



## 第9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。

# カスケード型特徴転移モデルによる高分子物性予測モデル

【講師】 小淵 喜一

NEC (兼) 産業技術総合研究所 主任研究員



【日時】2026年7月30日（木）14:00 – 15:00

【開催方法】オンライン（Microsoft Teams）

【関連するDICEサービス】  PolyInfo

<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/fd769918-e6e2-4cc5-bcb8-  
542fa0f8d136@dca88378-b099-  
4193-9bb0-dfd0fa1bba75](https://events.teams.microsoft.com/event/fd769918-e6e2-4cc5-bcb8-542fa0f8d136@dca88378-b099-4193-9bb0-dfd0fa1bba75)



#### 【講演内容】

ポリマー材料の機械学習では、先端材料を中心にデータ蓄積が乏しく高性能なモデルを構築できない“コールドスタート問題”に加え、分子構造と分子量・添加剤情報といった異なる形式のデータを同時に扱う必要があるという“マルチモーダル化”の課題があります。今回は、これらに対応する手法として、特徴転移を用いたマルチモーダル・カスケードモデルを提案した私たちの論文を紹介します。

この論文では、提案モデルの具体的なケースとしてグラフ畳み込みニューラルネットワーク（GCN）で化学構造から抽出した特徴量を、RDKit記述子や添加剤情報などの表形式データと結合し、単一の予測モデルへ統合するアーキテクツの構築を行いました。実証において、PoLyInfoから整備したガラス転移温度（Tg）のデータセットを用いて、まずNeat Resinで事前学習させたモデルからNeat Resinの予測を行い、転移させる層の違いについて確認したのち、Compound材料へ特徴転移させました。実証の結果、正の転移が確認され、データが少データ化・偏在化しやすい材料領域などにおいて、本手法が有効なアプローチであることが示されました。

#### 【参考論文】

K. Obuchi, Y. Yahagi, K. Toyama, S. Tanaka and K. Matsui, “Multi-modal cascade feature transfer for polymer property prediction”, Machine Learning: Science and Technology, 6, 035051 (2025)

<https://doi.org/10.1088/2632-2153/ae023e>

【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 運営室  
mdpf-pr@ml.nims.go.jp

