

論文内容の要旨

博士論文題目 Data-science for Estimating Various Properties of Polymers
Based on Monomer Unit Structure Information

(モノマー構造情報に基づいてポリマー物性を推算する情報科学に関する研究)

氏 名 山野 仁詩

(論文内容の要旨)

本研究は、データサイエンスとして、高分子のモノマーから、化学構造、原子と結合を考慮したグラフ表現、にもとづいて生成される様々な分子記述子をもとに、モノマーからポリマーの物性を予測するモデルを、様々な機械学習を活用して作成した。それぞれの変数におけるデータの分布を考慮してモデルの汎化性について検討し、予測の向上をめざした。モノマーの分子記述子からモノマーの物性を予測するのではなくポリマーの物性を予測するところが本研究の特徴である。

氏 名	山野 仁詩
-----	-------

(論文審査結果の要旨)

令和2年12月21日に開催した公聴会の結果を参考に、令和3年2月8日に本博士論文の審査を実施した。以下に述べる通り、本博士論文は、本学位申請者が、独立した研究者として研究開発活動をしていくために必要な素養を備えていることを示すものである。

山野仁詩は、本博士論文「Data-science for Estimating Various Properties of Polymers Based on Monomer Unit Structure Information (モノマー構造情報に基づいてポリマー物性を推算する情報科学に関する研究)」において、データサイエンスの応用として高分子のモノマーから、化学構造、原子と結合を考慮したグラフ表現、にもとづいて生成される様々な分子記述子をもとに、モノマーからポリマーの物性を予測することに成功した。モノマーの分子記述子からモノマーの物性を予測するのではなくポリマーの物性を予測するところが本研究の特徴である。

よって、本論文は、博士(工学)の学位論文としての価値があるものと認める。