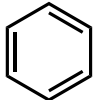



# 利用事例紹介 12

## 機械学習モデルの作成と予測その1（沸点）

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、化学構造と沸点との相関に関する学習モデルを作成し、化合物の沸点の予測を行いました。

### 既存データ群

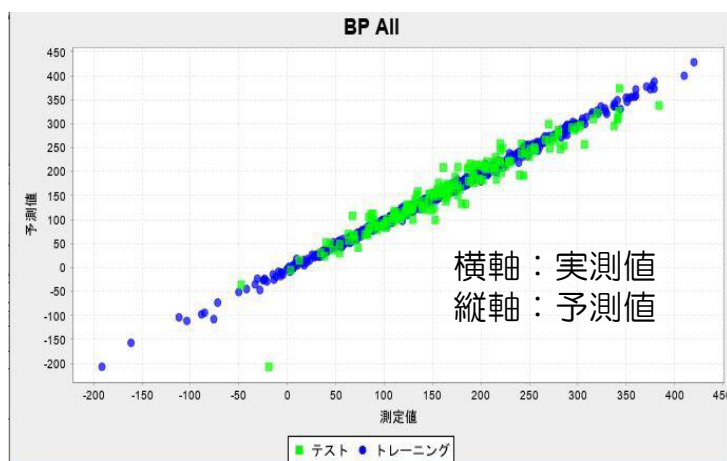
化学物群	沸点
	80°C
	56°C
⋮	⋮
⋮	⋮

化学構造と沸点との相関関係モデルを作成

$$y = ax_1 + bx_2 + \dots$$

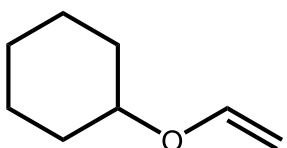
（関係式イメージ）

### 作成したモデル （実測値と予測値の相関図）



化合物の沸点を予測（数十秒以内）

### 物性値の予測結果

化合物	沸点	
	計算値	実測値
	226°C	221°C
	148°C	147°C

作成したモデルで任意の化合物の沸点を予測し、実測値と比較したところ、良好な結果が得られました。開発化合物の迅速なスクリーニング手法としての活用が期待されます。