



## 第1回 技術開発・共用部門オープンセミナー ～MDPF利活用事例の紹介 [PoLyInfo]～

MDPF利活用事例紹介のシリーズでは、NIMSデータ中核拠点（MDPF）が提供するDICEサービスのユーザを講師にお招きし、各サービスをどのように利用し、新しい材料の発見や研究の効率化につながったかについてご紹介いただきます。

**PoLyInfo**をはじめとしたデータサービス、材料データの利活用に関心のある方々を広く対象にしたオンラインセミナーです。

### ランキングベースの機械学習によるポリマー分解性予測

【講師】 田村 亮

国立研究開発法人物質・材料研究機構  
マテリアル基盤研究センター 材料設計分野  
データ駆動型アルゴリズムチーム  
チームリーダー



【日時】 2024年7月11日（木） 15:00 - 16:00

【開催方法】 オンライン（Microsoft Teams）

【関連するDICEサービス】



<https://polymer.nims.go.jp/>

【参加方法】 事前に参加登録が必要、参加費無料

<https://events.teams.microsoft.com/event/414aee22-1e85-4c40-903c-3615760e7492@dca88378-b099-4193-9bb0-dfd0fa1bba75>



【講演内容】

海洋環境保護の観点から、ポリマーの分解性制御は重要なテーマとなっている。ポリマー材料の分解性を支配する因子を明らかにすることは、ポリマー材料開発において必要不可欠となっている。しかし、分解性に関するデータセットは数が少なく、それぞれのデータセットにおいて実験手段や条件が多様であるため、分解性を直接比較することは難しく、大規模データを利用したデータ駆動研究を行うことは困難である。そこで、本研究では、RankSVMによるランキングベースの機械学習手法を用いることで、複数の実験条件の異なるデータベースを統合し、予測モデルを作成した。実際、異なる手段・条件で測定されたポリマーの分解性に関する3つのデータセットを統合したランキングを作成した。決定木を用いることで、作成したランキングモデルを分析しポリマーの分解性を支配する要因を抽出するとともに、PoLyInfoのホモポリマーデータをテストデータとして利用し、分解しやすい/分解しにくいと予測されるモノマー構造を特定した。

【お問合せ】 国立研究開発法人物質・材料研究機構  
技術開発・共用部門 材料データプラットフォーム（MDPF）運営室  
[mdpf-pr@ml.nims.go.jp](mailto:mdpf-pr@ml.nims.go.jp)

MDPF

Materials Data Platform