

マテリアル戦略有識者会議 (第14回)  
3/5(木)10:00-12:00

## マテリアル×AIの人材育成の取り組み

沼田圭司

京都大学 大学院工学研究科 材料化学専攻

文科省 データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト  
京都大学拠点 (バイオ・高分子マテリアル/高度循環マテリアル領域)

# バイオ・高分子ビッグデータ駆動による完全循環型バイオアダプティブ材料の創出拠点

## 拠点概要

カーボンニュートラルの実現には二酸化炭素から合成されると共に環境循環型のバイオアダプティブ材料や、二酸化炭素を分離・回収する機能材料が求められ、Well-Being社会にはQOLを向上させるバイオマテリアルが必要不可欠である。また、高分子材料は多様な自然環境・生体環境・工業プロセスで利用されており、日本における基幹材料の一つである。本拠点研究では、日本固有のビッグデータと大型研究施設を基軸としたマテリアル研究開発のプラットフォームを京都大学を中心に拠点化する。重要な実装領域である、高タフネス・環境低負荷高分子、高度循環型高分子、QOLバイオマテリアル、および二酸化炭素分離回収材料を含む機能性バイオアダプティブ材料の開発を目指す。

## カーボンニュートラル & Well-Being社会を実現するバイオアダプティブ材料

**Pr1:サーキュラー高分子**  
高度な資源循環と環境負荷低減を示す高分子材料

**材料創製グループ**

完全分解性材料  
バイオゴム  
人工タンパク質材料

マイクロプラスチックを生じない繊維材料

PL 沼田

*Nat Commun 2024*  
*Adv. Funct. Mater 2024*  
*Adv. Funct. Mater 2024*  
*Adv. Mater 2024*

**Pr2:QOLバイオマテリアル**  
Society5.0/Well Being社会に必要な人に優しいバイオ材料

ドラッグデリバリー材料  
生体ステルス材料  
再生医療足場材料  
抗体材料

PL 酒井教授

埋め込み前  
埋め込み後  
血管&脂肪組織

ゲル・ゲル相分離材料  
含水率99%

細胞親和性に優れた材料  
*Nature Materials 2023*

**Pr3:CO<sub>2</sub>分離回収材料**  
カーボンニュートラル社会の実現

CO<sub>2</sub>分離膜  
自己修復膜  
CO<sub>2</sub>吸収材

PL 星野教授

無機有機 (MOF-高分子) ハイブリッド膜

*Nat Commun 2024, ACS AMI 2024*

**計測評価グループ**

鳴瀧 教授  
東京科学大

RIKEN QST  
JASRI  
JRR3  
SPring-8  
FUKUI INSTITUTE FOR FUNDAMENTAL CHEMISTRY

**RDE** Spider Silkome Database  
世界初・日本発 バイオ・高分子ビッグデータ

**理論計算グループ**

佐藤 教授 京都大学

RIKEN Center for Computer  
RCCS

**データ活用促進グループ**

内藤 博士  
NIMS

荒川 教授  
慶應大学

Science Advances

利用分野を問わず、高分子材料のビッグデータを利用した包括的な材料創出基盤は世界初の試み。世界初・日本発データベースと独自の分子・材料設計理論が日本発のマテリアルDxを可能にする。

### Silkome

### RDE

### Synthetic Seq Database

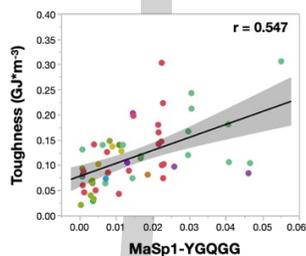
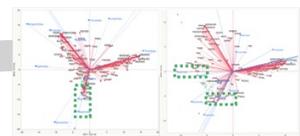
Table II. VHSI Scales for 20 Coded Amino Acids									
Amino Acid	VHSI <sub>1</sub>	VHSI <sub>2</sub>	VHSI <sub>3</sub>	VHSI <sub>4</sub>	VHSI <sub>5</sub>	VHSI <sub>6</sub>	VHSI <sub>7</sub>	VHSI <sub>8</sub>	VHSI <sub>9</sub>
Ala A	0.15	-1.11	-1.35	-0.92	0.02	-0.91	0.36	-0.48	
Arg R	-1.07	1.45	1.24	1.27	1.55	1.47	1.30	0.43	
Asn N	-0.99	0.60	-0.37	0.69	-0.55	0.65	0.33	-0.40	
Asp D	-1.15	0.47	-0.41	-0.01	-2.68	1.33	0.60	0.36	
Cys C	0.14	-1.47	-0.44	-0.21	0.06	1.20	-1.42	-0.19	
Glu Q	-0.96	0.12	0.18	0.16	0.09	0.42	-0.20	-0.41	
Gly G	-1.14	0.40	0.16	0.36	-2.14	-0.17	0.91	0.02	
His H	-0.20	-1.33	-2.43	2.28	-0.33	-1.18	2.05	-1.34	
Ile I	-0.43	-0.23	0.27	0.19	0.26	-1.28	0.93	0.65	
Leu L	1.17	-0.14	0.30	-1.40	0.30	-1.61	-0.16	-0.13	
Met M	1.04	0.07	0.28	-0.80	0.23	-1.37	0.68	-0.62	
Lys K	-1.17	0.70	0.70	0.00	1.64	0.67	1.43	0.13	
Pro P	1.01	-0.53	0.43	0.00	0.23	0.10	-0.84	-0.64	
Pho F	1.32	0.41	0.96	-0.16	0.25	0.26	-1.33	-0.20	
Pro F	0.22	-0.17	-0.20	0.00	-0.01	-1.34	-0.19	1.36	
Ser S	-0.47	-0.46	-1.07	-0.44	-0.32	0.27	-0.44	0.11	
Thr T	0.46	-0.33	-0.20	-1.06	-0.05	-0.01	-0.29	0.36	
Tyr Y	1.40	2.40	1.79	0.15	0.35	0.25	-1.46	-0.44	
Val V	0.40	1.40	1.17	1.73	0.33	0.25	-1.46	-0.44	
Val V	0.76	-0.92	-0.17	-1.91	0.22	-1.40	-0.24	-0.03	

AAAAA...  
CDVXY...  
TSCWY...  
YYYYY...

### Cambridge Structural Database (CSD)

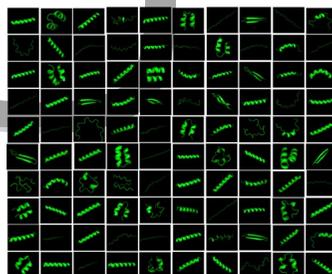
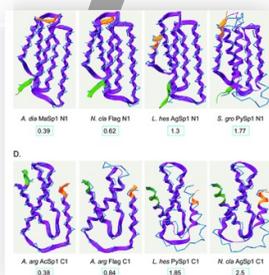
+ existing polymers

**Multivariate Analysis of Big Data** extracts the motifs that contribute to physical properties



**Machine learning to find key motif(s) to improve physical/biological prop.**

GRGPGGYGPGQGGPGGSAAAAAA  
GRGPGGYGQGGQGGPGGSAAAAAA  
GRGPGGWGPGQGGPGGSAAAAAA ✗



**Auto synthesis purification · analysis**



**Basic/common prop**  
Mechanical, Viscoelastic, Water Content, Solubility etc

**Project-based prop**  
biodegradability · toxicity · cytotoxicity  
inflammation · OMICS  
CO<sub>2</sub> affinity

**Biodegradable Tough Polymer**

**Bioinert polymer (PEG alternative)**

**CO<sub>2</sub> Separation material**



**Material characterization**

**Feedback to database**

# バイオ・高分子マテリアルDx論 @京都大学大学院工学研究科材料化学専攻 2024年度後期 開講

担当教員 沼田圭司

配当学年 修士一回生から、博士課程まで(京大拠点内の学生は聴講可能)

単位数 1.5

授業形態 オンラインおよび実地学習

各回40から60名が、京大内外から受講。  
リカレントなどにも利用予定。  
京大外部の場合、4月頭に登録の必要あり。

## 【講義概要・目的】

世界的に高分子材料のマテリアルDXは進んでおらず、京都大学が高分子材料のマテリアルDXを学問として提案、確立し、人材を輩出することは、京都大学が当該分野を牽引するという社会的責務からも重要である。本講義では、バイオ・高分子材料の開発において、理論計算やビッグデータからの予測に基づいた方法論と現状を理解し、マテリアルDX人材を京都大学から輩出することを目指す。講義の内容は、高分子の理論、計算、自動計測・自動解析、対応した合成論からなる座学、および研究室や大型研究施設における演習から成る。講師は産業界、他大学からも招聘する。

## 【到達目標】

高分子に関するビッグデータの構築手法および利用方法を身につけ、自らの目的バイオ・高分子材料を効率的に開発するマテリアルDX論を修得する。

## 【授業計画と内容】

### 高分子科学の基礎 沼田

高分子科学の基礎、特に分子構造と物性の関係性を中心に解説する。

### バイオ・高分子の計算(3回)松林、吉田、杉田

MD等の計算手法を用いた高分子の物性予測などについて解説する。

### 自動測定・解析とデータ蓄積(2回)眞弓、李

バイオ・高分子材料の自動計測・自動解析に関して、大型研究施設である放射光などの例を中心に解説する。

### ビッグデータ・機械学習を利用した分子設計(3回)澤田、加藤、林、内藤

バイオ・高分子の測定データから新規に分子設計する手法論を実践を交えて解説する。

### 生成AIを利用した分子設計(1回)荒川

バイオ・高分子のデータベースから生成AIを利用した分子設計を実践を交えて解説する。

### 実地見学(1回)

自動測定・解析とデータ蓄積の現場として、放射光施設などを見学し、実際の測定などを解説する。



# マテリアルDXリサーチ・フェロー(RF)制度

京大拠点が構築するデータベースを利用したデータ駆動型研究を普及し関係する  
若手人材を育成するため、参画**修士学生の博士進学**を加速するRA/RF制度



リサーチフェロー(RF): 経済的支援(月額8万円程度)

## 令和5年度実績

京都大学大学院 (M1, M2)	5名
北海道大学大学院 (M1)	1名
九州大学大学院 (M1, M2)	3名
筑波大学大学院 (M2)	1名
合計	10名

## 令和6年度実績

京都大学大学院 (M1, M2)	3名
北海道大学大学院 (M1)	1名
九州大学大学院 (M1)	3名
筑波大学大学院 (M1)	1名
名古屋大学大学院	1名
合計	9名

## 令和7年度採用者

京都大学大学院 (M1, M2)	2名
北海道大学大学院 (M1, M2)	2名
九州大学大学院 (M1, M2)	2名
合計	6名

## 令和8年度採用者

京都大学大学院 (M1, M2)	5名
北海道大学大学院 (M1, M2)	2名
九州大学大学院 (M1, M2)	3名
合計	10名

期待される効果: 博士課程における奨学金やRA/RF制度は大学や期間毎に多少の差があるものの、ある程度整備されてきている。一方で、博士進学を検討する修士課程においては、RA/RF制度の整備は限定的である。本拠点では博士進学を想定している修士課程の学生に対して、RA/RFを支給することにより、更なる研究の加速と優れた研究人材の確保に繋がることを期待している。

新領域研究グループ名： 高分子材料Dx研究グループ（2025年12月設立）

	所属・職名	氏名
運営委員	京都大学・教授	沼田圭司
	東京大学・教授	酒井崇匡
	九州大学・教授	星野友
	九州大学・教授	加藤幸一郎
	統計数理研究所・助教	林慶浩
	東京大学・教授	塩見淳一郎（非会員）
	NIMS・副センター長	内藤昌信
	東京科学大学・教授	鳴瀧彩絵
	慶應義塾大学・所長/教授	荒川和晴（非会員）

## XX-1 高分子材料 Dx 研究グループ 研究会

主題：高分子材料 Dx 研究のキックオフ

<趣 旨>カーボンニュートラル社会、Society5.0、レジリエンス国家、そして Well-Being 社会を実現するためには高分子材料は欠かせない技術的ピースである。本研究グループでは、データ科学に基づいた Dx 手法を有効利用することにより、革新的な機能・物性を有する高分子材料を効率的に創出すること、また、従来とは全く異なる先駆的なデータ駆動型研究手法を生み出し、産業界との緊密な連携の下で展開していくことを目的とする。本研究会では、高分子材料 Dx 研究グループのキックオフとして、当該分野で著名な先生方に講演いただくと共に、本研究会や研究分野の方向性を議論するべくパネルディスカッションを設けました。多数の方々のご参加をお待ちしております。

主催 高分子学会 高分子材料 Dx 研究グループ  
日時 令和 8 年 3 月 17 日(火) 13:00~17:00  
会場 理化学研究所 和光地区 本部棟 2 階大会議室  
埼玉県和光市広沢 2-1  
URL: <https://www.riken.jp/access/wako-map/>  
交通 東京メトロ・東武東上線 和光市駅から徒歩 20 分

<13:00~17:00>

開会の挨拶

(京都大学大学院工学研究科 教授) 沼田圭司

- 「高分子材料研究におけるデータの壁と AI の役割」  
(統計数理研究所 教授) 吉田亮
- 「MI による多機能ポリマー複合材の開発」  
(東京大学大学院工学系研究科 教授) 塩見淳一郎
- パネルディスカッション

(統計数理研究所 教授) 吉田亮  
(東京大学大学院工学系研究科 教授) 塩見淳一郎  
(統計数理研究所 助教) 林慶浩  
(東京大学大学院工学系研究科 教授) 酒井崇臣  
(九州大学大学院工学研究院 教授) 星野友  
(慶應義塾大学先端生命科学研究所 所長・教授) 荒川和晴  
モデレータ (京都大学大学院工学研究科 教授) 沼田圭司

閉会の挨拶

(京都大学大学院 工学研究科/医学研究科 名誉教授/特任教授) 秋吉一成

<18:00~>

意見交換会

参加要領 受付期間 2026 年 1 月 20 日~2026 年 3 月 10 日

- 1) 定員 80 名 (定員に達しない場合は当日受付も可)
- 2) 参加費：無料
- 3) 意見交換会については、お申込みいただきました後、別途詳細をご連絡いたします。
- 4) 申し込み方法：参加申込ページ (<https://forms.gle/ukjxytb6JFki5Gfr8>) からお申込みください。  
プログラムは変更になる場合がございます。最新情報は HP でご確認ください。
- 5) 申し込み締め切り 3 月 10 日(火)

お問い合わせ 高分子材料 Dx 研究グループ事務局 [enzyme\\_assist@ml.riken.jp](mailto:enzyme_assist@ml.riken.jp)



公益社団法人 高分子学会  
The Society of Polymer Science, Japan Since 1951

## 高分子材料Dx 研究グループ 研究会 主題：高分子材料Dx研究のキックオフ

- 3月17日午後に理研(和光)にてキックオフ研究会を開催予定。
- 高分子学会内外のメンバーで実施。
- 現状、120名程度の登録。
- 企業からの参加者が6割ほど。
- 2026年度中に研究グループから研究会に格上げし、コンソーシアム化する予定。

吉田亮教授  
統計数理研究所



塩見淳一郎教授  
東京大学



林慶浩助教  
統計数理研究所



荒川和晴教授  
慶應義塾大学

