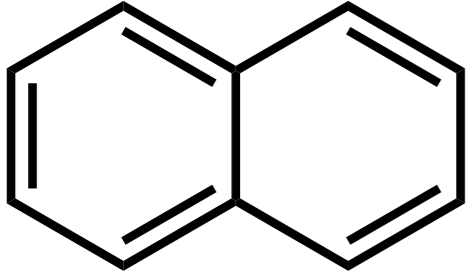
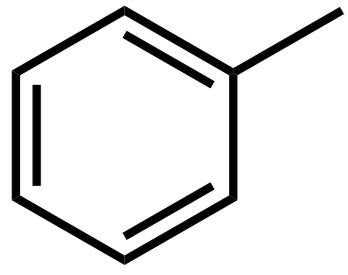


# 利用事例紹介 16

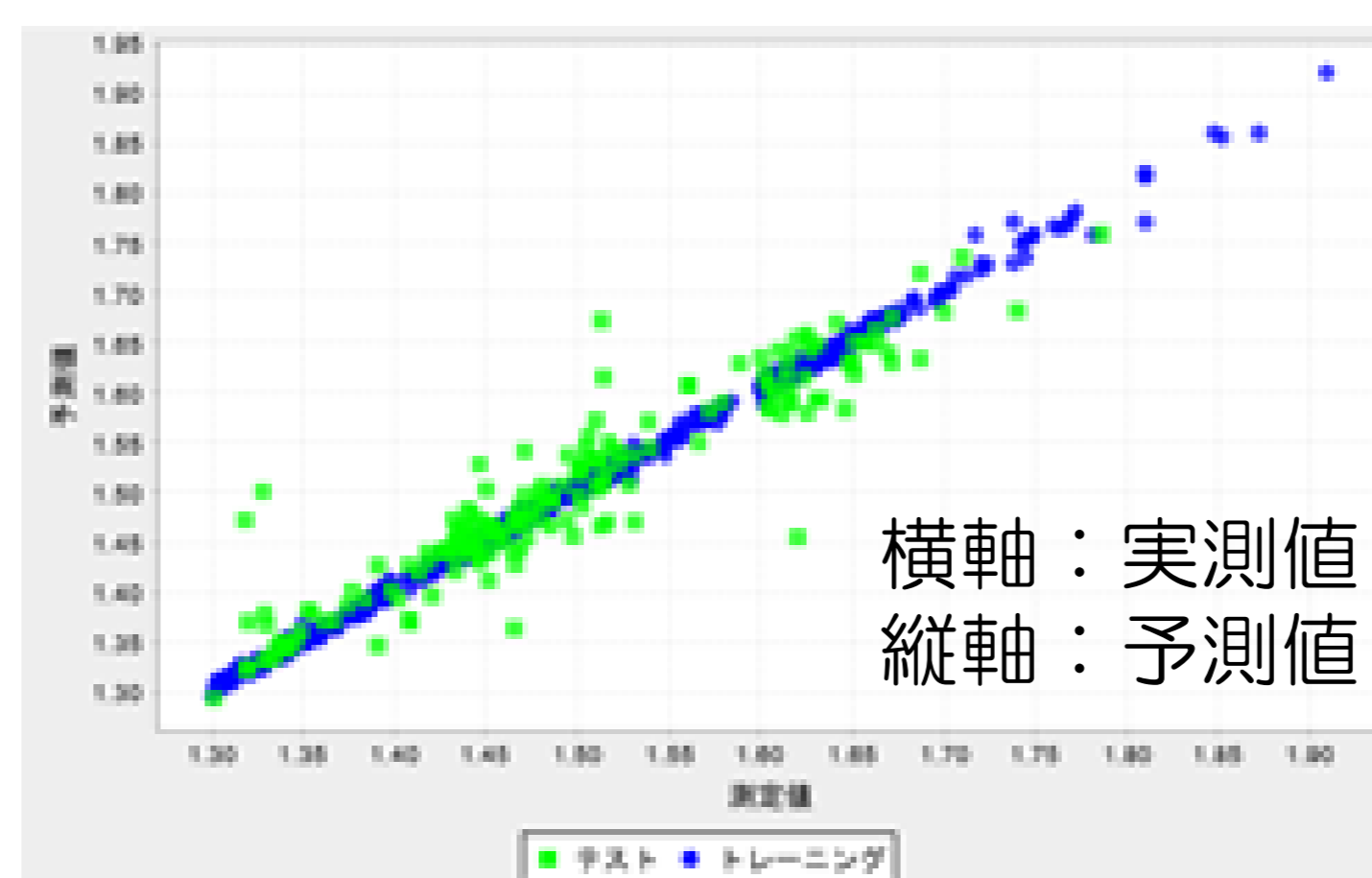
## 機械学習モデルの作成と予測その3（屈折率）

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、新たに化学構造と屈折率との相関に関する学習モデルを作成し、収集データ以外の化合物の物性予測を行いました。

### 既存データ群

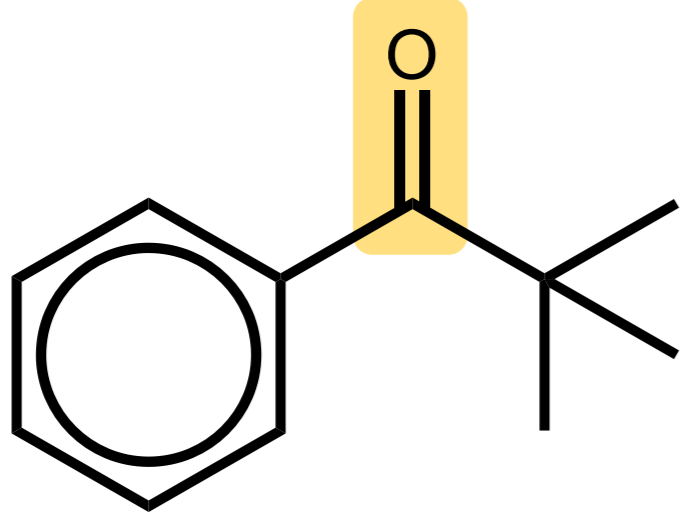
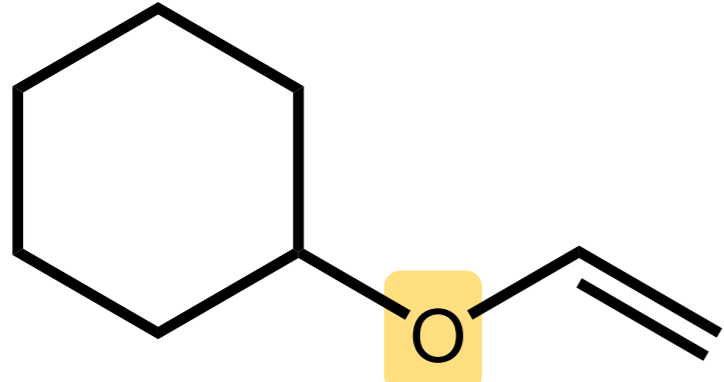
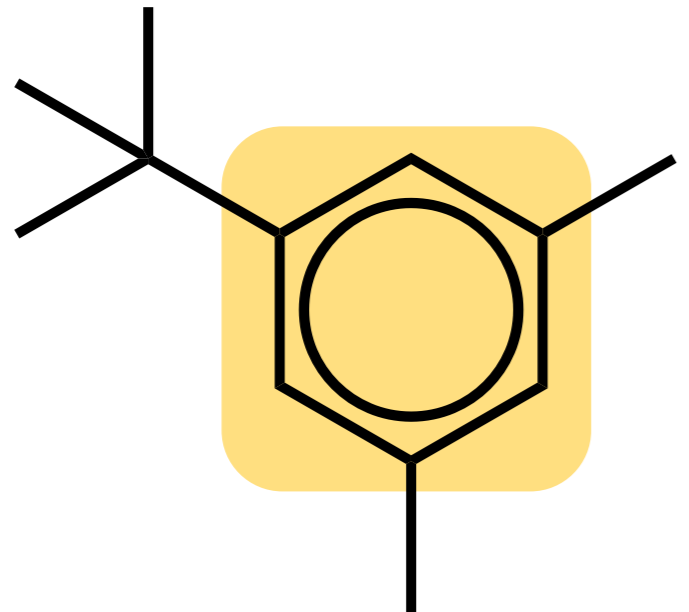
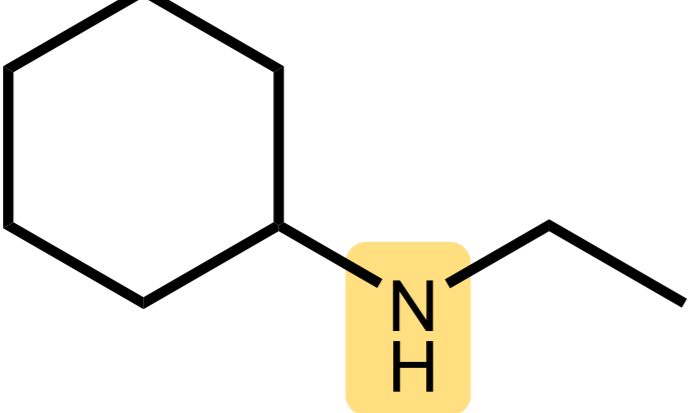
化学物群	屈折率
	1.590
	1.494
etc.	

### 作成したモデル （実測値と予測値の相関図）



既存データ群以外  
の化合物で、  
物性値を予測

### 物性値の予測結果

化合物	屈折率		差
	予測値	実測値	
	<b>1.514</b>	<b>1.508</b>	<b>+0.006</b>
	<b>1.446</b>	<b>1.454</b>	<b>-0.008</b>
	<b>1.479</b>	<b>1.495</b>	<b>-0.016</b>
	<b>1.446</b>	<b>1.452</b>	<b>-0.006</b>

作成したモデルで任意化合物の屈折率を予測した結果、ケトン、エーテル、芳香族化合物、アミンなど様々な化学構造で良好な結果が得られました。