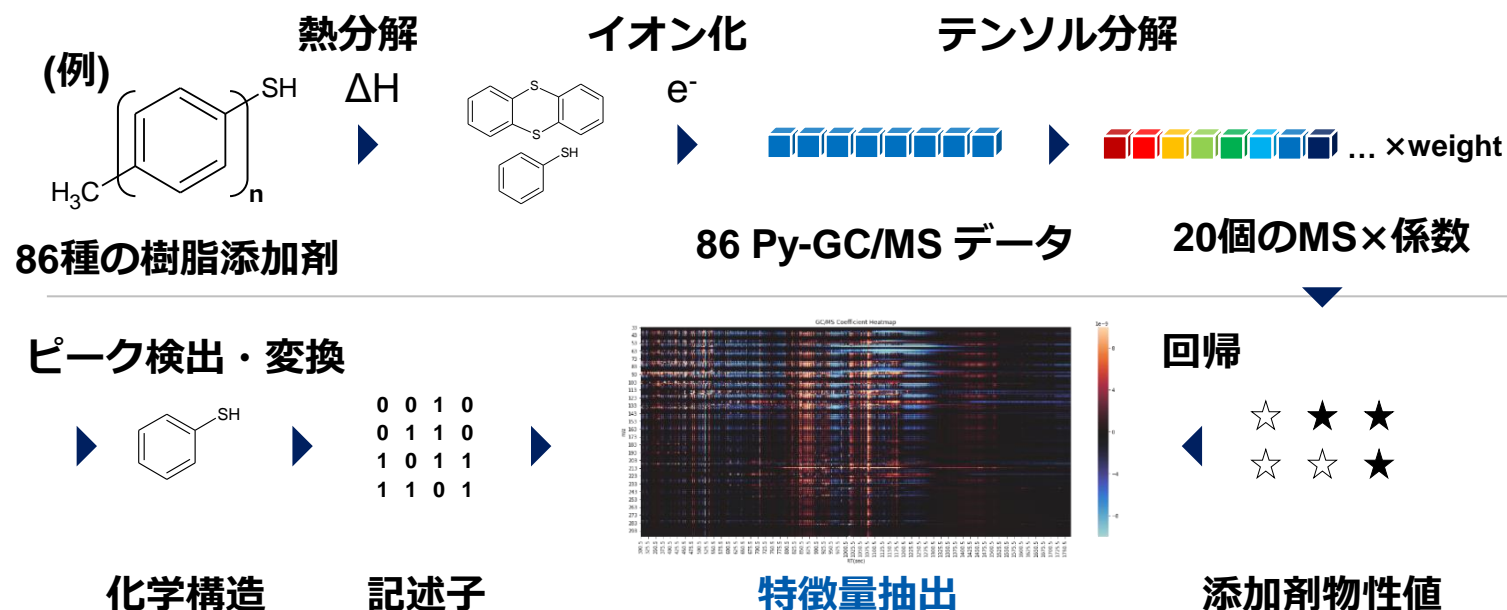


GC/MSの生データを活用したMI



天然物由来のポリマーは構造が極めて複雑である。一方で、構造は性能と密接な関係にあることから、分析を通してそれらを十分に特徴づけることが求められる。今回、熱分解GC/MSデータをテンソル分解して、物性値との重回帰分析をしたり、記述子ベクトルに変換したりすることで、特徴量を抽出した。これに基づいて、①分類および、②未知試料の既知試料からの推定が可能になった。このように分析の生データを活用することで、材料の構造に立脚したマテリアルズインフォマティクス(MI)を推進していきたいと考えている。