复杂的化学构成与多尺度的空间结构是功能高分子材料研发所面临的巨大挑战，急需构建化学结构、链形态、加工工艺与物理性能之间的映射关系。申请人将整合量子、全原子、粗粒化与介观等不同分辨率的工具，并结合数据库与机器学习，搭建高通量的科学软件，模拟化学键震动、构象变化、连段迁移等多维度过程，探究热输运中链形态的影响、共混体对链段的溶解等微观机理，预测热导率、黏度、溶解度、介电常数等宏观性能，为功能高分子设计提供新的蓝图。开发知识产权属于高校的软件平台，将降低信息流动的门槛，提高成果的重复性，保障技术的延续性、可靠性、准确性、通用性与完善性，是科学研究由点向面、全方位、爆发式开展的先决条件，为能源新材料研发、跨尺度输运机理、能源存储与转换等国家重大需求领域的研究提供支撑工具。申请人万余行自主知识产权的原代码、密切相关的二十余篇期刊论文、软件开发六年的工作经验为项目的推进与完成提了供夯实的基础与稳固保障。