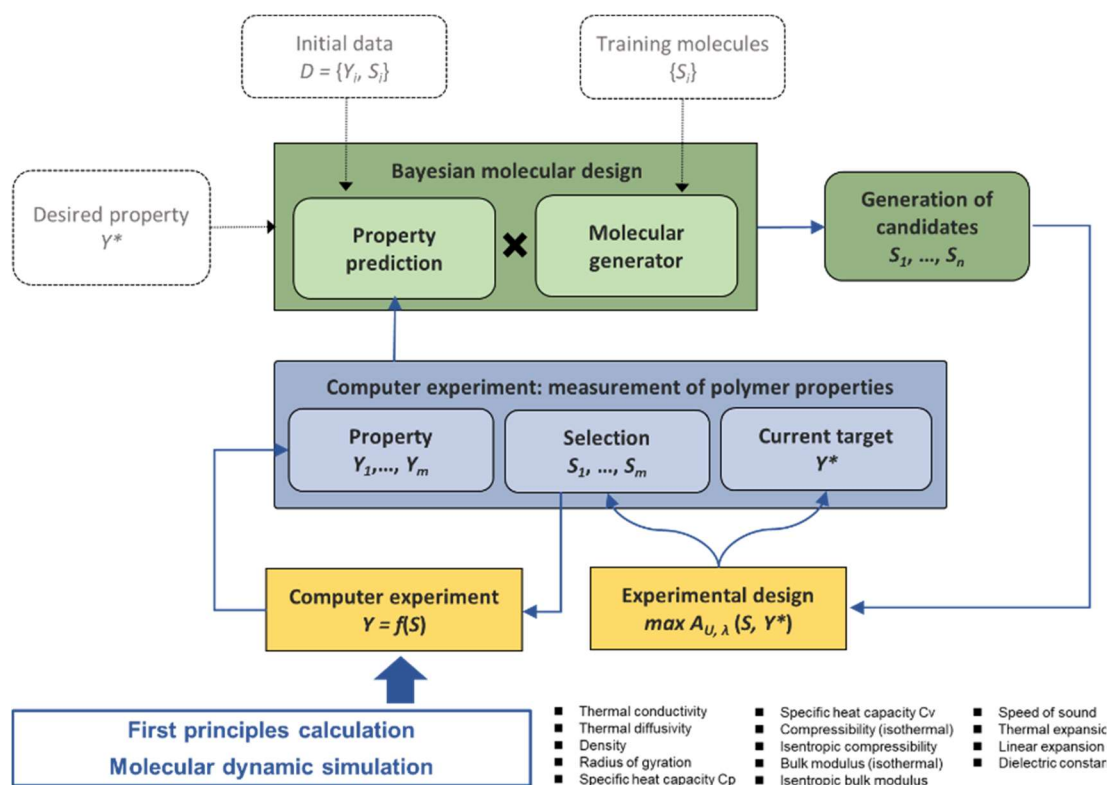


図 5: RadonPy 自動実験×キャリブレーション×生成 AI×適応的実験計画法による高分子自動設計



## F. Sim2Real 転移のべき乗則の観測

大量の計算物性データを用いて訓練された事前学習モデルを、実験データを用いて現実系の予測モデルにファインチューニングする。このとき、計算物性データベースのサイズ  $n$  に対して、現実系の予測モデルの汎化誤差は、次のべき乗則に従うことが理論的に示唆されている。

$$\text{test error} = Dn^{-\alpha} + C$$

$n$  の増加に対する改善率  $\alpha$  が大きく、転移ギャップ  $C$  が小さくなるようにデータベースを設計することが望ましい。特に、転移ギャップはデータベースを拡大していくことで到達可能な汎化性能であり、計算物性データベースの将来価値を表す重要な指標になる。令和 4 年度は RadonPy データベースを用いて数値実験を実施し、Sim2Real 転移のべき乗則が存在することが確認された。

## G. データ駆動型材料研究の推進

機械学習アルゴリズム及び MD 計算で予測された高熱伝導アモルファスポリマー・液晶ポリマーのいくつかの候補を合成し、熱伝導率の測定を実施した（東京工業大学）。当初の想定以上のデータが得られたため、広い周波数帯域（5MHz）まで拡張できるロックインアンプを新たに購入し、実証研究を実施した。

### (4) 「プロジェクトの総合的推進」

2022 年度は、統計数理研究所に加えて 3 大学 23 企業に属する計 112 名が本プロジェクトに参画した。また、2022 年 8 月に RadonPy のオープンソース開発とデータベースの共同開発を目的とする産学連携コンソーシアムを正式に発足した（2021 年に非公式に発足）。2023 年 3 月時点でコンソーシアムには、3 大学 23 企業に属する計 123 名が参画しており、現在もなお参画希望の問い合わせが殺到している。

多数の参画者による複数の共同研究プロジェクトを円滑に進めるために、定例ミーティングや Slack 等を活用して密に情報・技術共有を行っている。2022 年度の定例ミーティングの開催履歴は以下の通りである。

#### テクニカルミーティング（プロジェクトの進捗報告・情報交換に関するミーティング）

2022 年 5 月 10 日（38 名）

2022 年 7 月 12 日（47 名）

2022 年 9 月 13 日（34 名）

2022 年 11 月 8 日（40 名）

2023 年 2 月 7 日（44 名）

2023 年 3 月 14 日（46 名）

#### 運営会議（プロジェクトの企画・運営に関するミーティング）

2022 年 9 月 30 日

2023 年 3 月 31 日

また、2024 年 3 月 28 日に成果報告会を開催し、本プロジェクトの研究紹介を行った。参加者人数は 322 名（申込 459 名）であった。開催概要は以下の通りである。

【イベント名】 データ駆動型高分子材料研究の最前線

【日時】 2023年3月28日(火) 13:00-17:50

【開催方法】 ウェブ開催 (Zoom)

【講演リスト】

1. 高分子物性データベースおよび自動計算ライブラリ RadonPy の開発と転移学習の実践 (林 慶浩 (統計数理研究所))
2. ルールベース重合反応モデルによる高分子仮想ライブラリの構築と評価 (大野 充 (株式会社ダイセル 事業創出本部 事業創出センター))
3. 実験計画法による高分子物性計算と機械学習の融合 (南條 舜 (総合研究大学院大学 複合科学研究科 統計科学専攻)、アリフィン (JSR 株式会社)、林 慶浩 (統計数理研究所))
4. アフィン型転移学習によるシミュレーションと実験のキャリブレーション (南 俊匠 (総合研究大学院大学 複合科学研究科 統計科学専攻))
5. 分子動力学法による高分子のガラス転移現象に関する調査 (杉澤 宏樹 (三菱ケミカル株式会社))
6. RadonPy を用いた高分子材料の熱伝導率における延伸倍率依存性の検討 (古屋 秀峰 (東京工業大学 物質理工学院))
7. 実験データと計算データを組み合わせた高分子溶液相溶性のマルチタスク学習 (青木 祐太 (統計数理研究所)、Stephen Wu (統計数理研究所)、釣本 輝希 (三菱ケミカル株式会社)、林 慶浩 (統計数理研究所) 南 俊匠 (総合研究大学院大学)、大久保 忠利 (三菱ケミカル株式会社)、白鳥 和矢 (三菱ケミカル株式会社)、吉田 亮 (統計数理研究所))
8. データ駆動型高分子材料研究ロードマップ: 限られたデータの壁を乗り越えるために (吉田 亮 (統計数理研究所))

### 2-3. 活動 (研究会の活動等)

1. 2022年4月29日 SIAM International Conference on Data Mining (SDM22) mini-symposium “Research Issues on Bridging Machine Learning and Simulation”
2. 2022年6月14日 2022年度人工知能学会全国大会 企画セッション「シミュレーションとAI」(180名)
3. 2023年3月7-8日 第2回スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「研究交流会」
4. 2023年3月9日 電子情報通信学会 総合大会 シンポジウム「シミュレーションと機械学習の融合技術」
5. 2023年3月28日「富岳」成果創出加速プログラムシンポジウム「データ駆動型高分子材料研究の最前線」(参加人数 322名)
6. RadonPy データベース共同開発事業コンソーシアム 運営会議 2回 テクニカルミーティング 6回

## 2-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
(1) データ駆動型材料研究に資する体系的な高分子物性データベースの開発	東京都立川市緑町 10-3 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 統計数理研究所	吉田 亮
(2) 高分子物性自動計算ソフトウェア RadonPy の開発	東京都立川市緑町 10-3 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 統計数理研究所 東京都目黒区大岡山 2-12-1-S1-20 東京工業大学 物質理工学院	吉田 亮 古屋 秀峰
(3) マテリアルズインフォマティクス基盤技術の創出とデータ駆動型材料研究の推進	東京都立川市緑町10-3 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 統計数理研究所	吉田 亮
(4) プロジェクトの総合的推進	東京都立川市緑町10-3 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構 統計数理研究所	吉田 亮

別添 1 学会等発表実績

## 学術論文（プレプリント含む）

1. **[Editor's choice; press release]** Zhang, Q., Liu, C., Wu, S., Hayashi, Y., Yoshida, R., A Bayesian method for concurrently designing molecules and synthetic reaction networks. *Science and Technology of Advanced Materials: Methods* (2023). in press
2. **[Nature Publishing Group Top 3% online attention score; IF = 12.256 (2022-2023); Citation = 5; press release]** Hayashi, Y., Shiomi, J., Morikawa, J., Yoshida, R., RadonPy: automated physical property calculation using all-atom classical molecular dynamics simulations for polymer informatics. *npj Computational Materials* 8, 222 (2022).
3. **[IF = 11.021 (2022-2023); citation = 8]** Ma, R., Zhang, H., Xu, J., Sun, L., Hayashi, Y., Yoshida, Y., Shiomi, J., Wang, J-X., Luo, T., Machine learning-assisted exploration of thermally conductive polymers based on high-throughput molecular dynamics simulations, *Materials Today Physics* 28, 100850 (2022).
4. Iwayama, M., Wu, S., Liu, C., Yoshida, R., Functional output regression for machine learning in materials science. *Journal Chemical Information and Modeling* 62, 4837–4851 (2022).
5. **[citation = 9]** Kusaba, M., Liu, C., Yoshida, R., Crystal structure prediction with machine learning-based element substitution. *Computational Materials Science* 11, 111496 (2022).
6. Torres, P., Wu, S., Ju, S., Liu, C., Tadano, T., Yoshida, R., Shiomi, J., Descriptors of intrinsic hydrodynamic thermal transport: screening a phonon database in a machine learning approach. *Journal of Physics: Condensed Matter* 34, 135702 (2022).
7. Ohno, M., Hayashi, Y., Zhang, Q., Kaneko, Y., Yoshida, R., SMiPoly: generation of synthesizable polymer virtual library using rule-based polymerization reactions. *ChemRxiv* (2023). 0.26434/chemrxiv-2023-w54wn
8. Minami, S., Fukumizu, K., Hayashi, Y., Yoshida, R., Transfer Learning with Affine Model Transformation. *ArXiv* (2022). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.09745>
9. Liu, C., Tamaki, H., Yokoyama, T., Wakasugi, K., Yotsuhashi, S., Yoshida, R., Shotgun crystal structure prediction using machine-learned formation energies. *arXiv* (2023). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2305.02158>

## ソフトウェア等

1. 高分子物性自動計算ライブラリ RadonPy: <https://github.com/RadonPy/RadonPy>
2. 分子・合成経路自動生成アルゴリズム Seq-Stack-Reaction: <https://github.com/qi-zh/Seq-Stack-Reaction>
3. 関数出力変数カーネル回帰: [https://github.com/yoshida-lab/XenonPy/blob/master/samples/kernel\\_neural\\_network.ipynb](https://github.com/yoshida-lab/XenonPy/blob/master/samples/kernel_neural_network.ipynb)
4. アフィン転移学習: <https://github.com/mshunya/AffineTL>
5. 結晶構造予測プログラム CSPML: <https://github.com/Minoru938/CSPML>

6. SMiPoly: ルールベース重合反応モデルによる仮想ライブラリ生成:

<https://github.com/PEJpOhno/SMiPoly>

### プレスリリース・新聞報道等

1. 2022年11月9日「全原子古典分子動力学法による高分子物性計算を全自動化するソフトウェア RadonPy をリリース ～高分子材料物性大地図の作成に向けた第一歩～」  
<https://www.ism.ac.jp/ura/press/ISM2022-08.html>
2. 2022年12月22日 Automated simulation software creates a world map of polymer properties  
<https://www.eurekalert.org/news-releases/975212>
3. 2022年11月 日経新聞「統計数理研究所・東工大・東大・JST、全原子古典分子動力学法による高分子物性計算を全自動化するソフトウェアをリリース」
4. 2022年11月 日経産業新聞「高分子の性能、全自動で計算 統計数理研、富岳でデータ集積」
5. 2022年11月 日経新聞（ウェブ版）「高分子性能を自動計算 統計数理研、富岳でデータ集積」
6. 2022年9月 日刊工業新聞「書評「マテリアルズインフォマティクス」共立出版(2022)」
7. 2022年8月 日刊工業新聞「高分子ガラス転移点、スパコン「富岳」で1日1000種計算 三菱ケミがスキーム開発」

### 受賞

1. 文部科学大臣表彰「若手科学者賞」: Wu Stephen 「統計的機械学習によるデータ駆動型科学の新地平開拓研究」
2. 第2回「富岳」成果創出加速プログラム研究交流会「次世代研究者賞」: 林慶浩「高分子物性自動計算システム RadonPy の開発と産学連携によるデータベース共創」

### 口頭発表

1. **[国際会議]** 2023.3. TMS 2023 Annual Meeting & Exhibition, CA, USA, “XenonPy: An Open Source Platform for Data-driven Materials Design with Small Data” (Wu Stephen)
2. 2023.3. 「富岳」成果創出加速プログラム「データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出」公開セミナー, オンライン, “高分子物性自動計算システム RadonPy の開発と産学連携によるデータプラットフォームの共創” (林 慶浩)
3. 2023.3. 「富岳」成果創出加速プログラム「データ駆動型高分子材料研究を変革するデータ基盤創出」公開セミナー, オンライン, “プロジェクト概要: データ駆動型高分子材料研究の諸問題” (吉田 亮)
4. 2023.3. シンポジウム「データ駆動型高分子材料研究の最前線」(2023), オンライン, “高分子物性データベースおよび自動計算ライブラリ RadonPy の開発と転移学習の実践”

(林 慶浩)

5. 2023.3. シンポジウム「データ駆動型高分子材料研究の最前線」(2023), オンライン, “実験計画法による高分子物性計算と機械学習の融合” (南條 舜, アリフィン, 林 慶浩)
6. 2023.3. シンポジウム「データ駆動型高分子材料研究の最前線」(2023), オンライン, “アフィン型転移学習によるシミュレーションと実験のキャリブレーション” (南 俊匠)
7. 2023. 3. シンポジウム「データ駆動型高分子材料研究の最前線」(2023) , オンライン, “RadonPy を用いた高分子材料の熱伝導率における延伸倍率依存性の検討”(古屋 秀峰)
8. 2023.3. シンポジウム「データ駆動型高分子材料研究の最前線」(2023), オンライン, “実験データと計算データを組み合わせた高分子溶液相溶性のマルチタスク学習” (青木 祐太, Stephen Wu, 釣本 輝希, 林 慶浩, 南 俊匠, 大久保 忠利, 白鳥 和矢, 吉田 亮)
9. 2023.3. シンポジウム「データ駆動型高分子材料研究の最前線」(2023), オンライン, “データ駆動型高分子材料研究ロードマップ：限られたデータの壁を乗り越えるために” (吉田 亮)
10. **[基調講演]** 2023.3. 日本化学会第 103 春季年会 (2023) , 千葉 (東京理科大学) , “データ駆動型物質・材料研究の諸問題：限られたデータの壁を乗り越える” (吉田 亮)
11. **[招待講演]** 2023.3. 日本化学会第 103 春季年会 (2023) , 千葉 (東京理科大学) , “マテリアルズインフォマティクスにおける分子記述子の基礎” (林 慶浩)
12. **[招待講演]** 2023.3. 2023 年電子情報通信学会総合大会, 埼玉 (芝浦工業大学) , “データ駆動型材料科学における統計的機械学習とシミュレーションの融合：限られたデータの壁を乗り越える” (吉田 亮)
13. 2023.3. 第 2 回「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会「富岳百景」, オンライン, “データ駆動型高分子材料研究の最前線限られたデータの壁を乗り越える” (吉田 亮)
14. 2023.3. 第 2 回「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会「富岳百景」, オンライン, “高分子物性自動計算システム RadonPy の開発と産学連携によるデータベース共創”(林 慶浩)
15. 2023.2. 第 27 回準結晶研究会, 愛知 (名古屋大学) , “機械学習による半導体準結晶の探索” (草場 穂\*, 劉 暢, 藤田 絵梨奈, 桂 ゆかり, 木村 薫, 吉田 亮)
16. 2022.12. 第 9 回領域会議, 兵庫 (神戸ポートピアホテル) , “機械学習による半導体準結晶の探索” (草場 穂\*, 劉 暢, 藤田 絵梨奈, 桂 ゆかり, 木村 薫, 吉田 亮)
17. **[国際会議]** 2022.12. The 17th Pacific Polymer Conference (PPC17), Brisbane, Australia, “Development of an Automated Polymer Property Calculation System “RadonPy” and Data Platform Co-creation through Industry-Academia Collaboration”, (Y. Hayashi\*, Y. Noguchi, A. Takahashi, W. Stephen, R. Yoshida)
18. **[国際会議]** 2022.12. The 17th Pacific Polymer Conference (PPC17), Brisbane, Australia, “Design of liquid-crystalline polyimides by integrating expert knowledge to a data-driven machine learning framework”, (W. Stephen\*, H. Maeda, R. Marui, E. Yoshida, Y. Nabae, T.

Hayakawa, Y. Noguchi, Y. Hayashi, R. Yoshida)

19. [国際会議] 2022.12. The 5th G'Lowing Polymer Symposium in KANTO (GPS-K2022), ウェブ開催, “Multitask machine learning for prediction and understanding of polymer-solvent solubility” (Yuta Aoki, Teruki Tsurimoto, Tadamichi Okubo, Stephen Wu, Yoshihiro Hayashi, Shunya Minami, Kazuya Shiratori, Ryo Yoshida)
20. [国際会議] 2022.11. The 23rd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-23), online seminar, “Development of an Automated Polymer Property Calculation System “RadonPy” and Data Platform Co-creation through Industry-Academia Collaboration”, (Y. Hayashi)
21. 2022.11. 日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会, 信州大学長野 (工学) キャンパス, “高分子材料の熱伝導率における延伸倍率依存性の解明” (光武 拓馬, 古屋 秀峰)
22. [招待講演] 2022.11. 第 15 回 品質工学技術戦略研究発表大会, 星陵會館ホール + ウェブ開催, “データ駆動型材料研究における統計的諸問題: 現状と展望” (吉田 亮)
23. [パネル討論] 2022.11. 第 15 回 品質工学技術戦略研究発表大会, 星陵會館ホール + ウェブ開催, パネル討論 “企業の社会貢献活動から未来の品質工学を考える” (安達 範久, 久保 祐貴, 西野 眞司, 畠山 鎮, 吉田 亮)
24. [招待講演] 2022.10. 第 7 回オンラインサロン「スパコンコロキウム」, ウェブ開催, “データ科学による新物質の予測と発見” (吉田 亮)
25. [国際会議] 2022.9. ACS Fall 2022 (Division of Polymer Chemistry), Chicago, US, “Data-driven design and synthesis of new liquid crystal polyimides”, (W. Stephen)
26. 2022.9. 第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, 宮城 (東北大学), “マルチタスク機械学習による高分子溶液相溶性と Flory-Huggins  $\chi$  パラメータの予測” (青木 祐太\*, 釣本 輝希, ウ ステファン, 林 慶浩, 南 俊匠, 白鳥 和矢, 吉田 亮)
27. 2022.9. 第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, 宮城 (東北大学), “材料科学における多次元出力変数の教師あり学習” (岩山 めぐみ\*, ウ ステファン, 劉 暢, 吉田 亮)
28. [招待講演] 2022.9. 日本物理学会 2022 年秋季大会シンポジウム, ウェブ開催, “統計的機械学習による予測と発見、理解: 準結晶研究への適用事例を中心に” (吉田 亮)
29. 2022.9. 2022 年度統計関連学会連合大会, ウェブ開催, “専門知識と機械学習の融合に基づく液晶性ポリイミドの設計” (ウ ステファン\*, 前田 颯, 丸井 莉花, 吉田 絵里菜, 難波江 裕太, 早川 晃鏡, 野口 瑤, 林 慶浩, 吉田 亮, 森川 淳子)
30. 2022.9. 2022 年度統計関連学会連合大会, 東京 (成蹊大学), “アフィンカップリング型モデル変換による転移学習” (南 俊匠\*, 吉田 亮)
31. 2022.9. 第 71 回高分子討論会, 北海道 (北海道大学), “MD 自動計算による高分子物性データプラットフォームの産学連携による共創” (林 慶浩\*, ウ ステファン, 野口 瑤, 高橋 愛子, 吉田 亮)
32. 2022.9. 第 71 回高分子討論会, 北海道 (北海道大学), “データ駆動型の液晶ポリイミド



- 設計 (Eng: Data-driven design of new liquid-crystal polyimide” (ウ ステファン\*, 前田 颯, 丸井 莉花, 吉田 絵里菜, 難波江 裕太, 早川 晃鏡, 野口 瑤, 林 慶浩, 吉田 亮)
33. 2022.9. 第 71 回高分子討論会, 北海道 (北海道大学), “統計的実験計画法による体系的な高分子材料計算物性データベースの開発” (アリフィン\*, 林 慶浩, 吉田 亮)
  34. **[国際会議]** 2022.7. Conference on a FAIR Data Infrastructure for Materials Genomics 2022, online seminar, “Challenges and opportunities in polymer informatics from a statistical perspective”, (W. Stephen)
  35. **[招待講演]** 2022.7. 第 26 回高分子計算機科学研究会講座, ウェブ開催, “高分子物性自動計算システム RadonPy による産学連携データプラットフォームの共創” (林 慶浩)
  36. **[招待講演・国際会議]** 2022.6. Aperiodic 2022(10th International Conference on Aperiodic Crystals), Sapporo, Japan, “Using machine learning to discover quasicrystals”, (R. Yoshida)
  37. **[招待講演]** 2022.6. 2022 年度 人工知能学会全国大会 (第 36 回), 京都 (国立京都国際会館), “データ駆動型材料研究における統計的機械学習とシミュレーションの融合”(吉田 亮\*, 林 慶浩, Arifin)
  38. **[招待講演]** 2022.4. 産総研 データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム 設立記念講演会, ウェブ開催, “高分子物性自動計算と統計的機械学習の協働: 材料空間の大地図を作成する” (吉田 亮)
  39. 2022.4. 新学術領域 ハイパーマテリアル 第 8 回領域会議, ウェブ開催, “統計的機械学習による新規準結晶の探索: 現状と課題” (劉 暢\*, 吉田 亮)
  40. **[招待講演・国際会議]** 2022.4. 2022 SIAM International Conference on Data Mining, online seminar, “Statistical Machine Learning for Materials Modeling and Simulation”, (R. Yoshida) (invited)