

# QSAR

## データシート

QSARによる材料探索の加速。QSARは化学材料探索のためのワークフローソリューションの一つであり、最適な物理化学特性をもつ化合物の発見に大変実用的な手法です。QSAR手法のBIOVIA Materials Studio®環境への統合により、広範な分子記述子の使用と多様な解析手法へのアクセスが可能となります。

### 化学材料業界のチャレンジ

化学材料業界の企業では似たような研究問題に直面しており、そこでは、コストを削減しつつ、性能改善した新奇物質のより早い探索が最重点課題となっています。一方で、特許問題は代替材料の一刻も早い探索への圧力を強めています。これらの理由により、材料研究に取り組んでいる企業（ポリマー、界面活性剤、その他ソフトマテリアル、分子/無機結晶、ゼオライトなど）では、定量的構造活性相関(QSAR) 手法を新規材料探索における重要なパートと位置付けています。

### QSAR: 未来への第一歩

QSARは、デスクトップでの高品位材料探索を可能とし、以前より遥かに多数の研究者に活用されるようになってきました。10年以上ものQSAR導入の実績を基にして、BIOVIAは、材料化学業界の研究者が必要とする設計、使用、機能の一群を提供します。

### QSARワークフロー

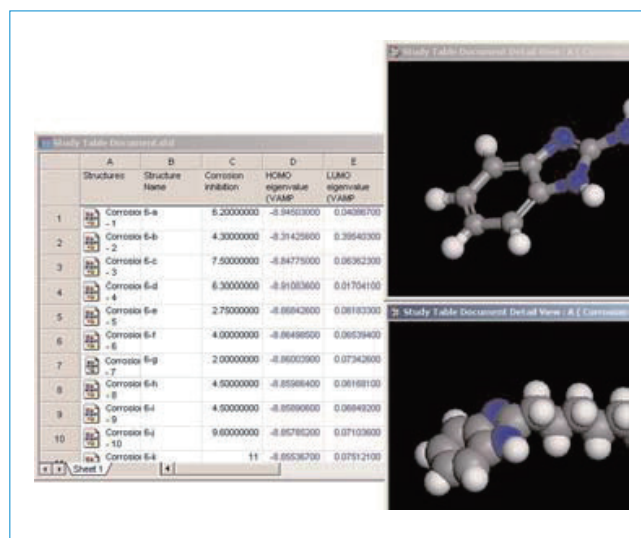
QSARは個々の研究者がワークフローに沿って新規材料探索を行うことができます。たとえば材料分子構造と実験データを入手することから開始します。それから構造を検証して分子記述子を計算します。

その後、初期データ解析を行います。たとえば基本的な相関解析などです。この初期データ解析がすでに分子特性と実験データの関係性を示唆していることもあります。これに基づき、QSARモデル構築に進みます。モデル構築/検証を行い、ユニークな遺伝的アルゴリズムを活用しながら、QSARモデルの詳細を見出します。必要に応じてモデル構築前にデータ分割を行うこともあります。構築したQSARモデルを使用して、次の候補化合物分子の特性予測を行います。

これら候補は予測物性値によりサブセットに分けることができます。これでリード構造が得られました。これらに基づいて実際に合成を行うもの、あるいは購入できる場合は購入するかどうか、意思決定を行います。その後の確認実験によりこれら材料分子の適正が確認されます。必要に応じて、この結果に基づいてナレッジベースを更新し、所望の物性を達成するまで、もう一度前述のワークフローに立ち返ることができます。

QSARでは、単一のスタディ テーブルに実験内容を取りまとめ、分子構造と特性値を統合管理することができます。分子

記述子はあらゆる物理化学物性を提供し、ユニークな遺伝的アルゴリズムと共用されることで、他に比較しえないQSARモデル構築能力を提供します。この統合されたデータ可視化・管理・解析により、QSARは材料探索における有力な手法の一つになります。



Structure	Structure Name	Corrosion Inhibition	HOMO eigenvalue (eV)	LUMO eigenvalue (eV)
1	Corrosio 6-a -1	6.20000000	-6.54652000	0.04386700
2	Corrosio 6-b -2	4.30000000	-6.31425000	0.39640200
3	Corrosio 6-c -3	7.50000000	-6.84750000	0.06362300
4	Corrosio 6-d -4	6.30000000	-6.91003600	0.01704100
5	Corrosio 6-e -5	2.75000000	-6.66942000	0.06183300
6	Corrosio 6-f -6	4.00000000	-6.86466000	0.06539400
7	Corrosio 6-g -7	2.00000000	-6.86002000	0.07342600
8	Corrosio 6-h -8	4.50000000	-6.85968400	0.06166100
9	Corrosio 6-i -9	4.50000000	-6.85969000	0.06166200
10	Corrosio 6-j -10	9.60000000	-6.85780200	0.07103600
	Corrosio 6-k	11	-6.85536700	0.07812100

QSAR計算の中核として機能するスタディテーブル

### BIOVIA MATERIALS STUDIOの利点

QSARは、BIOVIA Materials Studioソフトウェア環境内で使用することができ、Windows®標準のユーザーフレンドリーなインターフェースに準拠しています。

### QSARの概要

- スタディ テーブル - QSAR計算の中核として機能し、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、および表示が簡単に実行できます。
- 記述子 - QSAR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。
  - 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。
  - さらに以下の記述子のライセンスが供与されます。
  - Forciteを使用することで、分子力学/動力学エンジンやエネルギー特性(全エネルギー、非結合エネルギー、および最適化構造)を利用できます。
- 初期データ分析 - 一連の技術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、クラスターの分析および検証などの手法が含まれます。
- モデル構築 - 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)などの標準的な技術のほか独自の遺伝的関数近似(GFA)を選択できます。
- GFAは、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あり、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、GFAは、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つため、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、およびグラフィカルな検証(予測と実測)を提供します。
- モデル管理 - モデルの適用、インポート、エクスポート(xml形式)、コピー、または削除を行うことができ、さらに、必要に応じてモデルを適宜実行できます。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。
- 候補の作成 - 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ー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。

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](http://www.3ds.com) (英語)、[www.3ds.com/ja](http://www.3ds.com/ja) (日本語)をご参照ください。



3DEXPERIENCE®

 **DASSAULT SYSTEMES** | The **3DEXPERIENCE**® Company

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

**BIOVIA Asia Pacific**  
ダッソー・システムズ株式会社  
141-6020  
東京都品川区大崎 2-1-1  
ThinkPark Tower 21F

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