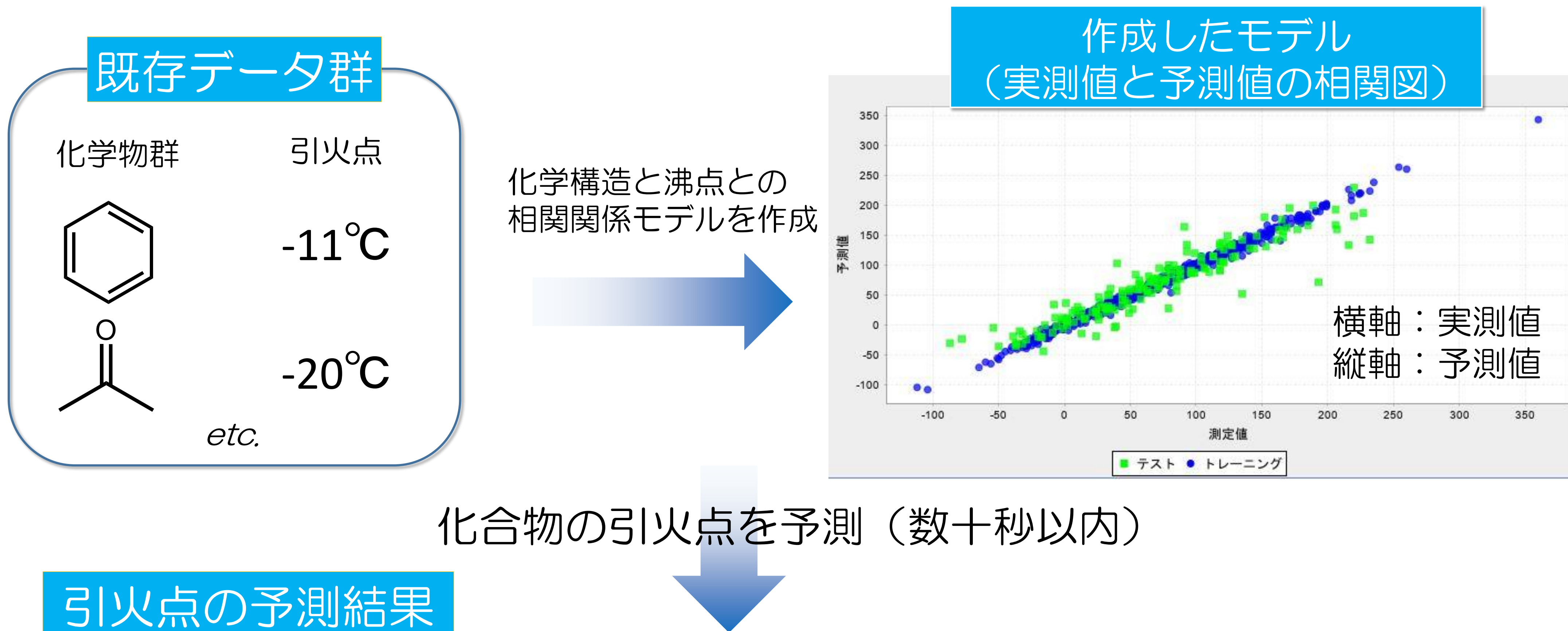


# 利用事例紹介 13

## 機械学習モデルの作成と予測 その2-1 (引火点)

機械学習を利用した定量的構造物性相関 (QSPRシステム) の検討例として、引火点に関する学習モデルの作成と予測を行いました。

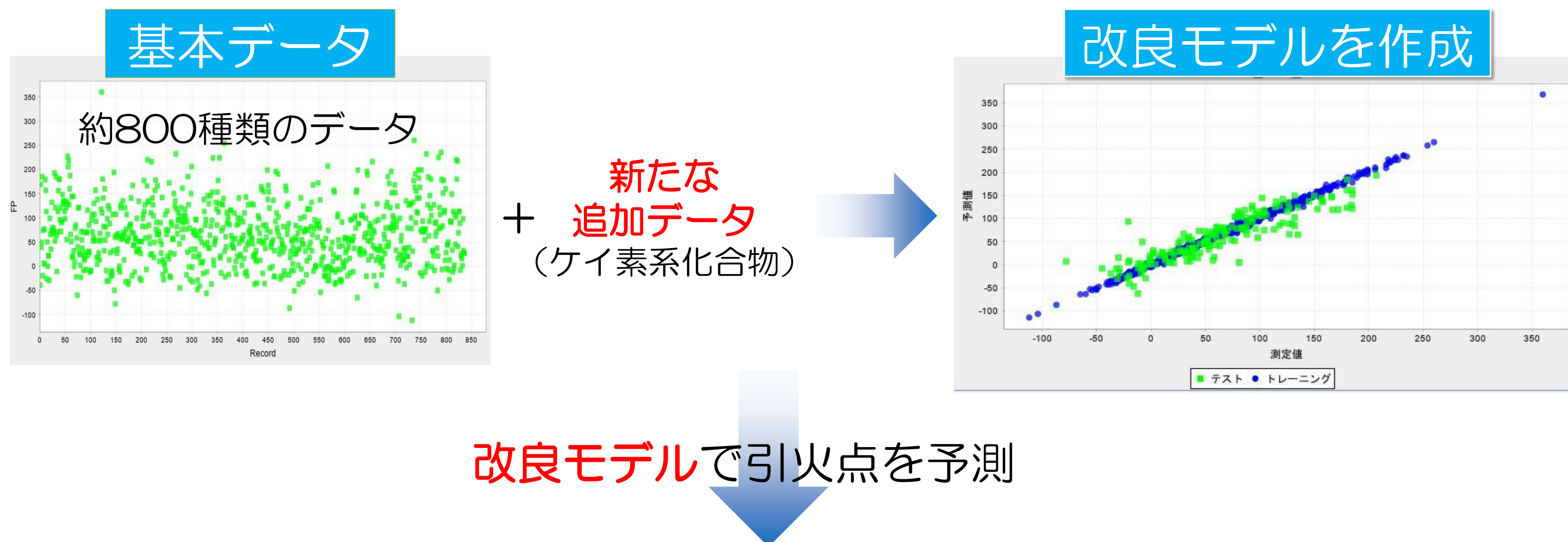


化合物	引火点		
	予測値	実測値	差
<chem>CC(C)(C)C(=O)c1ccccc1</chem>	<b>95°C</b>	<b>87°C</b>	<b>-8</b>
<chem>C=COc1ccccc1</chem>	<b>32°C</b>	<b>34°C</b>	<b>+2</b>
<chem>CCOC(C)COC(C)C</chem>	<b>105°C</b>	<b>57°C</b>	<b>-48</b>
<chem>C1OC1COCCOC(C)C</chem>	<b>118°C</b>	<b>149°C</b>	<b>+31</b>

作成したモデルで任意化合物の引火点を予測した結果、炭化水素系化合物では良好な結果が得られました。一方、ケイ素系化合物では、実測値と大きく異なる結果が得られるものもありました。

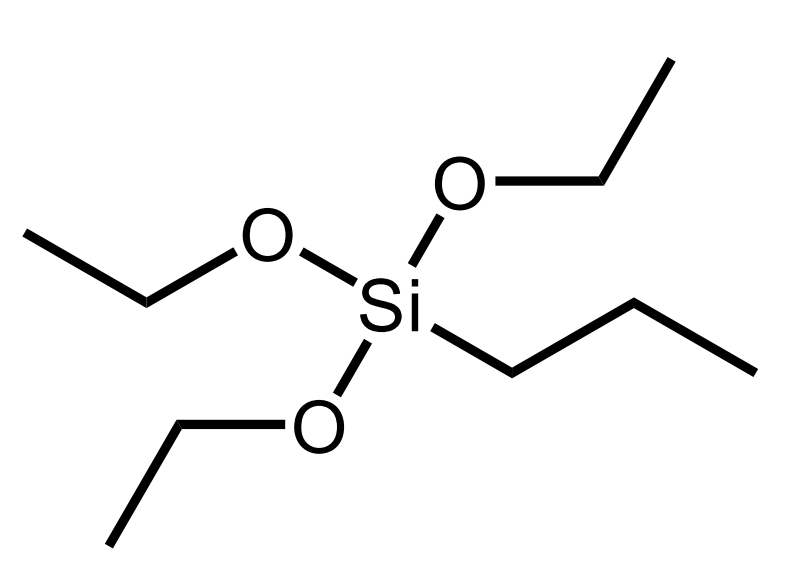
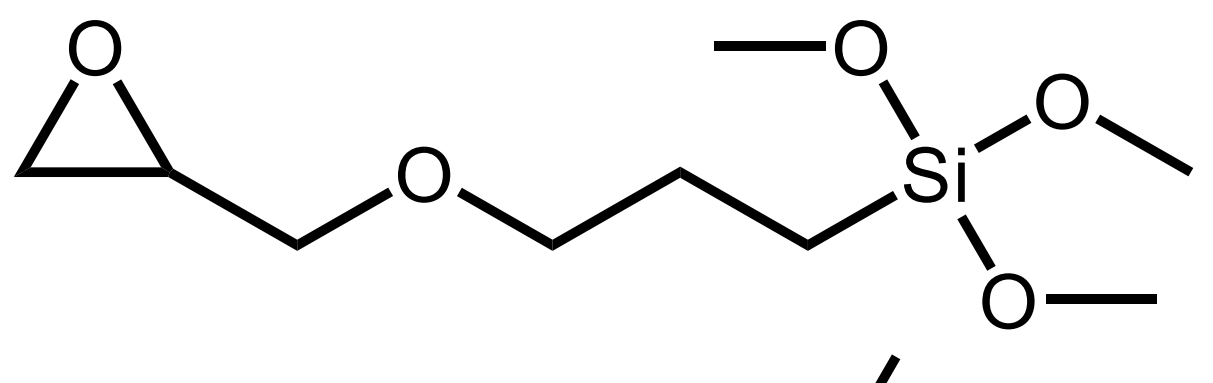
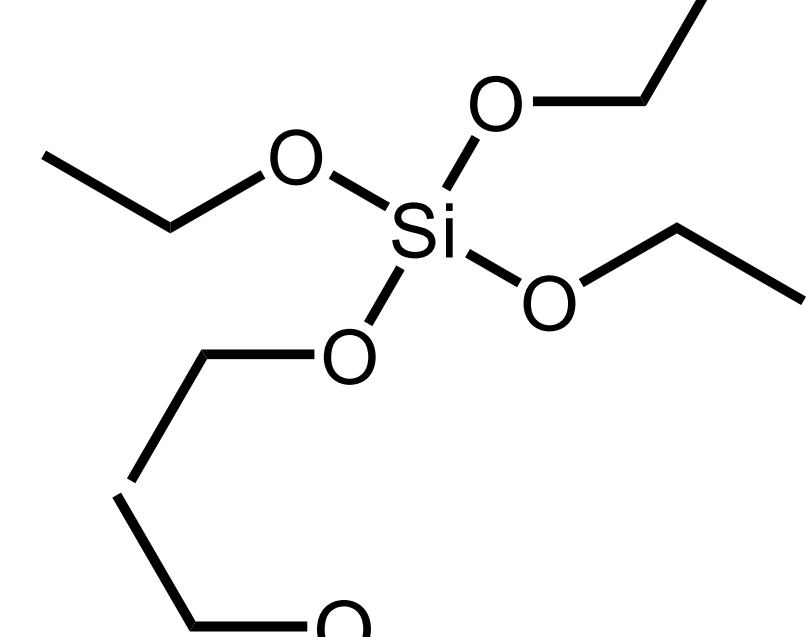
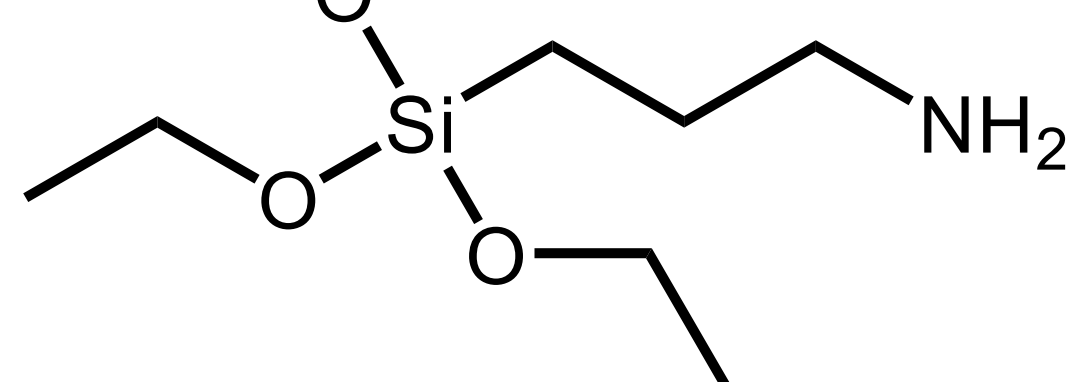
## 機械学習モデルの作成と予測 その2-2 (引火点)

前項で作成した基本モデルでは、ケイ素系化合物で予測値と実測値との乖離が確認されたため、新たにデータを（26件）追加し、改良予測モデルの作成を行いました。



### 引火点の予測結果

#### 引火点

化合物	改良モデルでの予測値 (基本モデルでの値)	実測値	差
	<b>55°C</b> (105°C)	<b>57°C</b>	<b>+2</b>
	<b>145°C</b> (118°C)	<b>149°C</b>	<b>+4</b>
	<b>67°C</b> (104°C)	<b>54°C</b>	<b>-13</b>
	<b>85°C</b> (127°C)	<b>98°C</b>	<b>+13</b>

ケイ素系化合物のデータを新たに追加した改良モデルでは、予測結果が飛躍的に向上しました。既存のデータベースに適切なデータを追加することで、予測したい化合物に適したモデルの作成が可能です。