

IP16

演 題	分子設計・反応設計・構造解析・トータルシステムの研究	
発 表 者 (所 属)	(東大院工) 船津公人、○荒川正幹 (豊橋技科大) 太田圭輔、溝渕創一郎	
連 絡 先	〒113-8656 東京都文京区本郷7丁目3番1号 東京大学大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻 俯瞰環境工学講座 TEL: 03-5841-7751 FAX: 03-5841-7771 E-mail: funatsu@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp	
キーワード	分子設計、反応設計、構造解析	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 等	本研究室ではコンピュータを用いて分子設計、反応設計、構造解析などの研究を行うためのトータルシステムを目指し、いくつかのソフトウェアの開発を行っている	
環 境	適 応 機 種 名	PC/AT 互換機
	O S 名	Microsoft Windows
	ソ ー ス 言 語	C++、Fortran など
	周 辺 機 器	なし
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い)	・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	具 体 的 方 法 一部については CAC フォーラム http://www.cheminonavi.co.jp/cac/ を通して配布を行っている
	・未定	

1. はじめに

本研究室ではコンピュータを用いて分子設計、反応設計、構造解析などの研究を行うためのトータルシステムを目指し、いくつかのソフトウェアの開発を行っている。本研究展示ではこれらのうち、分子設計トータルシステム ToMoCo、有機合成経路設計システム AIPHOS、KOSP、TOSP および反応評価システム、自動構造推定システム SEoN について、デモを交えて紹介を行う予定である。

2. 分子設計トータルシステム ToMoCo

分子設計トータルシステム ToMoCo は分子設計、構造活性相関などに関する解析を共通の GUI から行うことを目標として開発を行っている統合システムである。主な解析手法としては、CoMFA (Comparative Molecular Field Analysis) による QSAR や、HNN (Hopfield Neural Network) を用い

た分子構造の重ね合わせ、LigConstructor による新規薬物候補構造の自動創出、GARGS 法による CoMFA 領域選択手法などがあげられる。

LigConstructor は進化的計算手法を用いて、高活性を示すと予想される構造を自動的に多数提案することを目的とした手法である。QSAR モデルによる活性予測値を評価値とし、構造結合、突然変異といった操作を繰り返し、高い予測活性値を示す構造を探索する。評価関数に CoMFA モデルを用いることにより、3次元構造を考慮した自動構造生成が可能となっている。

GARGS 法は、CoMFA において活性を説明するのに特に重要な領域のみを選択するための手法である。CoMFA フィールドをいくつかの小領域に分割し、GA (遺伝的アルゴリズム) を用いて領域の探索を行う。これにより、シンプルで予測性の高い QSAR モデルを構築することが可能となり、より効率的な分子設計が期待される。

3. 有機合成経路設計システム

本研究室では有機合成化学者の創造的研究に寄与する3つの有機合成経路設計システムの開発を進めている。AIPHOS (Artificial Intelligence for Planning and Handling Organic Synthesis) は、新規合成経路の創出および実際性の評価を行うシステムであり、情報・経験指向戦略と論理指向戦略の利点を合わせ持っている。KOSP (Knowledge- base-Oriented Synthesis Planning) は同様に2つの戦略を用いるが、AIPHOS よりもやや経験指向のシステムであり、TOSP (Transform-Oriented Synthesis Planning) は、transform を利用した完全に経験指向のシステムである。また、合成経路設計システムから提案された合成経路の評価を目的に、生成物を予測する反応評価システムの開発も行っている。これにより、副反応生成物の安全性やその生成条件などに着目した経路の評価を行うことができる。本研究室では合成経路設計システムと反応評価システムの統合を行い、合成化学者の研究に寄与するシステムの開発を進めている。

4. 自動構造推定システム

CHEMICS は分子式、各種スペクトルデータを入力とし、有機化合物の構造を自動的に決定することを目標とした、有機化合物自動構造推定システムである。与えられた未知試料の分子式、各種スペクトルデータを自動的に解析し、それらに矛盾しない構造をすべて生成し候補構造とする。そして、組み立てられた候補構造の NMR スペクトルのシミュレーションを行い、実測スペクトルと比較することによって候補構造のランキングを行う。SEoN (Structure Elucidation on Net)はネットワークを介して CHEMICS を利用できるようにした、クライアント・サーバシステムである。