

## 化学反応ネットワークと機械学習を用いた反応経路解析

(金沢大院自然) ○小島 穂夏・井田 朋智・水野 元博

Analysis of Reaction Pathways using Chemical Reaction Networks and Machine Learning  
(Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University) ○Honoka Kojima, Tomonori Ida, Motohiro Mizuno

Over the past decade, there has been a remarkable progress in predicting chemical reactions using machine learning. In particular, learning models using deep neural network can predict products with a high accuracy of over 90%. However, they sacrifice the explainable prediction and cannot directly point out the reaction pathways. In this study, we propose a simple learning model that can directly predict the reaction products and pathways by combination of chemical reaction networks and machine learning. In this presentation, the prediction results and the analysis of reaction pathways are reported.

*Keywords* : Chemical Reaction Network; Machine Learning

有機化学における新たな合成経路の探索は、従来、化学者の経験と直感に基づき試薬の選出や実験が行われ、多くの時間と費用を要していた。一方、計算機能力の進歩により、コンピューターを用いた反応予測が可能となり、最近では機械学習を用いた化学反応予測が急速に進歩している。特に深層学習を用いた予測手法では、始原系を与えるだけで90%以上の確率で生成物を予測できる<sup>1)</sup>。しかし、予測結果の説明可能性が低く、また反応経路を直接予測できない。本研究では、化学反応ネットワークと機械学習の併用により、始原系を与えるだけで反応経路を明確化し、加えて予測結果が説明可能な手法の確立に成功した。そこで基本的な有機化学反応に焦点を当て、単純な反応例を学習した後、人名反応や複雑なステップを含む化学反応の反応経路および生成物を予測し、その結果を解析した。一例として、参考書<sup>2)</sup>では、マルコフニコフ則におけるカルボカチオンの安定性に不等号の大きさが付いているだけだが、本研究では具体的に数値での大小関係が得られた(図1、表1)。それが反映された計算結果の一例を図2に示す。当日はこの反応を含め、他の反応経路に対する説明を行う。

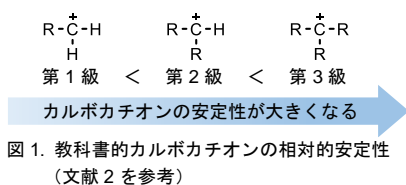


表1. 研究で得られたカルボカチオンの得点表

構造	C <sup>+</sup> H <sub>3</sub>	C <sup>+</sup> R <sub>1</sub>	C <sup>+</sup> R <sub>2</sub>	C <sup>+</sup> R <sub>3</sub>
点数	-4.202	-2.990	1.650	1.776

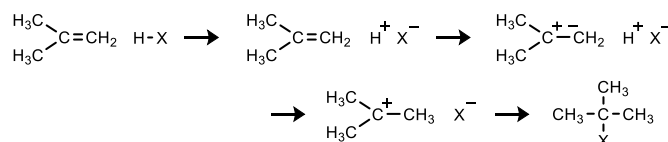


図2. マルコフニコフ則に基づく付加反応(Xはハロゲンを示す。計算では初期構造式のみインプットし、全反応中間体および生成物を予測した。)

1) P. Schwaller *et al.*, *ACS Cent. Sci.* **2019**, 5, 1572-1583.

2) 村橋俊一ほか訳『ボルハルトショアー：現代有機化学 [上]』第6版, (化学同人, 2017).