



コンソーシアムWG活動報告

Workflow Working Group

世話役

出光興産 靱津 典夫

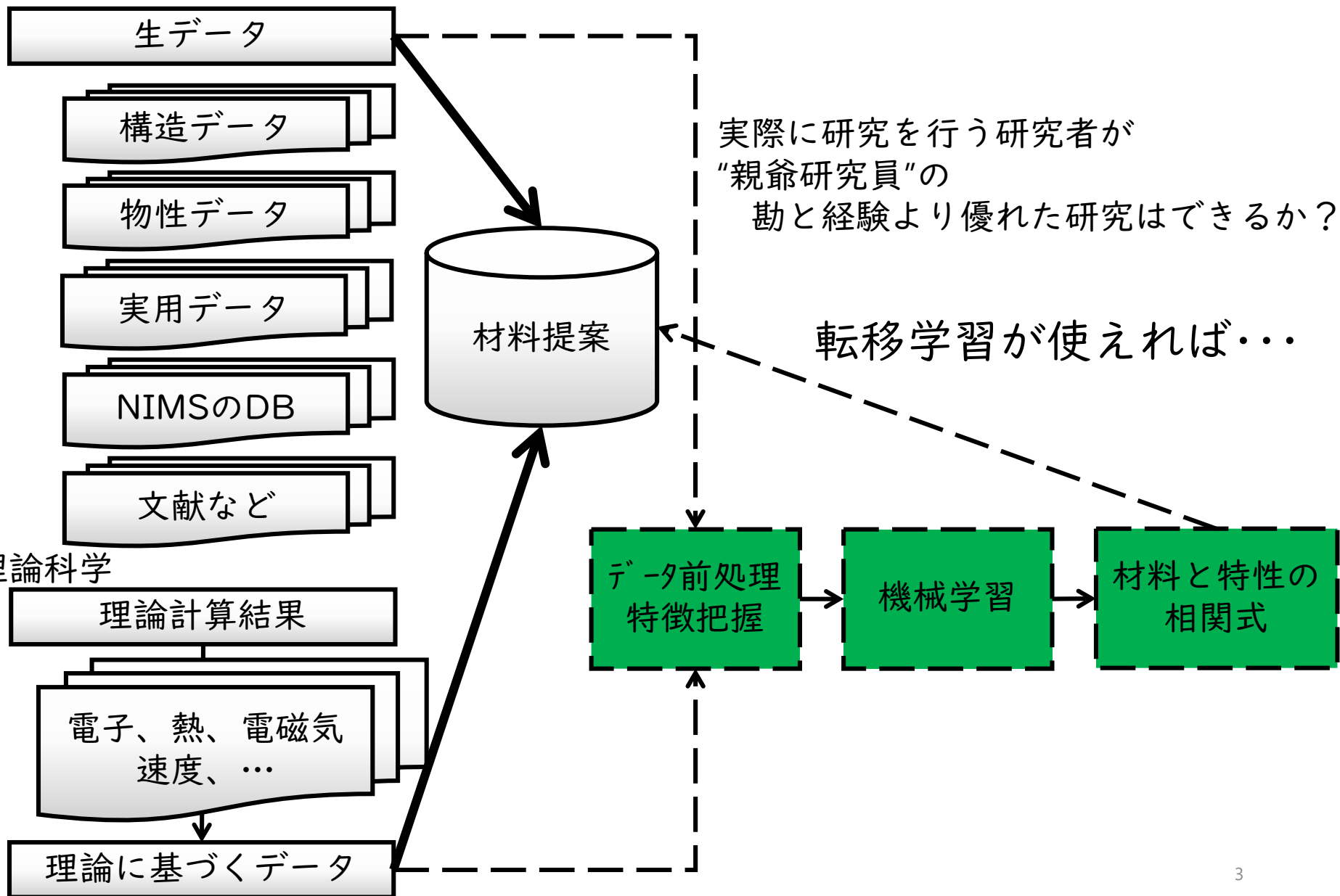
WWGメンバ - (順不同、敬称略)

小島 秀平 アビームコンサルティング
永野 佑 アビームコンサルティング
中曽根 大輔 東洋インキSCホールディングス
小家石 龍哉 ダイキョーニシカワ
宮崎 貴史 TDK
梶田 智宏 TDK
池端 久貴 旭化成
武井 祐樹 旭化成
宇佐見 護 アスムス
鞆津 典夫 出光興産
高嶋 明人 出光興産
藤田 健宏 出光興産
植松 大輔 デンソー
祖父江 進 デンソー
本多 淳史 村田製作所
渡邊 唯人 村田製作所
大西 伊久雄 クラレ
大田 佳実 クラレ
押山 智寛 コニカミノルタ
池田 祐子 コニカミノルタ
加川 哲哉 コニカミノルタ
奥山 倫弘 コニカミノルタ
狩野 恒一 コベルコ科研
石田 雅也 住友化学
有田 通朗 住友化学
合田 丈範 凸版印刷
清水 美絵 凸版印刷
高橋 広己 三井金属鉱業
伊藤 和輝 リガク
岩方 裕一 リンテック株式会社
大熊 孝広 株式会社ブリヂストン
成澤 春彦 東洋紡

佐原 豪 太陽ホールディングス
鈴木 拓実 太陽ホールディングス
大沼 敏治 電力中央研究所
中村 馨 電力中央研究所
島津 彰 日東電工
青木 祐太 日東電工
福山 芳人 日東電工
前田 和久 日東電工
赤塚 威夫 日本触媒
松尾 裕樹 日本触媒
的埜 旭隼 日本触媒
松尾 裕樹 日本触媒
井野 雄介 富士フィルム
長島 大 住友ベークライト
谷中 直子 信越化学
大橋 健 信越化学
今泉 俊介 トヨタ自動車
佐藤 正俊 トヨタ自動車
佐藤 弘一 株式会社ブリヂストン
福島 里佳 株式会社ブリヂストン
山口 健志 三菱マテリアル
酒井 章雄 三菱マテリアル
宮田 怜 デンカ
西田 靖孝 東芝研究開発センター
千葉 啓貴 日産自動車
向田 志保 三井化学
中原 真希 三井化学
神尾 和教 三井化学
岩壁 幸市 三井化学
小坂 誠二郎 三井化学
渡久平 俊樹 三井化学
柿ヶ野 武明 三井化学

32社
65名

計算科学利用研究



- A) 筑波に行くこと
 - 何を確認できるか
- B) サーバに触ること
 - どのような知識が無いとデータをハンドリングできないか
 - LINUXは使ったことはある(ない)が大丈夫か?
- C) Python
 - 必要なスクリプトができるか
- D) データを見てクレンジング
 - 多くのデータが出てくるが必要なデータを選別できるか
 - 自分のデータを足し合わせて、現場で解析できるか
- E) 研究に役立てる

データを持ち出さずに検討するため

- NIMSのサーバに下記ソフトを導入いただいた
- リモートアクセスが可能 (一部機能不可)

モジュール名	バージョン	URL
RDkit	2017.09.1	https://www.rdkit.org/
XenonPy	0.3.2	https://github.com/yoshida-lab/XenonPy
DeepChem	2.1.0	https://deepchem.io/
mordred	1.1.1	https://github.com/mordred-descriptor/mordred
Optuna	0.9.0	https://github.com/optuna/optuna
Keras	2.2.4	https://keras.io/
XGBoost	0.82	https://xgboost.readthedocs.io/en/latest/
LightGBM	2.2.3	https://github.com/Microsoft/LightGBM
DEAP	1.2.2	https://github.com/DEAP/deap
CatBoost	0.13.1	https://tech.yandex.com/catboost/

NIMSのデータベースを活用して検討 詳細後ほど

データベースを活用する際の課題

- データのクレンジング
 - 単位系に差、誤記 ← NIMSにて改善
 - 計測条件差 文字列情報の活用(計測条件、著者)
 - 文献からの複数データ取りだし時の文献読み込み

要検討課題

- 文字情報の活用
- 各種アルゴリズムを用いたモデルの構築
- 分子構造の表記方法
 - 共重合をどう表現するかは未決
 - 規則性(結晶化度)、分子量などの物性に影響がある特性
- 複合材料の解析方法
 - 材料特性
 - 界面制御

参加者の意見概要

●機械学習の有用性・データ蓄積は重要！

- 今回の企画はタイムリーで今後の研究活動には必要
- 今後も手法の獲得、情報の交換を行っていく必要性がある
- 当初目的はWG参加者全体の半数以上が達成
 - 無機Gの満足度が高い(筑波でのXenonpy講習を実施)
 - MIを始められた、活用できた、課題・進め方を共有できた
 - ネットワークができたこと、意見交換ができたこと
 - &× “**ポタンポチ**”ではなく、実際には困難であることが分かった
 - &× “**勘**”を定量的に表現できる。理論解析も重要
 - × データアクセスや持ち出し不可が課題となった
 - × 人材不足、MI活用Lv不足を感じた
 - × **転移学習が十分できずDPF活用不十分**
- DPFへの要望
 - データの持つ出し不可、求めるデータの不足が課題
 - DB充実、使いやすさ改善を要望(特性値不足、データ点数不足)
 - 解析結果を自社で活用したいので制約は少なくしてほしい
 - 継続利用希望 有機80%、無機60% データを持出したい
- 機械学習を活用するための取っ掛かりとなる義務と責任と成果を問わない情報交換ネットワークを継続し、パートナーシップ等産学連携に

謝辞

- 大学共同利用機関法人情報・システム研究機構
統計数理研究所

吉田亮先生、研究室の皆様

- 物質・材料研究機構の皆様
- 科学技術振興機構の皆様

ご指導、ご鞭撻いただきありがとうございました。
DPFを活用した研究開発の道筋がつかめました。
今後の研究開発の新たな方法を修得いたしました。
お礼申し上げます。

Workflow Working Group 一同



有機Gと無機Gの検討結果

2020年2月19日

Mi2i最終報告会@東京都千代田区

コンソーシアム活動報告

WWG（ワークフロー・ワーキンググループ）
無機グループの活動報告

株式会社村田製作所 渡邊唯人



無機材料データベース
AtomWork-adv

機械学習
転移学習

新材料発見



Step 1

Step 2

WWG活動に期待すること

- 技術の獲得
- ノウハウの蓄積
- DPF（データプラットフォーム）やNIMS保有DBの利用価値判断

他の文献

APIで取得できる情報

Details of selected material

NaCl	Structure type	Pearson symbol	Space group	No.
NaCl	NaCl	cF8	Fm-3m	225

*Standardized

[J. Phys. Soc. Jpn. 1983.52.3506-3513.Yamashita J., Asano S.](#)

Preparation No data.
 Synthesis No data.
 Starting materials No data.

[Crystal Structure](#) | [X-ray Diffraction](#) | [Properties](#) | [Calculated Electronic Structure](#)

[Crystal Structure \(Published\)](#)
[Niggli-reduced cell](#)

物性データ

Crystallographic data

Cell parameters: a = 0.40567 nm, b = 0.40567 nm, c = 0.40567 nm,
 $\alpha = 60^\circ$, $\beta = 60^\circ$, $\gamma = 60^\circ$
 Cell volume 0.04721 nm³

[Crystal Structure \(Standardized\)](#)

Crystallographic data

Cell parameters: a = 0.5737 nm, b = 0.5737 nm, c = 0.5737 nm,
 $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 90^\circ$
 Cell volume 0.1888 nm³
 Cell density (calculated) 2.06 Mg m⁻³

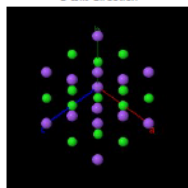
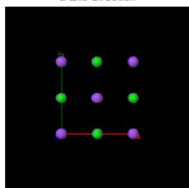
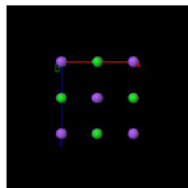
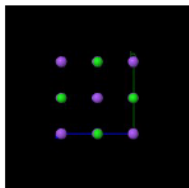
Atom coordinates

No	Site notation	Atom	Multiplicity	Wyckoff	Site symmetry	x	y	z	Occupancy
1	Cl	Cl	4	b	m-3m	1/2	1/2	1/2	1.0
2	Na	Na	4	a	m-3m	0	0	0	1.0

Transition from Published Data to Standardized Data

Transition: No data.

[Download crystal structure data\(CIF\)](#)



[Control with mouse](#)

All | [Crystal Structure](#) | [X-ray Diffraction](#) | [Properties](#)

List of materials and references

1. NaCl (J. Phys. Soc. Jpn., 1983, 52, 3506-3513)
2. NaCl (Solid State Commun., 1979, 31, 635-637)
3. NaCl (J. Appl. Phys., 1973, 44, 1475-1479)
4. NaCl (J. Appl. Phys., 1972, 43, 1432-1436)
5. NaCl (J. Appl. Phys., 1972, 43, 4799-4800)
6. NaCl (High Temp. - High Pressures 1972, 4, 707-711)
7. NaCl (J. Appl. Phys., 1968, 39, 319-325)
8. NaCl (Acta Crystallogr., 1967, 22, 607-609)
9. NaCl (J. Appl. Phys., 1967, 38, 772-776)
10. NaCl (Acta Crystallogr., 1965, 18, 926-932)
11. NaCl (Acta Crystallogr., 1965, 18, 926-932)
12. NaCl (Acta Crystallogr., 1965, 18, 926-932)
13. NaCl (C. R. Hebd. Seances Acad. Sci., 1961, 253, 2381-2383)
14. NaCl (Acta Crystallogr., 1952, 5, 266-268)
15. NaCl (Acta Crystallogr., 1952, 5, 711-722)
16. NaCl (Bull. Soc. Chim. Fr., 1929, 45, 1002-1008)
17. NaCl (C. R. Hebd. Seances Acad. Sci., 1925, 180, 2050-2052)
18. NaCl (Proc. R. Soc. London, Ser. A 1914, 89, 468-489)

History of selected materials and phase diagrams

[NaCl \(J. Phys. Soc. Jpn. 1983.52.3506-3513\)](#)

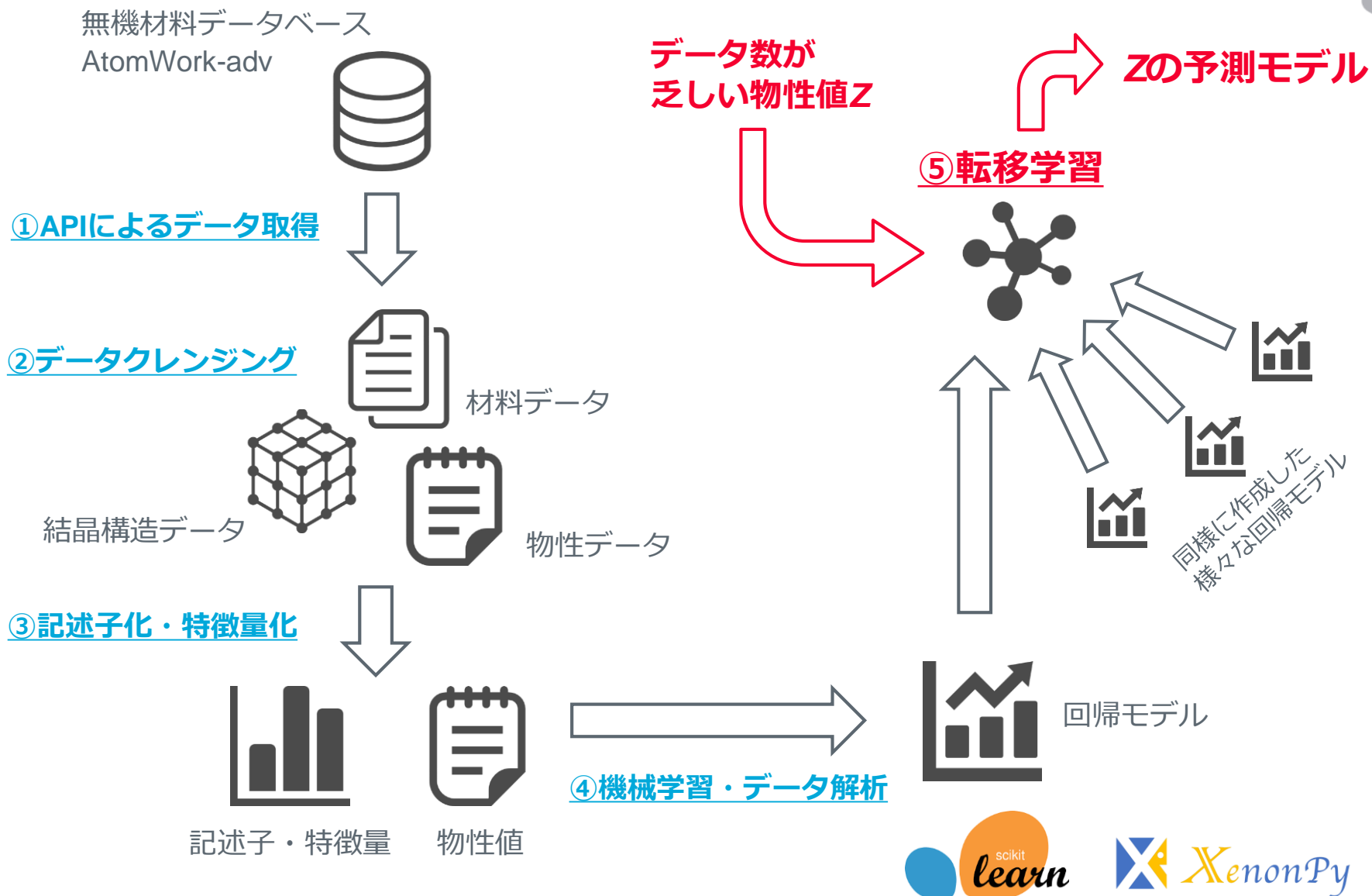
```

{
  "materials":
  {
    "material_id": "*****",
    "chemical_formula": "NaCl"
  },
  "space_group": "Fm-3m",
  "property_info":
  {
    "density": 2.06,
    "melting_point": 800
  },
}
    
```

結晶構造データ

[Back](#)

要素技術・開発項目



①APIによるデータ取得

表形式に変換

chemical_formula	condition_description	material_id	remark	source_reference	chemical_system	
0	SmS	NaN	8590534593	approximate value	Spychiger H., Kaldis E., Jilek E. (1982). Anomalous valence change in the Sm ₃ S ₄ -Sm ₂ S ₃ and Ce ₃ S ₄ -Ce ₂ S ₃ systems. Valence Instab., Proc. Int. Conf., , 583-586.	S-Sm http://api/v1/substai
1	Sm3S4	NaN	8590534594	NaN	Spychiger H., Kaldis E., Jilek E. (1982). Anomalous valence change in the Sm ₃ S ₄ -Sm ₂ S ₃ and Ce ₃ S ₄ -Ce ₂ S ₃ systems. Valence Instab., Proc. Int. Conf., , 583-586.	S-Sm http://api/v1/substai
2	Sm2.87S4	NaN	8590534595	NaN	Spychiger H., Kaldis E., Jilek E. (1982). Anomalous valence change in the Sm ₃ S ₄ -Sm ₂ S ₃ and Ce ₃ S ₄ -Ce ₂ S ₃ systems. Valence Instab., Proc. Int. Conf., , 583-586.	S-Sm http://api/v1/substai
3	AgI	NaN	8590534611	NaN	Wuensch B.J. (1992). Silver and Copper Fast-Ion Conductors with Simple Anion Packings: Cation Distributions, Bonding, and Transport Behavior. Solid State Ionics, Proc. Symp. A2 Int. Conf. Adv. Mater., , 291-313.	Ag-I http://api/v1/substai

_symbol	space_group	space_group_number	structure_type	substance_id	substance_name	symbol	unit	value	cif_info
cF8	Fm-3m	225.0	NaCl	3343500333537739042	NaN	T_{fus}	K	2573	not-rep and not-cif
cI28	I-43d	220.0	Th3P4	6741949404427555462	NaN	T_{fus}	K	2223	./50105_cif/1_rep_4295516405.cif
cI28	I-43d	220.0	Th3P4	8170809860023017852	NaN	T_{fus}	K	2043	./50105_cif/2_rep_4295498769.cif
cI38	Im-3m	229.0	AgI	1853726031512691741	NaN	T_{fus}	K	828	./50105_cif/3_rep_4295509224.cif

②データクレンジング

- **結晶構造データ**

元素にない表記を削除

サイト占有率が100%でないものは削除

- **物性データ**

数値でないデータを検出して数値化するスクリプトの作成

html形式	8.7 10 ²	⇒	870
誤差表記	1050 (50)		1050

ヒストグラムで異常なデータがないか確認

異常なデータに対しては、単位やRemarkで素性を確認して削除

課題

- 異常データに関して、無機グループ内やNIMSとの共有が不十分であった
- 異常データがないか、DB内の調査の実施を計画していたが、実施できなかった

③記述子化・特徴量化

- **XenonPyの利用**



結晶構造（150次元）と組成（290次元）の440次元の特徴量を作成

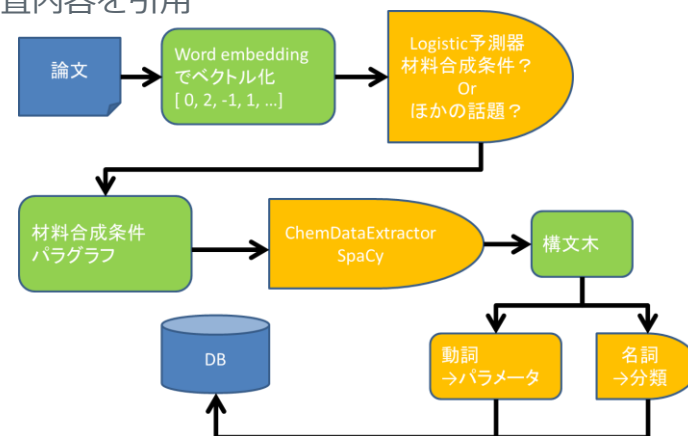
- **Remarkの文字情報を数値データへエンコード** 東芝 西田靖孝様の実施結果を引用

```
Counter({'from': 19, 'nan': 11, 'measur': 10, 'magnet': 8, 'inform': 7, 'taken': 7, 'fig': 7, 'squid': 2, 'nmr': 2, 'under': 2, 'the': 2, '10': 2, 'low': 2, 'temperatur': 2})
```

- **文字情報の特徴量化検討** 富士フィルム 井野雄介様の調査内容を引用

テキストマイニングの文献調査

E. Kim et al., *Chem. Mater.* 2017, 29, 21, 9436-9444



課題

- Remark、実験条件の検討はできたが、特徴量に落とし込めなかった
- テンソル量の取り扱いの検討ができなかった

⇒ようやく機械学習やデータ解析を行うための数値データが得られた

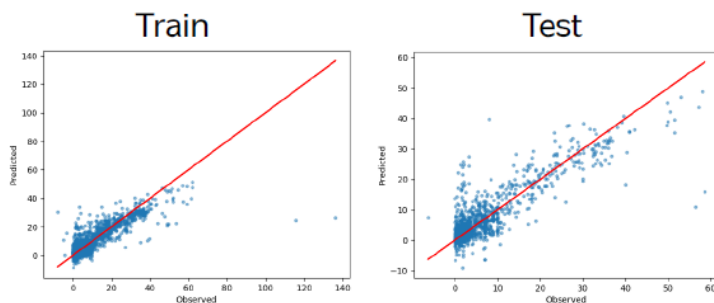


<磁気モーメント>



全データ数5906からデータクレンジング→データ数3351で学習
学習(train)と予測(test)を7:3で分離して実施

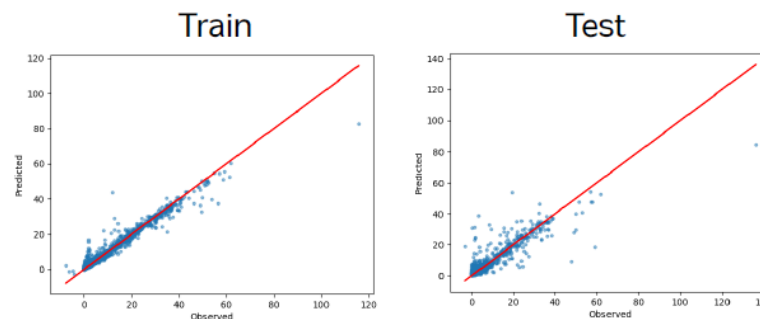
【線形回帰】



MAE 3.106	MAE 3.473
MSE 29.659	MSE 28.211
RMSE 5.446	RMSE 5.311
R2 0.645	R2 0.691

5-fold CV score: 0.61

【ランダムフォレスト回帰】



MAE 0.867	MAE 2.272
MSE 3.775	MSE 23.483
RMSE 1.943	RMSE 4.846
R2 0.961	R2 0.751

5-fold CV score: 0.80

東芝 西田靖孝様の実施結果を引用

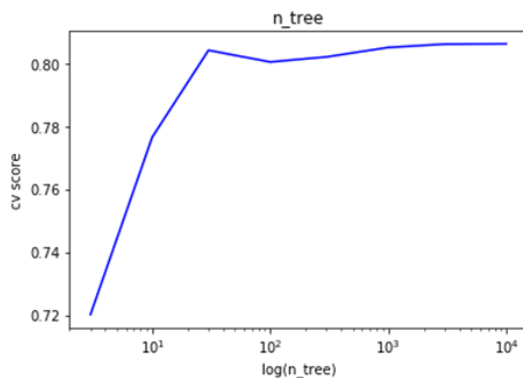
<融点>



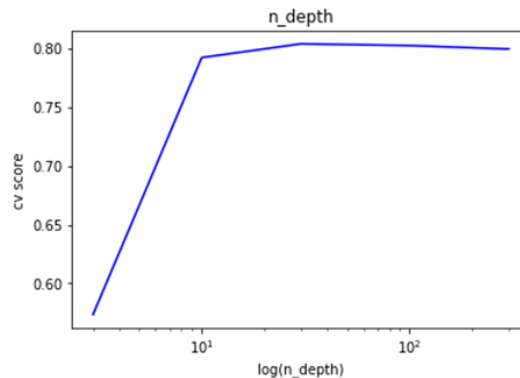
ランダムフォレスト回帰

データ数 : 1827
特徴量の次元 : 440

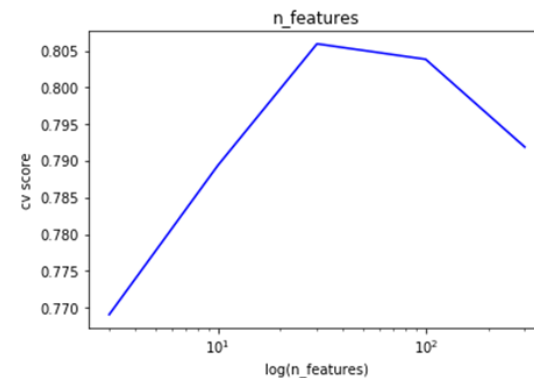
決定木 (弱学習器) の数



決定木の深さ



サンプリング時の特徴量の最大数



決定木の本数は約100、決定木の深さは約20、サンプリング時の特徴量の最大数は次元数の平方根程度に最適なハイパーパラメータがありそう

村田製作所 渡邊唯人の実施結果を引用

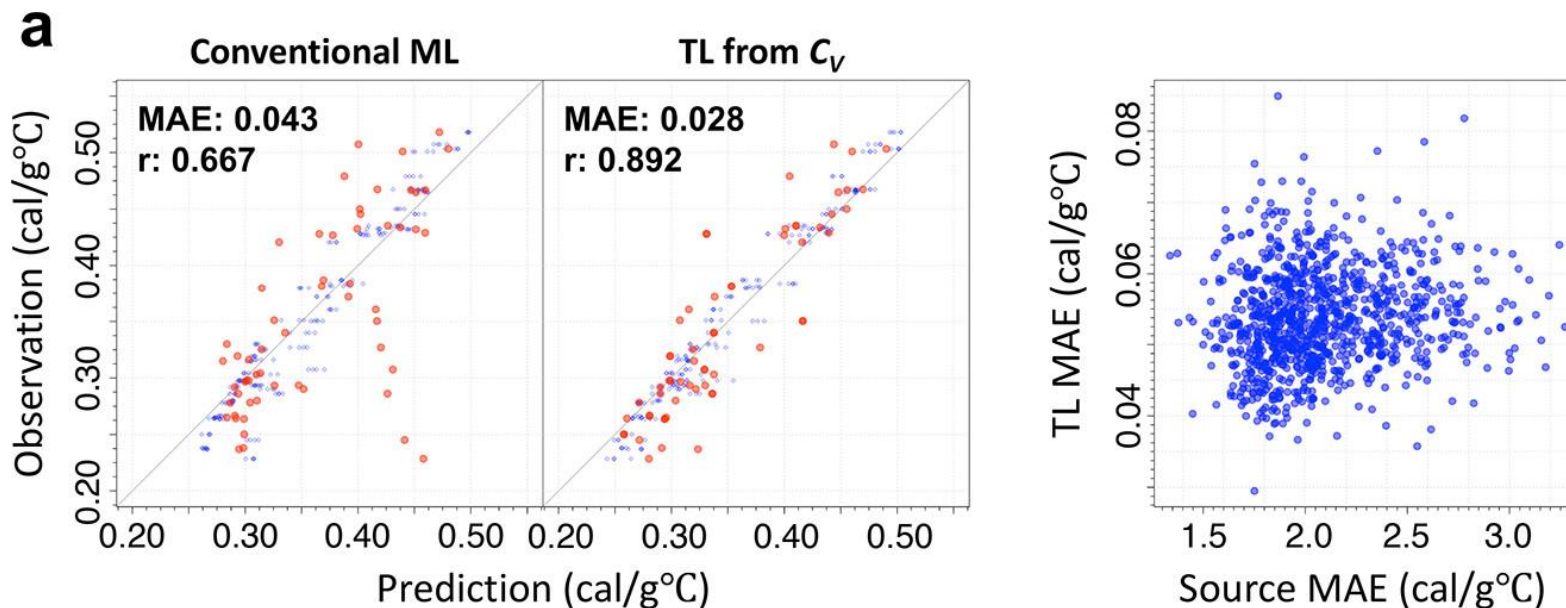
ショットガン転移学習



有機低分子の定積比熱



ポリマーの定圧比熱

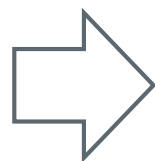


吉田亮先生の論文のFigure 2a

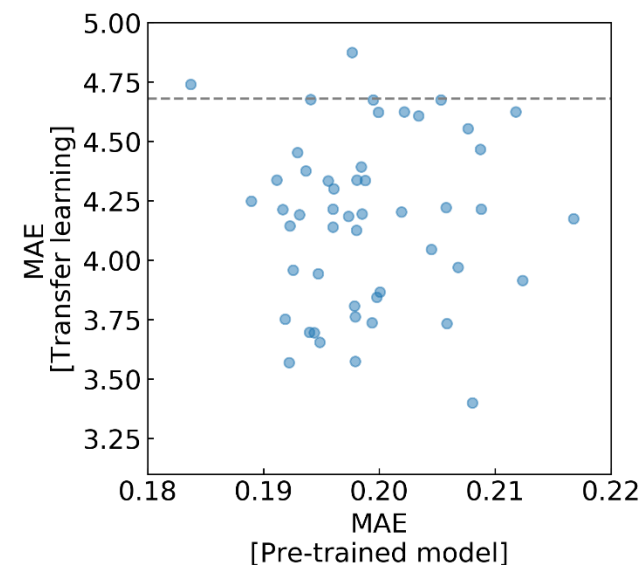
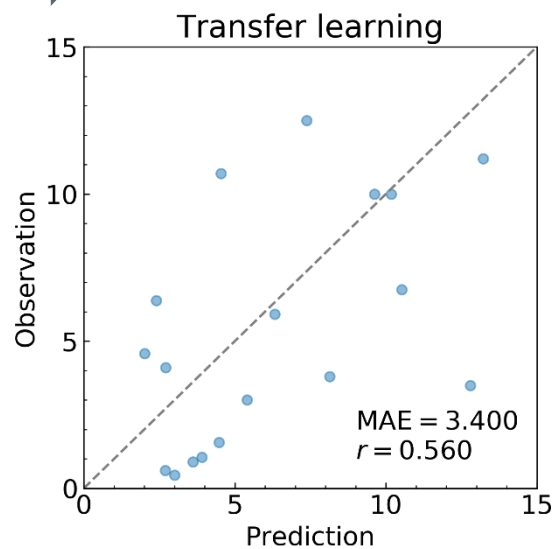
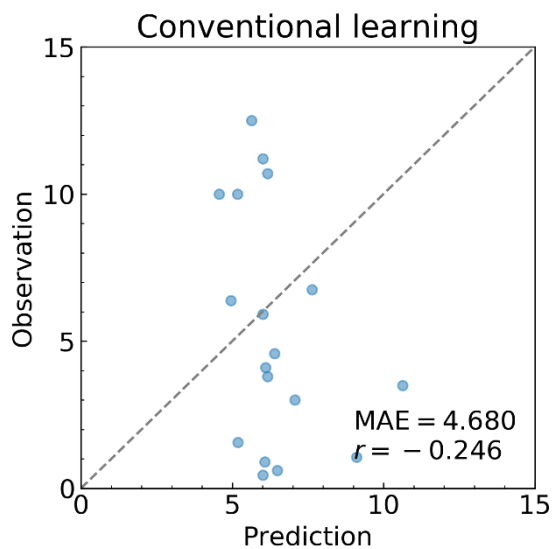
H. Yamada et al., *ACS Cent. Sci.* 2019, 5, 10, 1717-1730

⑤ 転移学習

定積比熱 (約5,500件)



熱伝導率 (1,200件のうち20件をサンプリング)



課題

- 前頁の論文のように1000個のソースモデルからの転移学習を試みたかったが、DPFのマシンスペックの制限から、50個のソースモデルしか作成できなかった
- 様々な物性からの転移学習を試みたかったが、APIの回数制限のため物性データの収集にも限界があった

村田製作所 本多淳史の実施結果を引用

■ 要望・思い

- 転移学習について、通常のランダムフォレスト回帰よりも精度向上する可能性を確認できたが、もっと様々な物性やモデルで検証したいという思いが残った
- AtomWork-Advのデータ抽出からデータ解析・転移学習までのワークフローが完成し、新材料発見に役立つか検証できる下地が整ったところで、MI²ⁱが終了してしまうのは残念である
- WWG活動で作成したスクリプトはグループ内で共有して社内に持ち帰りたい
- 作成した予測モデルは持ち出せないという規約変更があったが、NIMSと企業の双方にとって有益な取り扱い方を模索していきたい

■ Mi²ⁱへの感謝

- 新技術であるデータ科学やPythonの教育をしていただいた
- API環境、Jupyter環境、データ解析・機械学習環境を整備いただいた
- VPN接続に関する要望に応じていただいた
- スムーズに活動が進められるように会議の準備などに手厚く支援いただいた

MI²I WWG 有機Gr 活動報告

MI²I WWG 有機Grメンバー

有機Gr. PoLyInfoをMIに活用検討

MatNaviは高分子、無機材料、金属材料、超伝導材料、複合材料の構造・物性ならびに拡散データを発信する世界最大級の材料データベースサイトです。

English 初めての方へ 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 データベースグループ MatNavi

HOME 発表・展示 About us MITSシンポジウム リンク お問い合わせ NIMS

高分子データベース (PoLyInfo)

ログイン

MatNaviの利用は無料ですが、ユーザ登録が必要です。
(登録・検索・閲覧 無料)

- 新規ユーザ登録
- パスワードを忘れた方
- 登録情報変更
- 退会

高分子データベース

- 概要
- データベース機能
- リンク
- お知らせ
- 注意事項
- 必須環境システム
- ヘルプ

概要

高分子データベース"PoLyInfo"は高分子材料設計に必要なとされる様々なデータを学術文献から収集し、体系的に整理して提供するデータベースです。ポリマー物性、化学構造、IUPAC準拠名を含む各種名称、測定サンプルの成形方法、測定条件、原料モノマー、重合方法などを相互に関連づけて収録しています。物性項目は、熱的物性、電気的物性、機械的物性など、約100種類を対象としています。現在、ホモポリマー、コポリマー、これらを成分とするポリマーブレンド、コンポジット、コンパウンドを公開しています。拡張機能として物性推算システム、自動命名システム、NMRデータベースがあります。

詳しい概要は [こちら](#)

ホモポリマー数	14,798
コポリマー数	5,068
ポリマーブレンド数	1,795
コンポジット数	2,043
モノマー数	17,104
物性ポイント数	294,856
文献データ数	15,647

[公開データ](#)

データベース機能

ポリマー検索 (Polymer Search)

ポリマー名称、分類、化学式、材料種別、物性、文献などを指定して検索することができます。"Basic" (簡易条件設定)、"Advanced" (詳細条件設定)および表示するすべての内容を対象とした "Text" (テキスト検索)があります。

PoLyInfoのデータをもとに以下の検討を実施

- 構造／物性の可視化
- 記述子検討
- 転移学習の検討

データベースのデータ構造化

NIMS提供のAPIを用いて、データを抽出、機械学習が使いやすいCSV形式に加工した。

AbbreviatedName	CUformula	CUformulaWeight	CopolymerType	PolymerType	Property	SourceBasedName	
NaN	C57H36N2O9	892.91	NaN	Homopolymer	Glass transition temp.	poly((4,4'-sulfonyldiphenol)-alt-{4,4'-bis(4-f...	p -1
NaN	C54H30N2O9	850.83	NaN	Homopolymer	Glass transition temp.	poly((biphenyl-4,4'-diol)-alt-{4,4'-bis(4-fluo...	p -1
...
NaN	C26H29NO7	467.51	NaN	Homopolymer	Contact angle	poly({4,4'-[2-aza-3-(ethoxycarbonyl)-4-oxohexa...	p {c
NaN	C31H31NO7	529.58	NaN	Homopolymer	Glass transition temp.	poly({benzyl 3-(4-hydroxyphenyl)-2-[3-(4-hydro...	p [2

102132 rows × 851 columns : プロセス条件が多岐に渡る

PoLyInfoデータを用いた可視化例

実施例：分子量分布とT_gの関係をプロット

○分子量

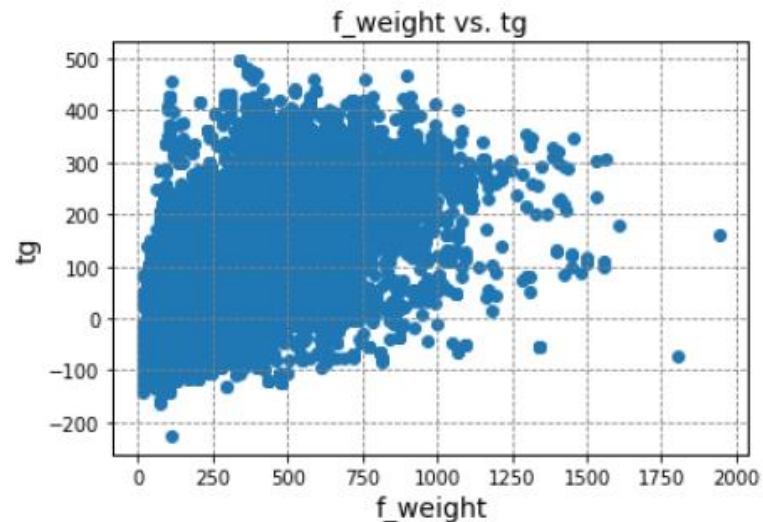
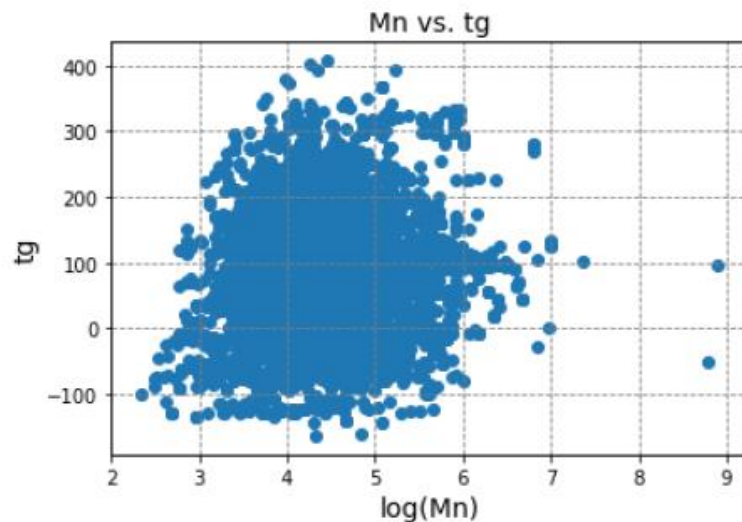
Molecular Weight 1：Mn 優先（12684）、Mw（6686）も多い

Molecular Weight 2：1がMnだった場合に、Mwがくる

Mnでデータを作成、Molecular Weight1がMwの場合は、Mw/Mnがあれば、

$$Mn = Mw * 1 / (Mw / Mn)$$

でデータを作成



PoLyInfoデータを用いた機械学習例

実施例：分子量を説明変数として弾性率の予測

分子量を説明変数に追加して解析する 181120_regression_test_v2.ipynb

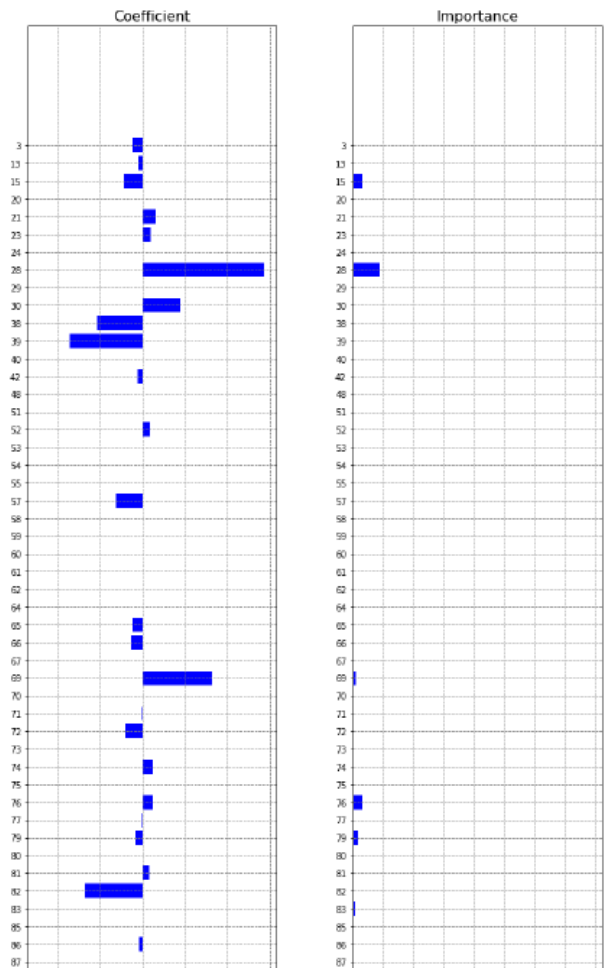
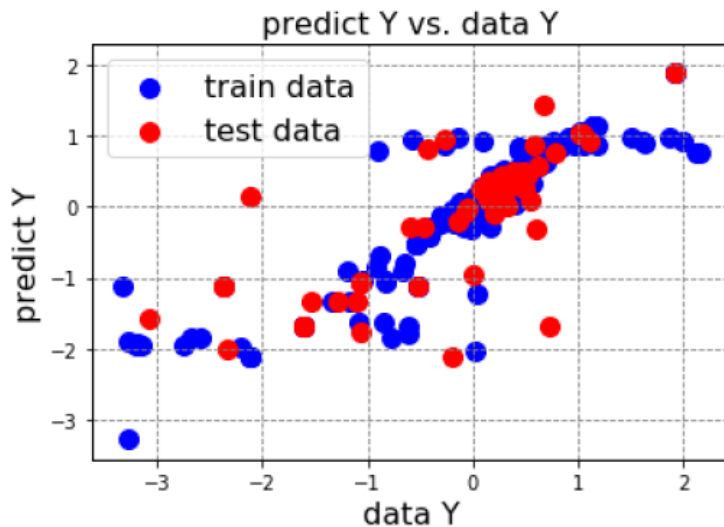
分子量 (Mn、Mw と Mw/Mm から Mn に変換) と、縦弾性率の積集合が 293 しかない

⇒まずはこれで計算

〈Lasso〉

$r^2(\text{train_data}):0.796$

$r^2(\text{test_data}):0.596$



化学構造の特徴量の活用

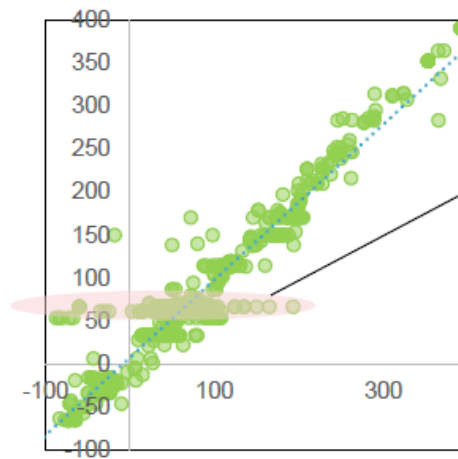
- ✓ **Deepchem** : グラフコンボリユーション。化学構造をグラフィックに解釈し、畳み込みニューラルネットワークを行う
- ✓ **Mordred** : 記述子計算
- ✓ **XGBoost** : 機械学習フレームワーク。勾配ブースティングとRandom forestを組み合わせたアンサンブル学習を行う。

上記を含むモジュールをDPFの計算端末にインストール頂く

Tg, Tmの予測

予測と記載値の相関係数 (テストデータ)

	DeepChem	Mordred + XGBoost
Tg	0.99	0.89
Tm	0.99	0.75



モノマー骨格は同じだが、実験値が異なるデータ
⇒平均して使用

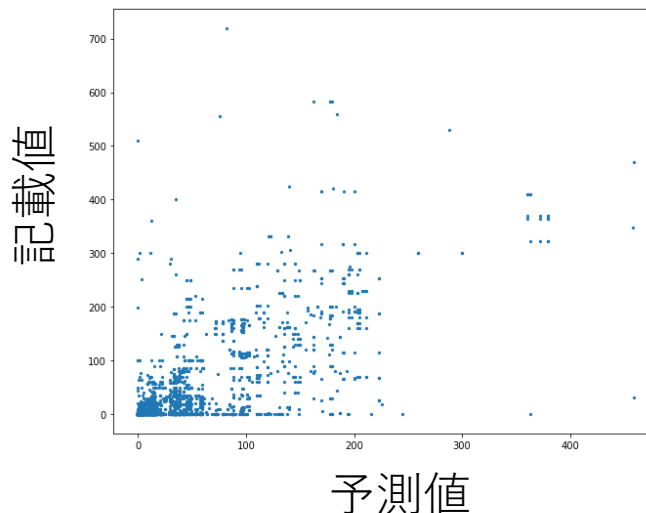
重要な変数は数値に変換

特に重要な変数は数値に変換して活用

試験片の形状など、テキスト情報を数値に変換することで予測精度の向上を確認した。

変換前	変換後
cellulose triacetate coated on a braid	nan
t = 38 micro meter	-4.42021
t=40-60micron,com. film	-4.39794
t=80micron	-4.09691
t=ca.45micron	-4.34678
thickness 0.028mm	-4.55284

電気伝導率の予測



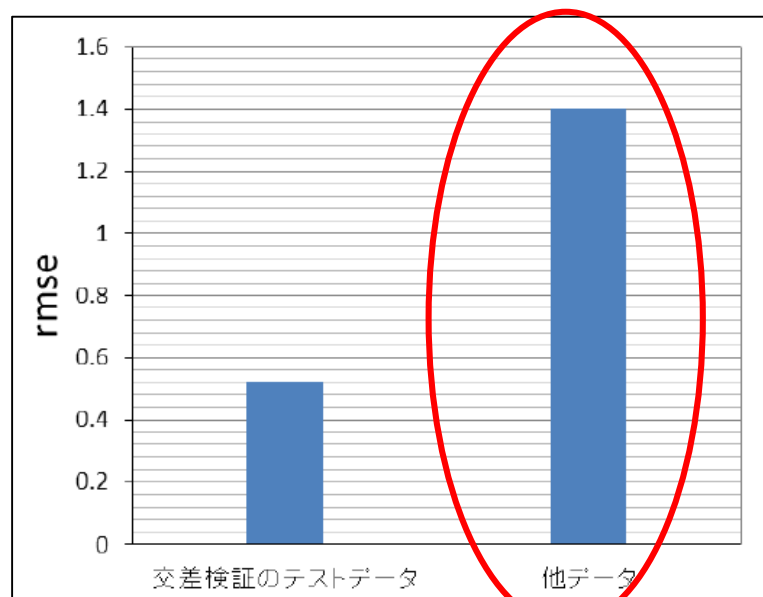
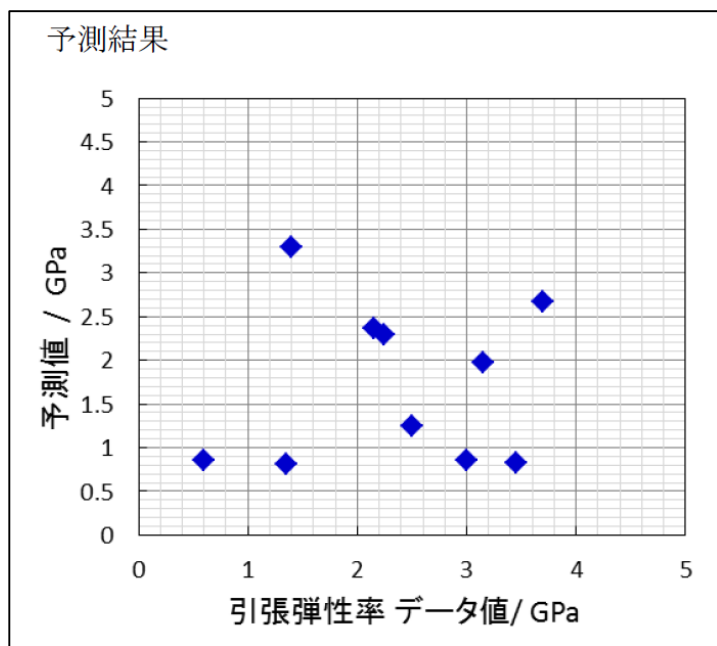
R^2
0.284
→0.557

変数名	変数重要度
thickness	0.684
MACCS keys bit 150	0.0576
MACCS keys bit 154	0.0519

PoLyInfo→Webで得られた物性データ

PoLyInfoのデータ(引張弾性率)でモデルを作成し、Webから取得の引張弾性率を予測できるかテストを実施

- Homopolymerに限定、添加剤なしに限定
- 引張弾性率を5GPa以下に限定
- 説明変数：ECFP(radius=3, nbits=2048)
- ランダムフォレストでモデル化



Webから得られたポリマーへの予測誤差はPoLyInfo内のものと比べて多い

転移学習風 2 段階学習

PoLyInfoデータ ⇒ 社内データ、特許データなど

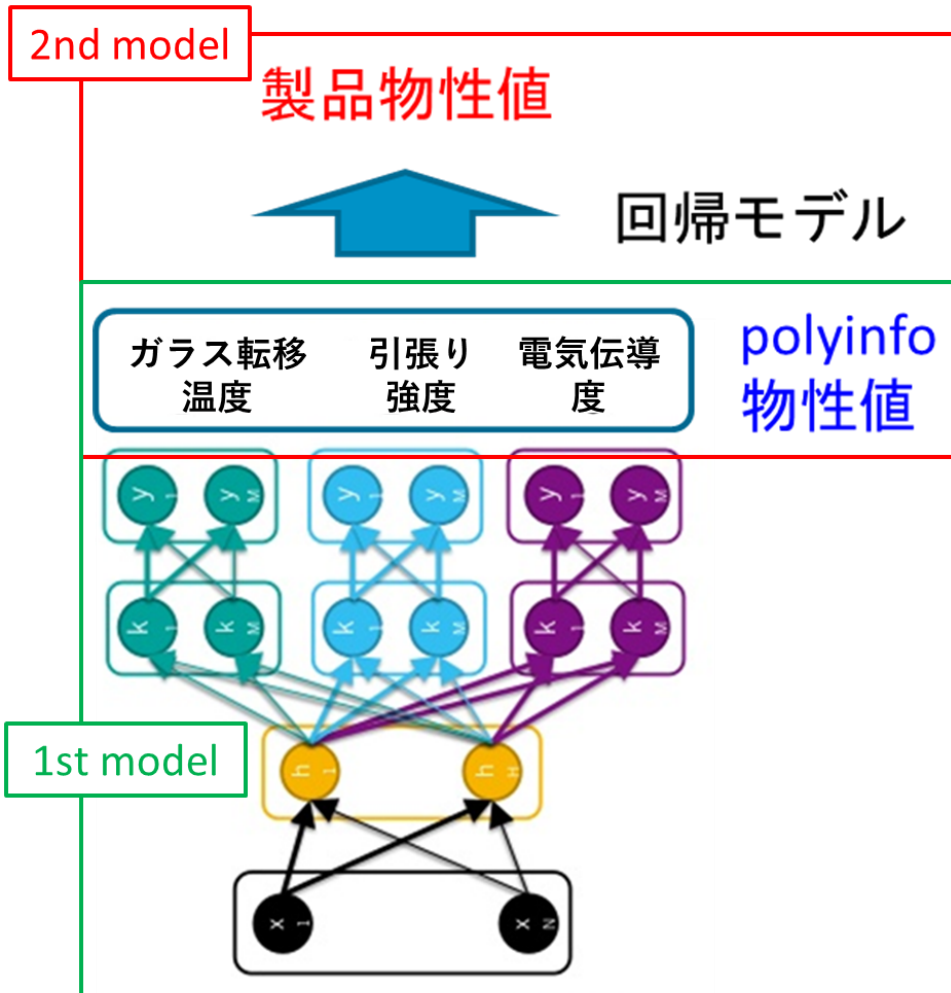
2 段階の機械学習モデル構築

社内データ（小規模
データ）



モデルの転用

PoLyInfo（巨大なモデル）



2nd model

入力	前半のモデルを用いて得られた、特許データの試験条件に対する物性値の予測値
出力	特許データに記載された物性値

1st model

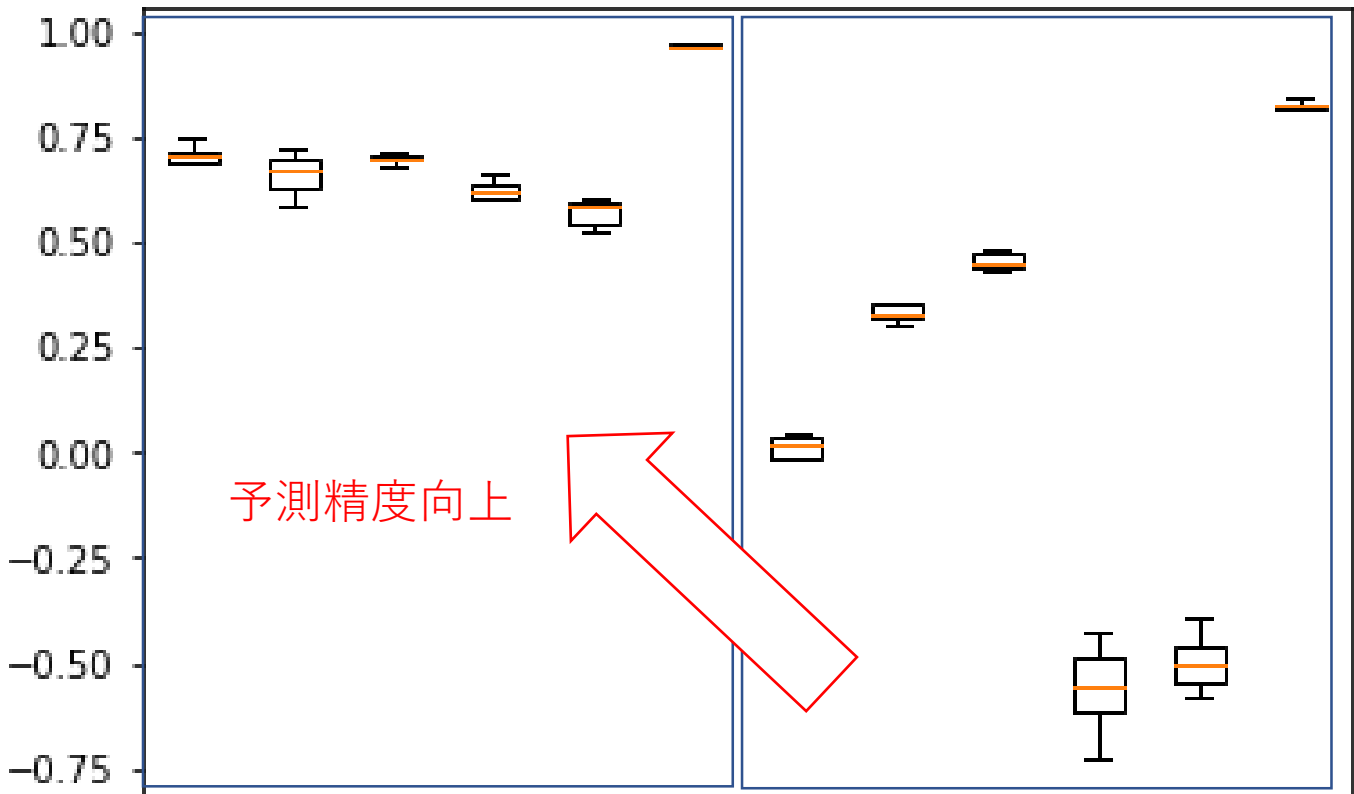
入力変数	PoLyInfoに含まれるポリマー構造、フィラーの情報、プロセス条件、成型、加工条件など
出力変数	PoLyInfoに含まれる各種物性値。ガラス転移温度、引張り温度、熱特性など

予測／実測の散布図例（転移なし/あり）

PoLyInfo活用あり

PoLyInfo活用なし

予測精度
R²



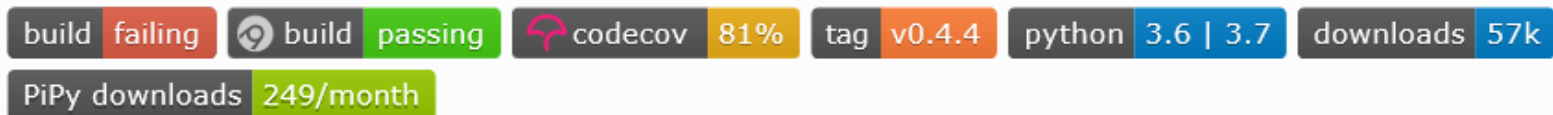
予測精度向上

実験で使っていない、フィラー、添加剤などを入れた場合の物性予測についても、ポリマーデータベースには、参考になる実験データが含まれるので、その情報を用いて予測可能

特性 A	特性 B	特性 C	引張り弾性率 (MPa)	曲げ弾性率 (MPa)	HD T(°C)	特性 A	特性 B	特性 C	引張り弾性率 (MPa)	曲げ弾性率 (MPa)	HD T(°C)
------	------	------	--------------	-------------	----------	------	------	------	--------------	-------------	----------

Xenonpyの試用 (転移学習)

What is XenonPy project

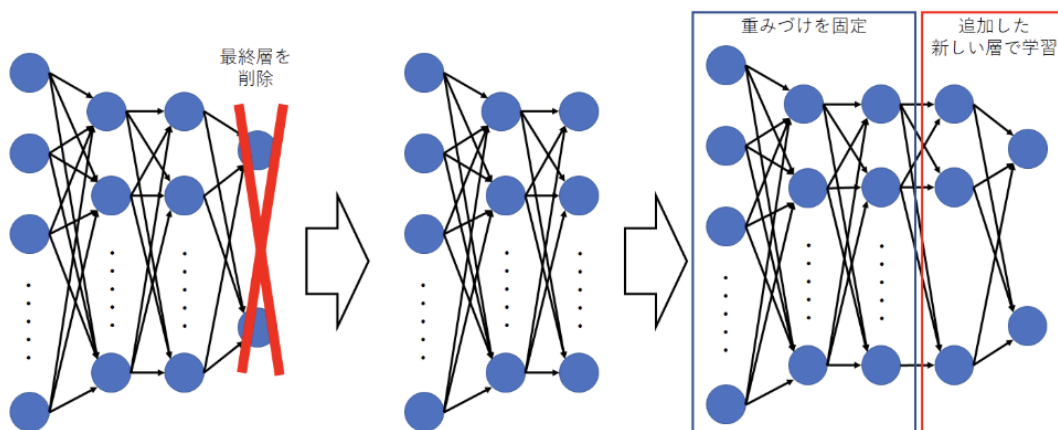


Overview

XenonPy is a Python library that implements a comprehensive set of machine learning tools for materials informatics. Its functionalities partially depend on Python (PyTorch) and R (MXNet). This package still under hard working. The current release provides some limited features:

統計数理研究所 吉田先生のチームによるMI用プラットフォーム

転移学習



Xenonpyに含まれる
polymer genomeデータを用いて転移学習
のトライアル

<https://udemy.benese.co.jp/ai/transfer-learning.html>

Xenonpyの試用（転移学習）

Target properties

Source property

	Bandgap	Dielectric.Constant	Refractive.Index	Atomization.Energy	Density	Ionization.Energy	Electron.Affinity	Glass.Transition.Temperature	Hildebrand.Solubility.Parameter
Bandgap	0.277	0.078	0.235	0.104	-0.159	-0.159	0.003	-0.045	-0.073
Dielectric.Constant	0.072	0.192	0.227	0.102	0.010	-0.385	0.047	-0.150	-0.193
Refractive.Index	0.199	0.006	0.281	0.229	-0.228	-0.034	-0.103	-0.091	-0.073
Atomization.Energy	0.058	-0.044	0.083	0.447	-0.105	-0.342	-0.153	0.043	-0.180
Density	-0.170	-0.139	-0.172	0.002	0.343	-0.300	0.052	-0.150	-0.265
Ionization.Energy	-0.025	-0.246	-0.110	0.071	-0.201	0.348	-0.167	-0.080	-0.378
Electron.Affinity	-0.030	-0.053	-0.143	0.027	0.042	-0.239	0.215	-0.122	-0.172
Glass.Transition.Temperature	0.046	-0.239	-0.064	0.169	-0.246	-0.178	-0.335	0.135	-0.232
Hildebrand.Solubility.Parameter	0.142	-0.101	0.071	0.056	-0.327	0.038	-0.181	-0.022	0.396

取り組みのまとめ

有機グループの実施事項

- 定期的な会合を複数回
- **Xenonpy** 勉強会
- 講師を招いての質問会（統計数理研究所 吉田先生）

技術検討

- データ可視化
- MI、機械学習
- 転移学習（**Xenonpy**）