QSAR PLUS

データシート

QSAR Plusは、化学品や材料を発見するためのワークフロー　ソリューションです。QSARで提供されるツールを基盤とし、さらに、ニューラル・ネットワーク・モデル構築手法と精度の高い量子力学記述子を導入して機能強化を図っています。QSAR　Plusは、研究者による最適な物理化学的特性を備えた材料の特定を可能にします。BIOVIA Materials Studio®に統合されているため、記述子や高度な解析機能を容易に活用することができ、優れた材料の創製を促進します。

化学・材料業界の課題

化学・材料業界の企業は、いずれも同様の課題に直面しています。それは、新しい材料の迅速な創出を、低いコストと高いパフォーマンスで実現することです。さらに、特許の観点からは代替物質の探索の迅速化も求められています。こうしたことから、材料の研究開発に携わる企業では、新たな材料研究の重要な手法として定量的構造活性相関(QSAR)手法を利用しており、その分野は、ポリマー、界面活性剤、その他のソフト　マテリアル、分子/無機結晶、ゼオライトなど、多岐にわたっています。QSAR　Plusを利用することで、研究開発業務の迅速な改革と優れた材料の創出が可能となります。

QSAR PLUSの利用

QSAR　Plusでは、個々の研究者がワークフローに従って新規材料の創出に取り組みます。通常の手順では、まず始めに分子構造と関連実験データを入手し、構造の検証と記述子の計算を行います。

その後、基本的な相関解析などを使用して、初期データ解析を行います。この初期解析の段階で、分子特性と実験データの関係性が示される場合もあります。こうした結果に基づいて、モデルの構築に進みます。ここでは、独自の遺伝的関数近似 (GFA) 手法やニューラル ネットワーク手法といったモデル構築/検証技術を使用して、QSARモデルの詳細が特定されます。モデル構築前に、必要に応じてデータ分割を行う場合もあります。

その後、候補となる材料を、予測される特性に基づいてサブセットに分類します。この段階で、主要グループとなる分子群が決まるので、これを合成するのか、あるいは購入可能な場合であれば、購入するかどうかを判断します。さらにテストを行って、分子の適用性を確認します。必要であれば、これらの実験結果に基づいてナレッジベースを更新し、さらに、目的の特性が得られるまで前述のワークフローを迅速に実施できます。

QSAR Plusでは、単一のスタディ テーブルを使用して、研究内容を管理したり、分子と分子特性とを統合管理したりすることができます。記述子によって質の高いあらゆる物理化学特性が提供され、さらに、独自の遺伝的関数近似を活用することで卓越したQSARモデルの構築性能が得られます。

QSAR　Plusは、量子力学的手法を使用して算出されたきわめて正確なエネルギーと反応性指数を導入することで機能を強化しています。統合されたデータの可視化、管理、解析機能を備えたQSAR　Plusは、材料研究における有力なツールとなっています。

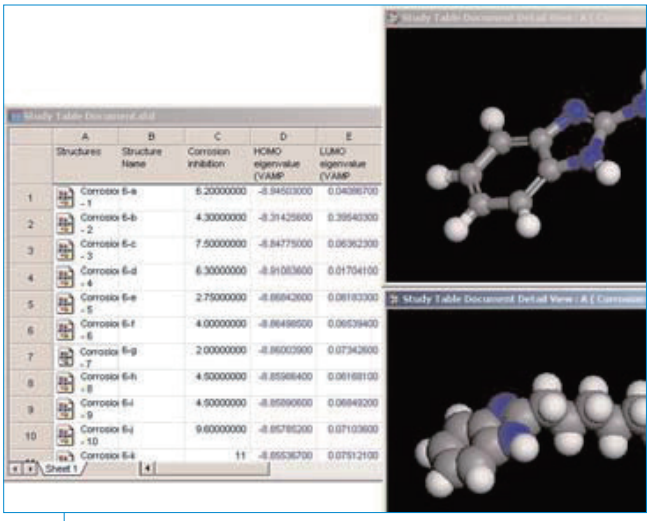

図-1: スタディ テーブルはQSARの主要データ ファイルです。スタディ　テーブルを使用して、構造の追加や編集、記述子の計算、モデルの構築、さらに、物理特性の予測を行います。

BIOVIA MATERIALS STUDIOの利点

- QSAR　Plusは、BIOVIA Materials Studioソフトウェア環境で動作し、使いやすいインターフェースを備えるとともに、Windows®標準に準拠しています。

QSARの概要

- スタディ　テーブル - QSAR　Plusにおける計算の中核であり、カット/コピー/ペースト/ソートを実行できるほか、関数定義、構造へのリンクの格納、およびセルの柔軟なカラー表示が可能です。
- データ構造のインポート - 材料とそれに関連する実験データを業界標準の分子構造ファイルやデータ　ファイルからインポートできます。
- 分子表示機能 - BIOVIA Materials Studioの優れた機能を活用して、材料の描画、操作、表示が簡単に行えます。
- 記述子 - QSAR　Plusでは以下の記述子が用意されており、ユーザーが選択して使用できます。
  - 原子（電荷、原子数など）
  - 空間（分子量、分子容、表面積など）
  - その他の記述子（フラグメント数、結晶格子の体積、

多形など）
  - Fast記述子により、Jurs記述子を含む幅広いトポロジカル熱力学的特性、情報コンテンツ特性、e-state特性、および構造的特性が提供されます。
  - 半経験的な量子力学エンジンVAMP記述子により、エネルギー、軌道(HOMO/LUMO)、多極子などが提供されます。
  - 量子力学的に計算されるDMol3記述子により、きわめて精度の高い電子エネルギーや電荷などの特性が提供されます。さらに、求電子、求核、ラジカル試薬の攻撃受容性といった原子特性を提供し、原子の反応性を記述子として取り込みます。これらの新しい記述子に加え$DMol^3$による分子系と周期系の双方の構造最適化が可能であり、それによって得られた正確な3D分子構造を他の記述子エンジンに入力することもできます。

さらに、下記の記述子がライセンス供与されます。

  - Forciteは、分子力学/分子動力学の使用を可能にし、それによるエネルギー特性（全エネルギー、非結合エネルギー）や、最適化構造を利用可能にします。

- 初期データ解析 - 一連の手法を併用してデータ・パターンを把握します。単変量解析、データ標準化、データ変換、相関マトリックス、グラフィカルな分析、主成分分析、クラスターの解析および検証などの手法が含まれます。
- モデルの構築 - 計算エンジンによってQSAR相関式を構築します。重回帰や部分最小二乗 (PLS) などの標準的手法のほか、以下のようなより洗練されたアルゴリズムを選択できます。

  - GFA:オーバーフィッティングを引き起こすモデルに対してペナルティを与える条件を備えた遺伝的アルゴリズムです。フリードマンのlack-of-fit (LOF) エラー測定を使用してモデル内の項数を制御するとともに、最小二乗エラーを最小に抑えます。GFAは、データセットに含まれる記述子の数がサンプルの数よりも多い場合にも適しており、そのような状況で使用した場合、GFAによって最適な記述子が選択されます。また、次数の高い多項式やスプライン関数を含むモデルに役立ち、非線形モデルの作成やスプライン項の使用による異常値の自動的な排除を可能にします。
  - ニューラル ネットワーク:人の脳の働きに基づいた高度なアルゴリズムであり、非線形関係によるモデル構築を可能にするとともに、他のモデル構築アルゴリズムに比べてノイズや異常値に対する優れた耐性を備えています。さらに、QSAR Plusではニューラル ネットワークのバックプロパゲーションを活用しているため、記述子を反応変数と予測変数のいずれとしても選択できます。これにより、非線形PCAおよびPLSに類似した計算を生成することが可能になります。

- モデルの検証： - 構築したモデルが実際のデータを正しく表すものかどうかを判断します。各モデル ビルダー独自の検証に加え、交差検定、ANOVA、異常値分析、グラフィカルな検証（予測と実測）を提供します。
- モデルの管理 - モデルの適用、インポート、エクスポート（xml形式）、コピー、削除を行うことができ、必要に応じてモデルを適宜実行することもできます。モデルのエクスポートにより、BIOVIA Materials Studioの他のユーザーとモデルを共有することができます。
- データのフラグメント化/サブセット化-データテーブルのソートや絞り込みによって分子群を検出できます。
- 候補の生成 - 候補となる分子を描画したり、業界標準の分子構造ファイルから分子セットをインポートしたりすることが可能です。マーカッシュ形式でのライブラリのエニュメレーションにアナログのビルダーも含まれます。
- プロジェクト管理 - プロジェクトを適宜保存して、作業内容を共同研究者と共有できます。作業内容には、構造、モデル、テーブルなどが含まれます。

お問い合わせ先

DAIKIN COMTEC communication technology

ダイキン工業株式会社

電子システム事業部　営業部　SCグループ

〒108-0075　東京都港区港南2-18-1 JR品川イーストビル

TEL：03-6716-0460　E-Mail : info-sc.comtec@daikin.co.jp

URL：http://www.comtec.daikin.co.jp/SC/

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、**www.3ds.com**（英語）、**www.3ds.com/ja**（日本語）をご参照ください。

3DEXPERIENCE®

DASSAULT SYSTEMES | The **3D**EXPERIENCE® Company

Dassault Systèmes Corporate
Dassault Systèmes
10, rue Marcel Dassault
CS 40501
78946 Vélizy-Villacoublay
Cedex France

BIOVIA Asia Pacific
ダッソー・システムズ・バイオビア株式会社
141-6020
東京都品川区大崎 2-1-1
ThinkPark Tower

BIOVIA Americas
BIOVIA
5005 Wateridge Vista Dr.,
San Diego, CA
92121 USA

©2014 Dassault Systèmes. All rights reserved. **3DEXPERIENCE**, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALEAD, 3D VIA, 3DSWYM, BIOVIA, およびNETVIBESはアメリカ合衆国、またはその他の国における、ダッソー・システムズまたはその子会社の登録商標または商標です。その他のブランド名や製品名は、各所有者の商標です。ダッソー・システムズまたはその子会社の商標を使用する際には、書面による明示の承認が必要です。