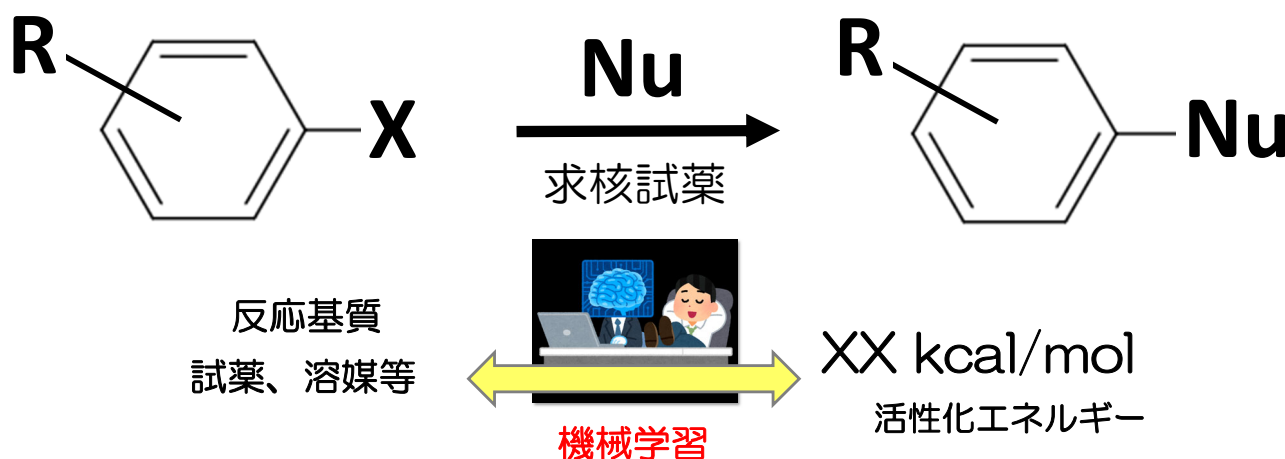


利用事例紹介 22

化合物反応性（活性化エネルギー）の予測

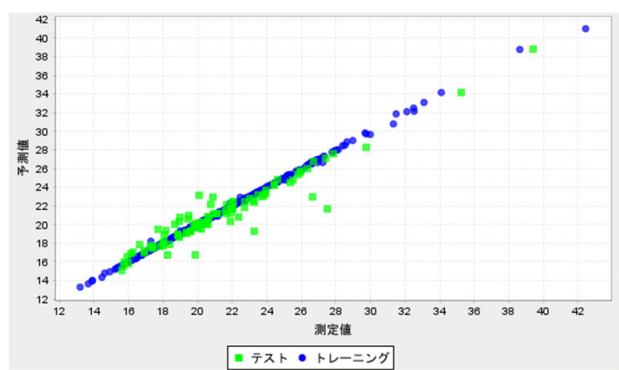
これまで機械学習のモデルとして、化学構造と各種物性との関係について紹介してきましたが、情報が揃えば化学反応に関するモデルも作成することができます。今回は芳香族求核置換反応をターゲットに、反応基質、試薬、溶媒等と活性化エネルギーの関係についての予測モデル作成事例について紹介します。



作成したモデル

目的変数 : 活性化エネルギー(kcal/mol)
説明変数 : 基質、反応試薬、生成物、溶媒データ¹⁾
(記述子 (from Rdkit),
原子上電荷 (Gasteiger Charge)
Solvent(PC₁-PC₅)²⁾, etc)

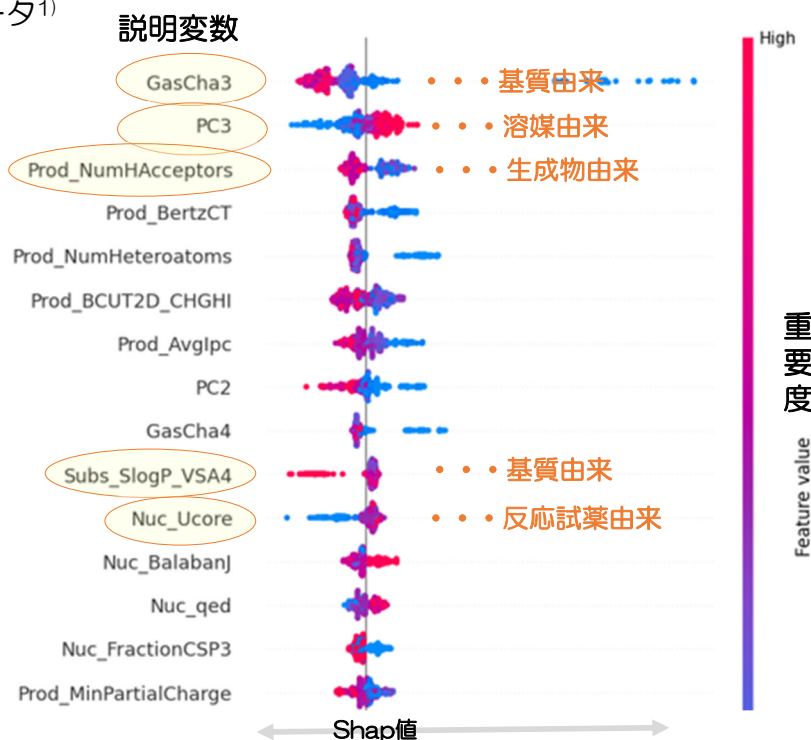
アルゴリズム：勾配ブースティング法
(Xgboost)



作成モデルの相関図

モデルの評価値 決定係数 R²: 0.913

Shap値のプロット図 (モデル解釈の指標の一つ)



化学反応では基質、反応試薬、溶媒など様々な要因が複合的に寄与します。機械学習を活用することで、これら要因をうまく関連付けた反応性（活性化エネルギー）予測モデルを作成することができます。

1) *Org. Process Res. Dev.*, **2016**, 20, 760–773. 2) *Chem. Sci.*, **2021**, 12, 1163.