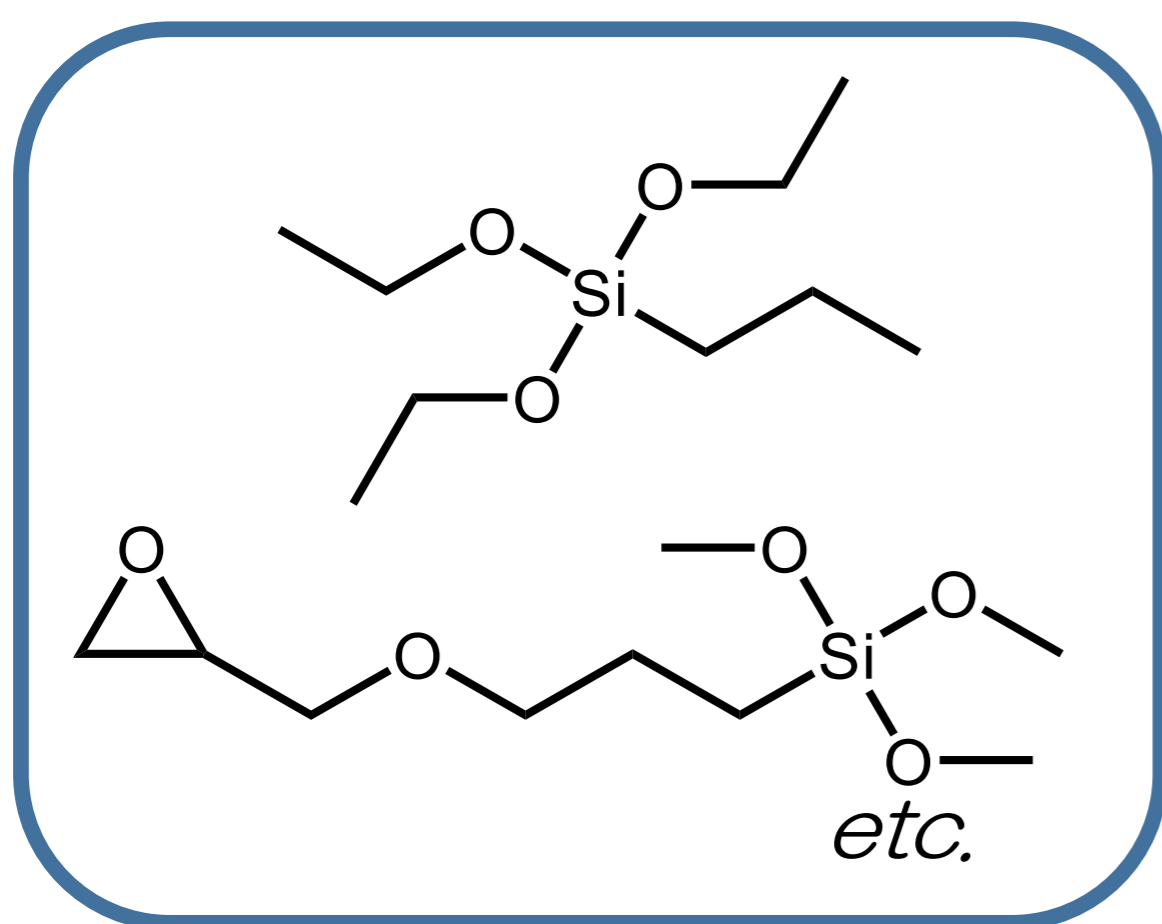


利用事例紹介 17

少ないデータ数で機械学習モデル作成（転移学習）

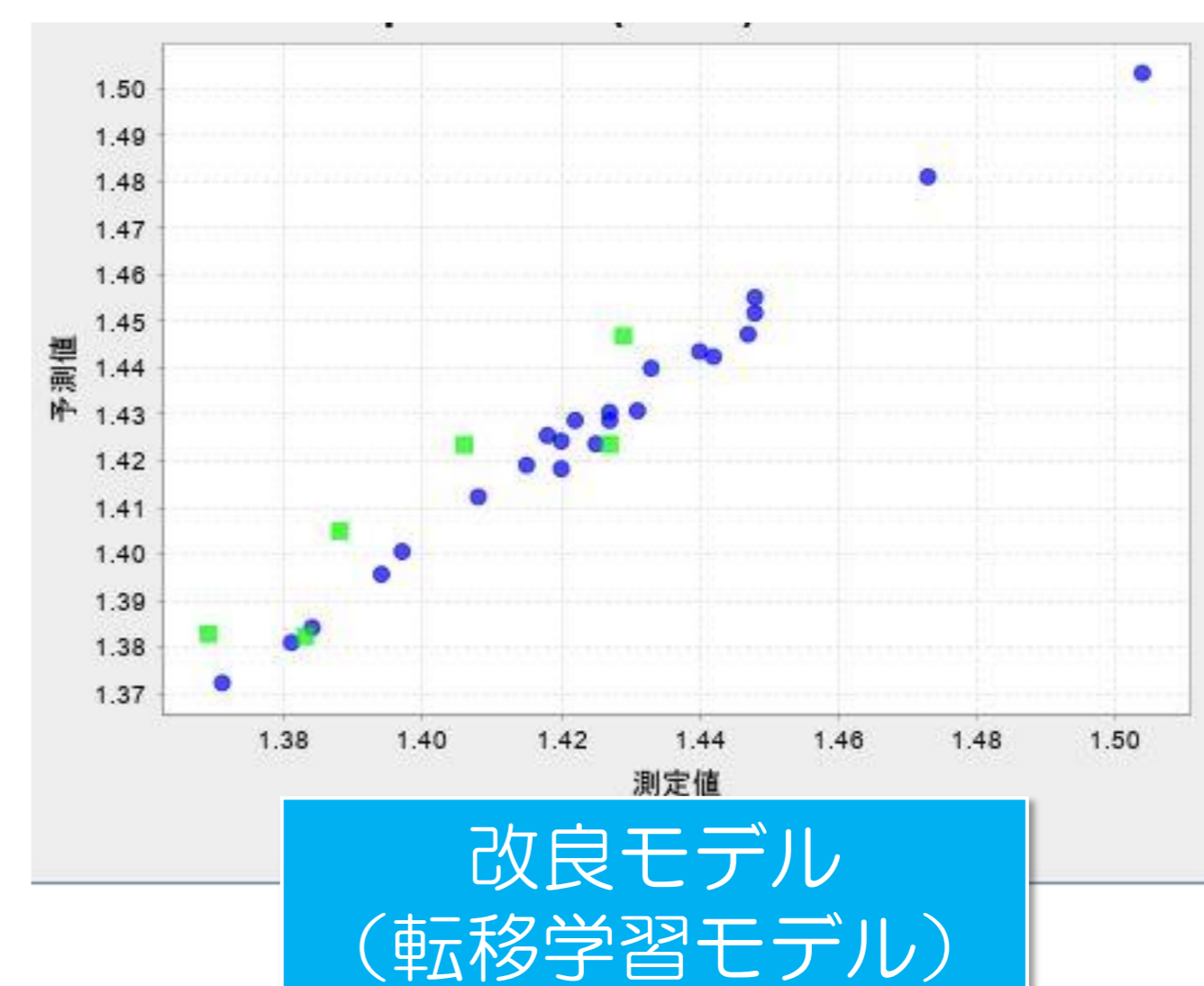
機械学習による定量的構造物性相関（QSPR）で作成した屈折率モデル（事例16：基本モデル）では、炭化水素系化合物において様々な化学構造の予測で良好な結果が得られていました。一方でケイ素系化合物では予測値と実測値との乖離が確認されるケースもありました。そこでケイ素系の新たなデータ（29件）を用いて、改良モデル（転移学習モデル）の作成を行いました。

新たなデータ(29件)



基本モデル
約800種類
のデータ

転移学習



屈折率の予測結果

屈折率

化合物	転移学習モデル (基本モデルでの値)	実測値	差 (基本モデル)
	1.470 (1.507)	1.459	-0.011 ↑ (0.048)
	1.389 (1.420)	1.352	+0.037 ↑ (0.068)
	1.389 (1.441)	1.391	-0.002 ↑ (0.050)

新たなデータに対して、基本モデルを転移学習させた「転移学習モデル」では予測精度の飛躍的な向上を確認できました。少ないデータであっても学習方法を工夫することにより良好なモデルの作成が可能です。