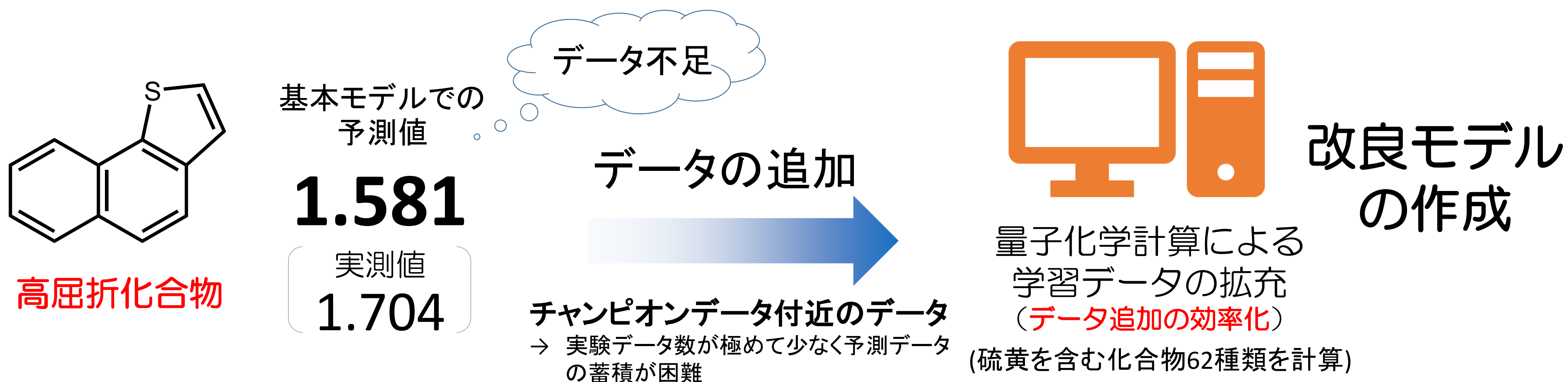


利用事例紹介 19

少ないデータでの機械学習モデル作成 2

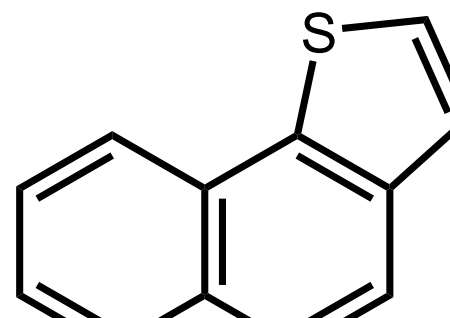
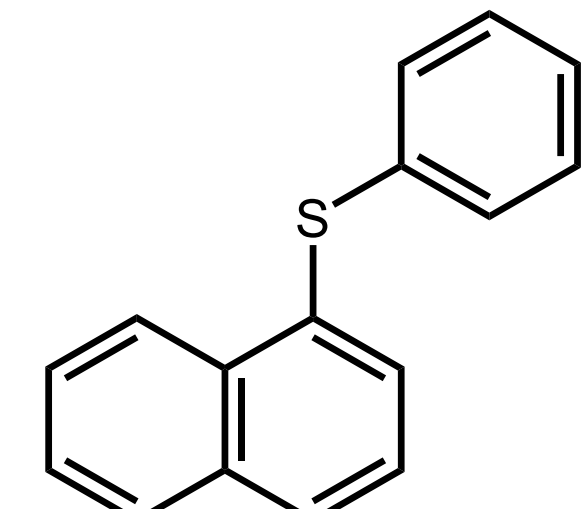
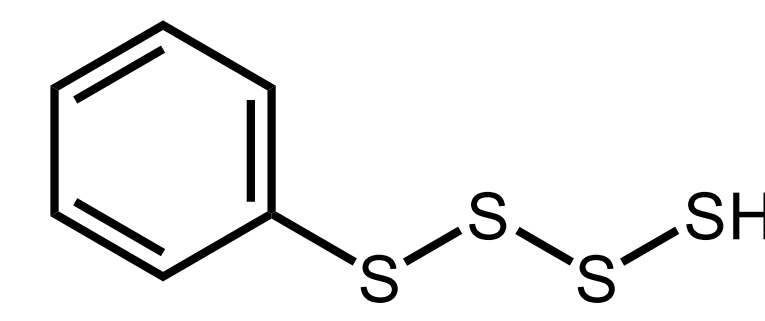
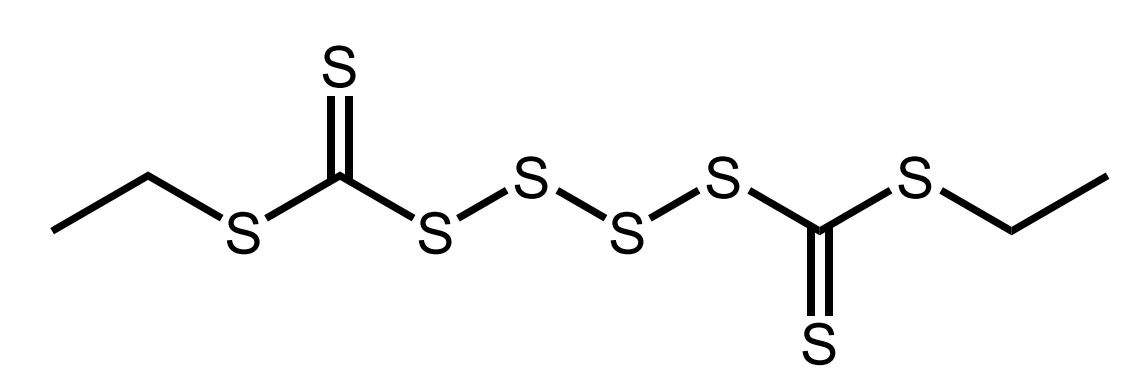
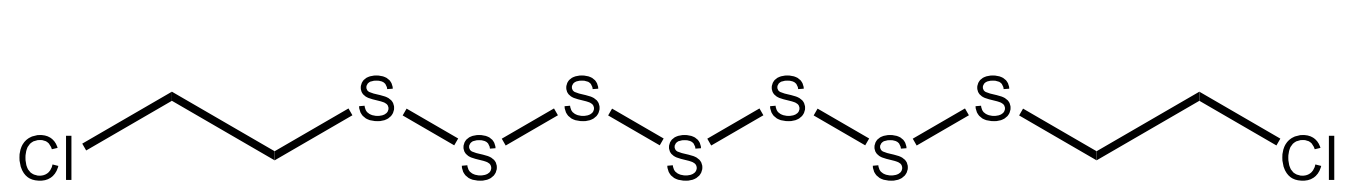
- 量子化学計算による学習用データの拡充 -
～高屈折化合物の事例～

機械学習による物性予測では、物性値の限界値付近においてデータ数が少ないため、望ましい予測結果が得られないことがあります。その対応方法の一つとして、計算機シミュレーションによる学習用データ拡充の検討を行いました。



高屈折化合物の予測結果

屈折率

化合物	改良モデル (基本モデルでの値)	実測値	差 (abs.) (基本モデル)
	1.673 (1.581)	1.704	0.031 (0.123)
	1.711 (1.566)	1.685	0.026 (0.119)
	1.679 (1.584)	1.738	0.059 (0.154)
	1.694 (1.534)	1.717	0.023 (0.183)
	1.766 (1.539)	1.740	0.026 (0.201)

実験データが少ない場合でも、シミュレーションデータを上手く活用することで、データ収集の手間を軽減しつつ、良好な予測モデルの作成が可能です。