

演 題	ニューラルネットワーク法による沸点推算式の構築と評価 - 分子設計支援システム：MolWorks の開発 -	
発 表 者 (所 属)	田島澄恵、原口誠、長嶋雲兵* (株式会社ベストシステムズ、*産業技術総合研究所グリッド研究センター)	
連 絡 先	株式会社ベストシステムズ 東京事業所 〒110 - 0016 東京都台東区台東 2 - 18 - 8 台東 K-1 ビル 2-3 階 TEL 03-5812-1350 FAX 03-5812-1354	
キ ー ワ ー ド	Java, Properties estimation, Machine independent, Molecular orbital calculation	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	分子設計支援システムとして、機種を問わず同じ機能が気軽に利用出来るソフトウェア開発を目指した MolWorks の Ver.1.8 を 2002 年 9 月に公開した。Ver.1.8 では基本分子の構築、CNDO/2 計算及び解析、主な分子軌道計算用インターフェイス、Joback 法による物性推算機能を組み込んだ。次期バージョンには、ニューラルネットワーク法による高精度な物性推算機能を組み込む予定である。MolWorks を利用することにより、原子・分子（マイクロ）から物質（マクロ）までの解析を容易に行うことが可能となる。	
環 境	適 応 機 種 名	IBM PC/AT 互換機, Power Macintosh, Linux/UNIX machine
	O S 名	Windows98/Me/NT/2000/XP, Linux/Intel, MacOS 8.1 ~ 9.2.2/X
	ソ ー ス 言 語	Java
	周 辺 機 器	Ethernet Adaptor
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い)	<ul style="list-style-type: none"> ・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布するソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ・未定 	具 体 的 方 法
		http://www.molworks.com から評価版のダウンロードが可能 CD-R による販売も可能

1. はじめに

新規材料開発の際、物質に関する様々な情報が必要となる。それらは、例えば、化学的、物理的、熱力学のおよび分光学的性質などであり、必要となる情報は開発する材料によって異なる。これらの情報を得る手段として、量子化学計算、物性推算、データベース検索、化学工学計算や実験データ解析など種々のソフトウェアが利用されている。しかし、現状では、これらは個々に独立したプログラムであるため、ユーザインターフェイスや使い勝手が異なり、全てを相互補完的かつ効果的に利用することは困難である。また、動作機種の限定により、保有資産を有効に活用することの妨げともなっている。

そこで、我々は Java 言語を用いて、機種依存性がなく、異機種間で同一の操作環境を持つ、統合的な化学研究支援ソフトウェア MolWorks[1]の開発を行ってきた。本報告では、2002年9月に公開した MolWorks Ver.1.8 の機能の概略と、ニューラルネットワーク法による高精度な沸点推算式の構築と評価について報告する。

2. プログラムの概要

本プログラムは画面上でマウスを用いて分子を描画し、自動水素付加、簡易構造最適化機能により、3次元分子の構築を容易に行なうことができる。また、分子構造ファイル（xyz/pdf形式）や主要な分子軌道計算プログラム用の入力ファイル及び出力ファイルの読み込みが可能である。図1に実行画面表示例を示す。

分子軌道計算としてCNDO/2法を内蔵しており、分子軌道や双極子モーメントの解析が可能である。また、GAMESS/GAUSSIAN/MOPACのインターフェイスが内蔵されており、容易に入力ファイルを作成できる。

物性推算にはJoback法及びニューラルネットワーク法を用いてパラメータを最適化したものを採用した。フラグメントごとのパラメータから沸点、融点と臨界定数を計算し、対応状態原理により純物質の密度、蒸気圧、蒸発潜熱等を推算する。また、混合物の物性としては、二成分系の状態図を作成することが出来る。

3. ニューラルネットワーク法による沸点推算式の構築と評価

多種分子の沸点関係式は線形ではなく非線形であるため、Joback法などの線形関係式では高精度なものは得られない。そこで、ニューラルネットワーク法による非線形沸点推算式を構築した。

ネットワーク構造は3層の階層型である。今回新たに構築した沸点推算式用の入力パラメータ総数は137であり、フラグメントに関する入力が98、構造情報に関する入力が38含まれる。これらの入力パラメータによって、既存の沸点推算式では不可能である構造異性体の区別をも可能とする高精度な推算式を構築した。

400分子（鎖状分子：122、芳香族分子：157、リング状分子：121）を教師データとして推算式を構築した。教師データに対する近似直線および相関係数は、 $y=0.9964x+0.92$ 、 $R^2=0.9971$ であった。教師データに含まれない1077分子（鎖状分子：367、芳香族分子：299、リング状分子：411）について得られた推算式の評価を行なったところ、推算結果の近似直線および相関係数が、 $y=1.0071x+1.1052$ 、 $R^2=0.9066$ （図2）と非常に高精度な推算式を得ることができた。また、いくつかの異性体の相対関係についても正確に評価できた。

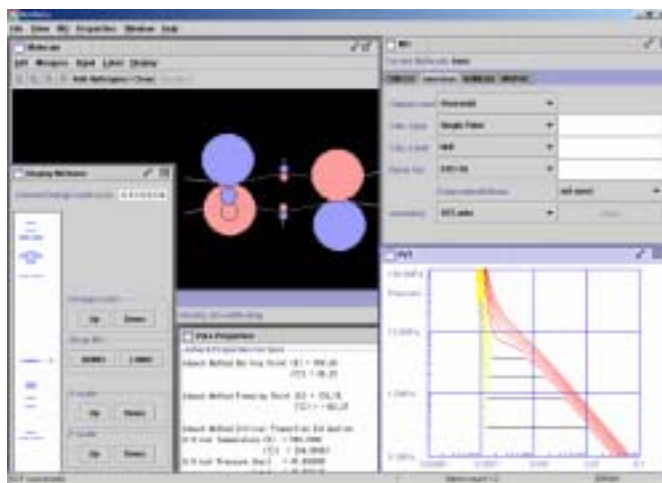


図1. 実行中の画面の一例

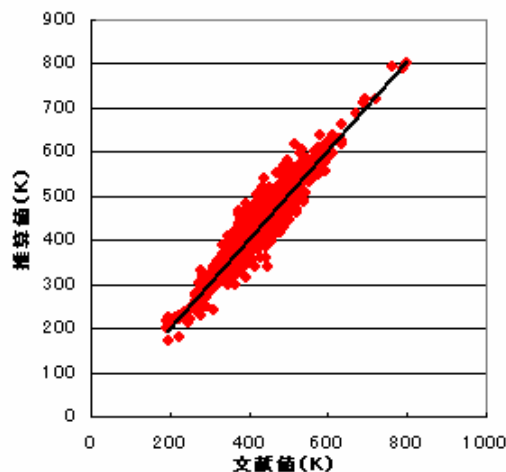


図2. 推算結果

4. 謝辞

日頃より有益な御議論をさせていただいている青山智夫宮崎大助教授および細矢治夫お茶大名誉教授に深く感謝いたします。

参考文献

[1] MolWorks, <http://www.molworks.com/>