

MolWorks 新機能

～ニューラルネットワーク法による物性推算式構築機能～

○田島澄恵¹、井上靖雄¹、西克也²¹株式会社ヒューリンクス（〒103-0015 東京都中央区日本橋箱崎町 5-14）²ビヨンド・コンピューティング株式会社（〒110-0015 東京都台東区東上野 2-1-13）

【緒言】

ビヨンド・コンピューティング株式会社で開発を進めている MolWorks（モルワークス）は、分子設計に必要とされる、量子化学計算支援・物性推算・化学工学計算・データベース・ネットワークコンピューティング支援・データ解析機能を統合した Java ソフトウェアである。入手方法は、ホームページ（<http://www.molworks.com/>）からのダウンロードとなる。利用には、初期起動時に表示されるメッセージ画面中のリンク先から、ライセンス申請を行う必要がある。機能の大部分は、無償利用が可能である。有償機能についても、2012/08/31 までのデモライセンスが発行される。以下、有償機能に含まれる、物性推算機能および物性推算式構築機能について述べる。

【物性推算機能】

未知の物性値を効率的に、かつ精度良く予測する物性推算機能は、幅広い分野で必要とされている。我々は、非線形解析手法のひとつであるニューラルネットワーク法（NN 法）による物性推算式構築を行った。NN 法は、入力情報と出力情報との隠れた因果関係を抽出することが得意であり、非線形的要素を含む分子構造情報と物性値の関係を表現するのに適した手法である。現在公開している MolWorks3.1 には、NN 法を利用した logP 値推算機能が含まれている。MolWorks3.1 に含まれる logP 値推算式の構築には、4,386 件のデータを用いた。また、NN 法で

利用する記述子には、分子量や各種フラグメント情報からなる 56 種類を用いた。logP 値推算式構築に利用した 4,386 件のデータ、および、NN 学習用入力ファイルはソフトウェアに含まれている。

MolWorks3.1 による logP 値推算例を、図 1 に示す。1 分子のみの推算だけでなく、複数分子を同時に推算することも可能である。推算結果は、表形式で表示される。

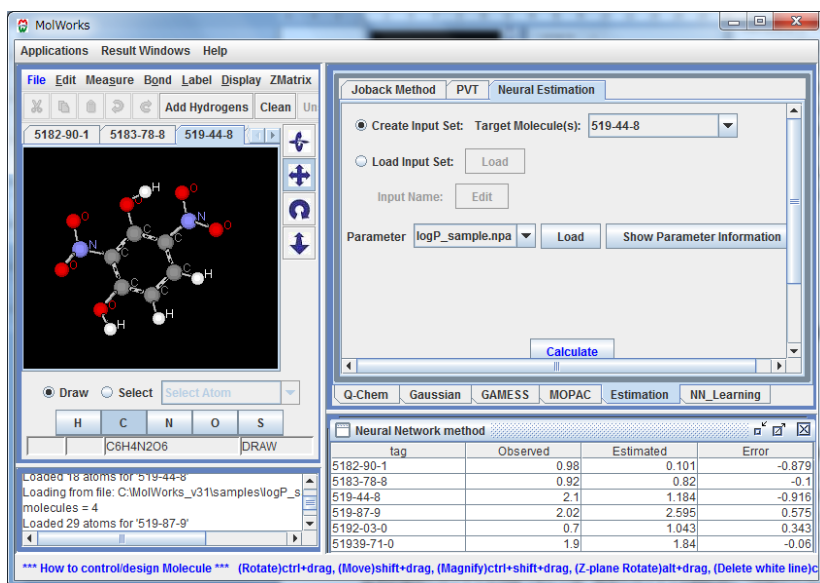


図 1 MolWorks3.1 による logP 値推算例

【物性推算式構築機能】

MolWorks3.1 に含まれる本機能を利用することにより、ユーザオリジナル物性推算式構築を簡単に行うことが出来るとともに、MolWorks3.1 の 1 機能としての利用が可能となる。図 2 に、物性推算式構築用画面を示す。7つの操作 Step に分かれており、Step1～Step3 が学習過程、Step4～Step6 が学習結果評価過程、Step7 が推算パラメータ登録過程となっている。各 Step の操作内容は、(1) NN 学習用入力ファイル作成（もしくは、既存入力ファイル読み込み）、(2)入力ファイル内容の確認・編集、(3) NN 学習計算の実行・結果確認、(4)学習結果評価用入力ファイル作成（もしくは、既存入力ファイル読み込み）、(5)入力ファイル内容の確認・編集、(6)学習結果評価計算の

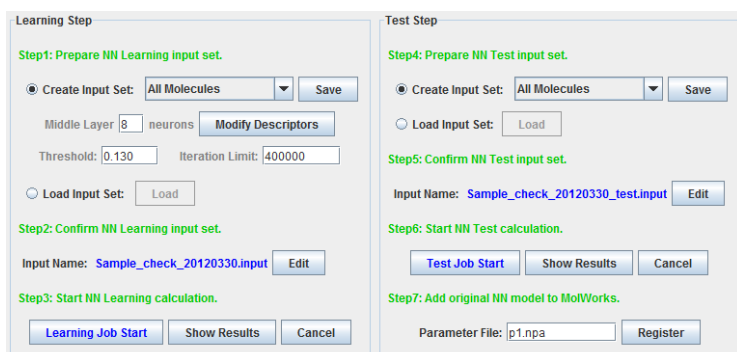


図 2 物性推算式構築用画面

実行・結果確認、(7)作成した推算パラメータの登録（【物性推算機能】で利用する画面中に追加される）である。図 3 に Step6 に含まれる評価計算結果の表示例（Show Results ボタンを押すと表示）、図 4 に評価結果で得られた文献値と推算値の相関図（図 3 中の Show graph ボタンを押すと表示）を示す。

tag	Observed	Estimated	Error
75-43-4	1.55	1.431	-0.119
75-45-6	1.08	1.007	-0.073
75-46-7	0.64	0.579	-0.061
75-50-3	0.16	-0.461	-0.621
75-52-5	-0.35	-0.111	0.239
75-56-9	0.03	0.004	-0.026
7556-99-2	1.74	1.596	-0.144
7559-36-6	2.66	2.552	-0.108
7560-83-0	3.71	4.14	0.43
75-63-8	1.86	1.654	-0.206
75-64-9	0.4	0.424	0.024
75-65-0	0.35	0.287	-0.063
756-79-6	-0.66	-0.749	-0.089
75-69-4	2.53	2.212	-0.318
75-71-8	2.16	1.841	-0.319
75-72-9	1.65	1.423	-0.227

図 3 評価計算結果の表示例

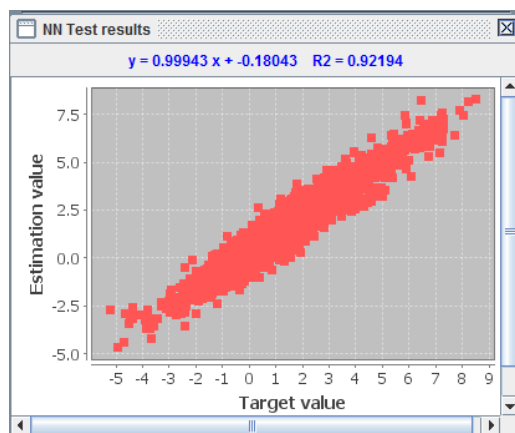


図 4 文献値と推算値の相関図

【まとめと今後の課題】

MolWorks3.1 には、新機能として、ニューラルネットワーク法による物性推算機能および物性推算式構築機能を取り込まれた。しかしながら、必要最低限の機能に留まっており、さらなる機能強化が必要であると考えている。最優先に取り組む課題として、構築した推算パラメータによる物性推算結果の、信頼性評価機能があげられる。具体的には、物性推算パラメータ構築時に利用した学習用データベースに含まれる分子群と、推算に用いた分子との類似度評価を行い、推算結果の信頼性評価を行う。信頼性が低い場合には、推算用分子データを学習用データベースに追加し、再学習を行うことにより、推算用パラメータの改善がなされる。推算結果の信頼性評価から、推算用パラメータ再構築機能への簡便な操作性を実現させることにより、誰もが、簡単に信頼性の高いオリジナル物性推算式構築を行えるようになる。

物性推算関連機能だけではなく、分子構築機能や量子化学計算支援機能の強化も、随時、行っていく予定である。