



## 第5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。

### 高分子材料データベースPoLyInfoと外部データベースの統合解析

【講師】 吉田亮

統計数理研究所 マテリアルズインフォマティクス研究推進センター長  
国立研究開発法人物質・材料研究機構 招聘研究員

【日時】 2025年2月14日（金） 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/d7ecb5a9-3f4d-431d-a67c-39e99fc97d30@dca88378-b099-4193-9bb0-dfd0fa1bba75>



【講演内容】

PoLyInfoは高分子材料研究における数少ない包括的なオープンデータベースの一つです。その応用範囲は広く、データ駆動型研究においてPoLyInfoは非常に有用なデータ資源です。しかしながら、PoLyInfo単体でできることに限りがあるのも事実です。そこで本セミナーでは、PoLyInfoを中心に外部データベースやラボで得られた限られた実験データの統合解析の手法、特に転移学習やマルチタスク学習について解説します。材料研究の多くのドメインでは、データ駆動型研究に必要な十分な量のデータを蓄積することが難しいのが現状です。この傾向は特に材料研究の先端領域において顕著です。そこで計算機実験やPoLyInfoの包括的なデータを用いて事前学習モデルを構築し、目標ドメインの限られたデータを用いて追加学習を行うことでモデルに新たな知識を付与します。このとき、事前学習用のデータの増大が目標ドメインのモデル性能にスケールするようにワークフローを設計することが求められます（転移学習のスケールリング則）。データ駆動型材料研究の目的は、このようにスケラブルな転移を実現するためのデータ生産プロトコルや解析ワークフローを構築することにあります。本セミナーでは、PoLyInfoを用いた液晶高分子の設計・制御や高分子相溶性予測を例に挙げながら、転移学習のスケールリング則の重要性や応用方法について解説します。

【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

