

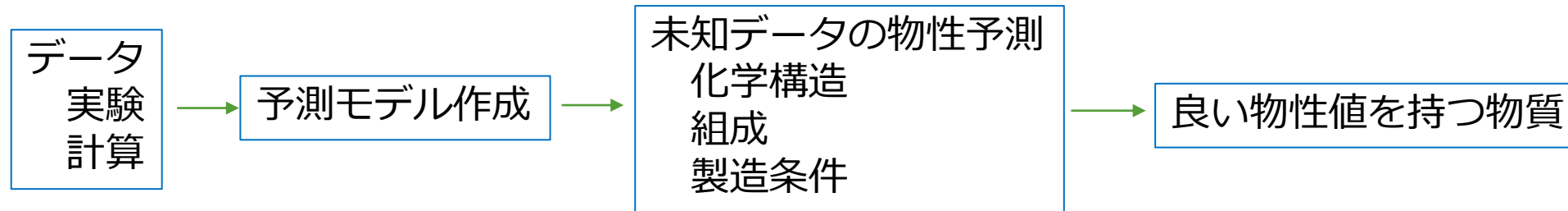
MIソフト **M-EVO**[®] による新素材開発

-- 所望の物性を満足する分子構造探索と
ベイズ最適化による製造条件の最適化 --

HPCシステムズ株式会社
HPC事業部計算化学グループ
阿部幸浩

物質科学において、データから知識を抽出する科学

木野、ダム, Orange Data Miningではじめるマテリアルズインフォマティクス, 近代科学社



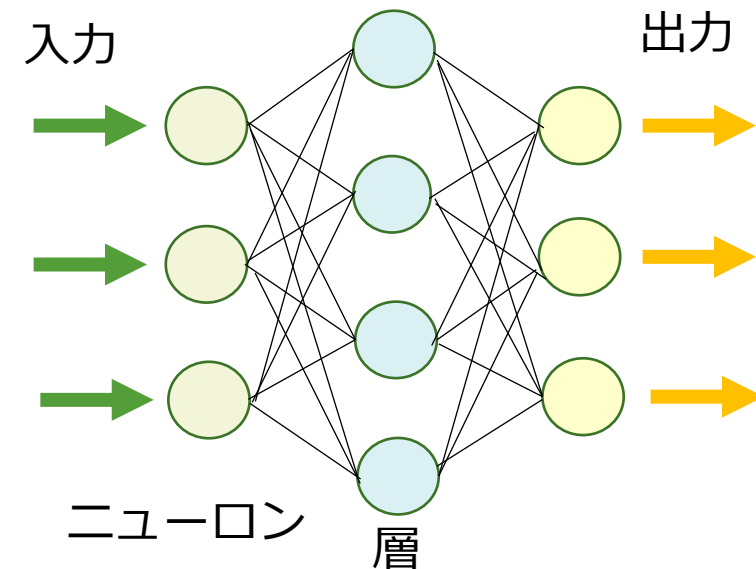
機械学習(ML)

データに潜む法則性を自動的に学ぶ手法の総称 $Y = f(X)$

ディープラーニング(DL)

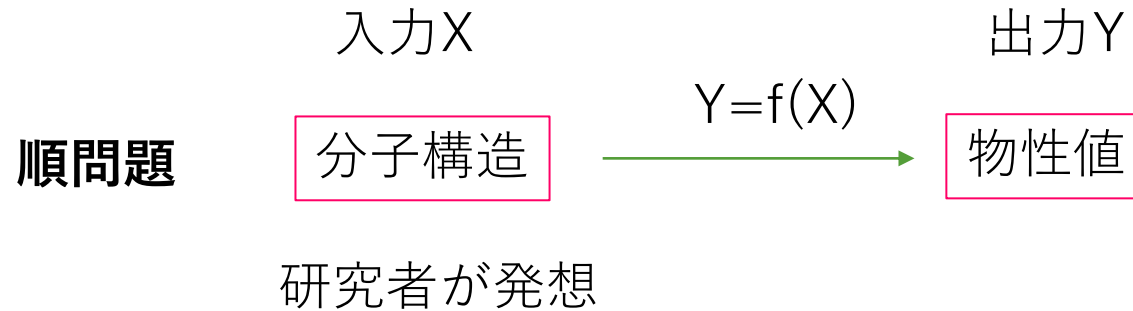
多くの層を持つ深いニューラルネットワークを用いた学習

我妻, はじめてのディープラーニング, SB Creative



新素材開発における計算化学の役割

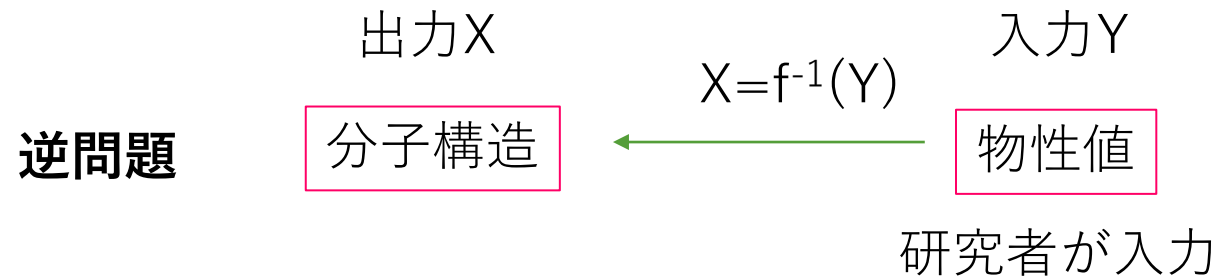
これまで



種々の方法による物性予測

- MO法：Gaussian、Gamess等
- MD法：Gromacs、Lammps、Amber等
- 原子団寄与率法
- QSPR, QSAR

これからは

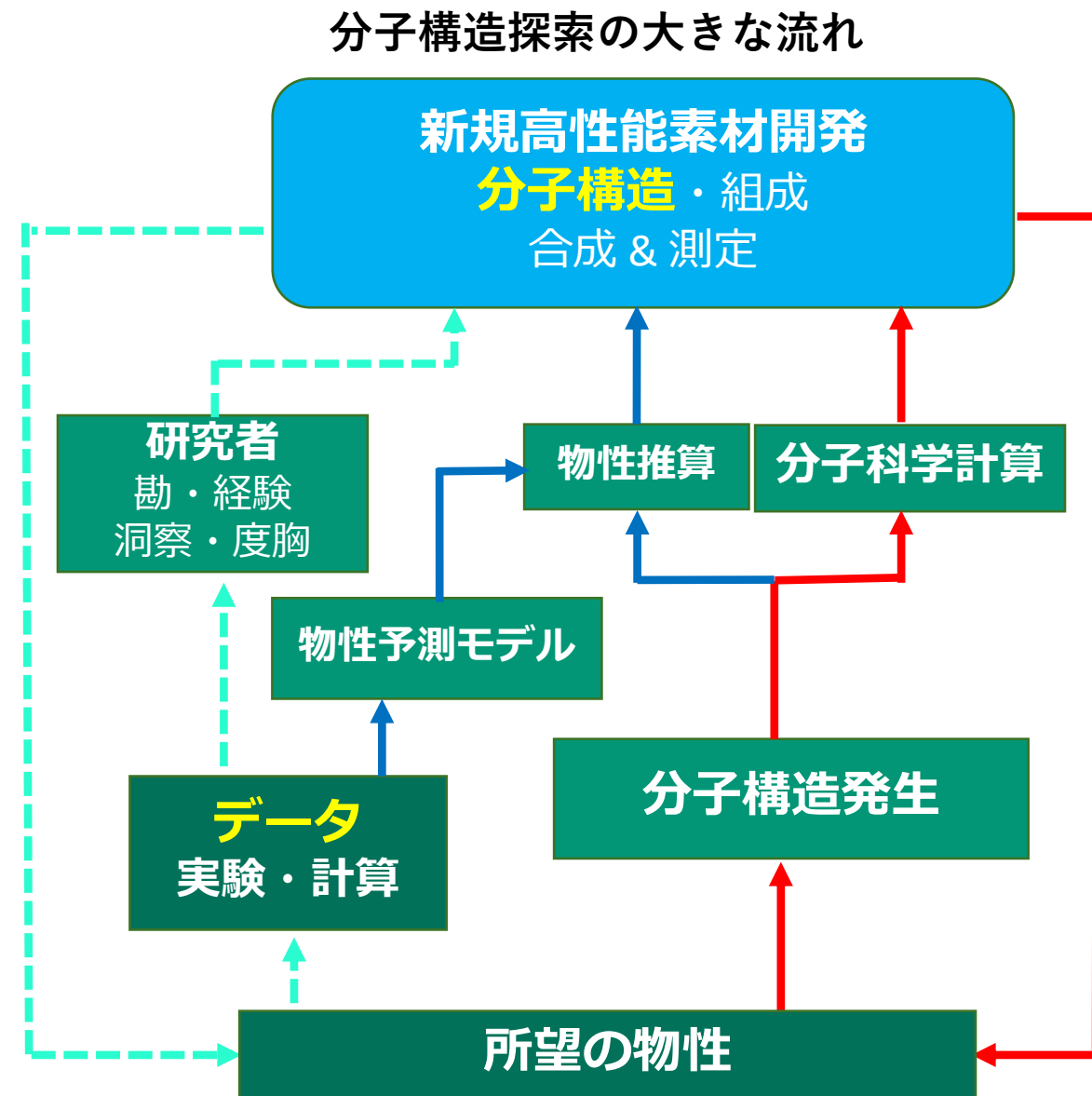
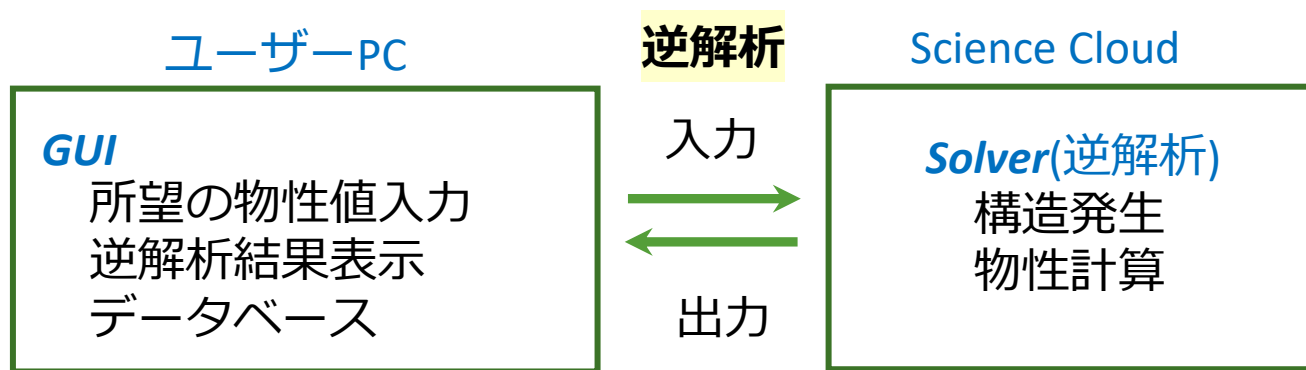


逆解析ソフト

- ChemTS
- XenonPy

課題：如何に分子構造を組み立てるか

- ・ 逆問題を解くソフトウェア
- ・ データベースが無くても探索可能
⇒ 計算化学手法による探索
- ・ 多様な分子構造を探索
- ・ 任意の分子構造の周辺構造探索も可能
- ・ Python、Gaussian、データサイエンス、Linuxを知らなくても操作可能なGUI
- ・ Cloud利用、ユーザーデータベースはお手元のPC内
- ・ 機械学習による高速な分子構造探索も可能
- ・ 実験による絞り込みまでサポート
⇒ ベイズ最適化





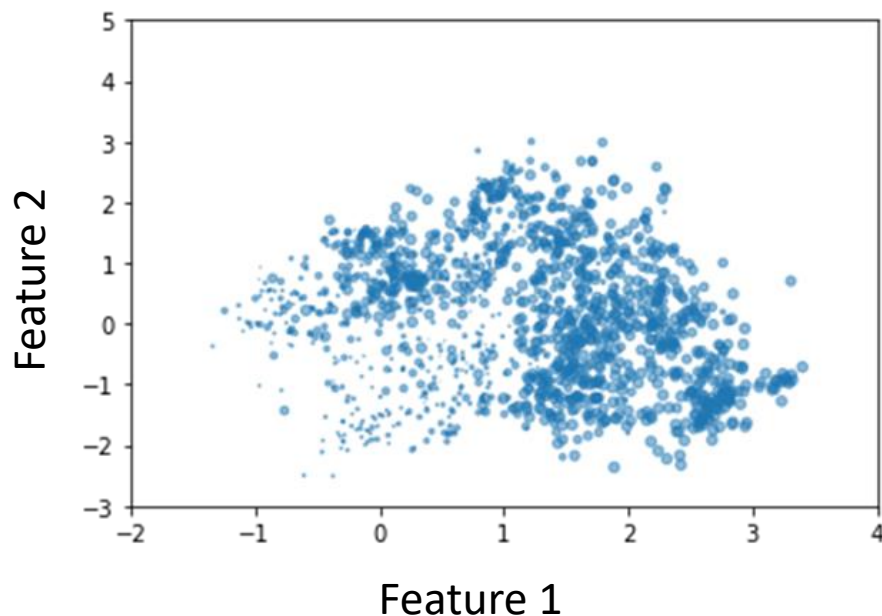
MO

MD

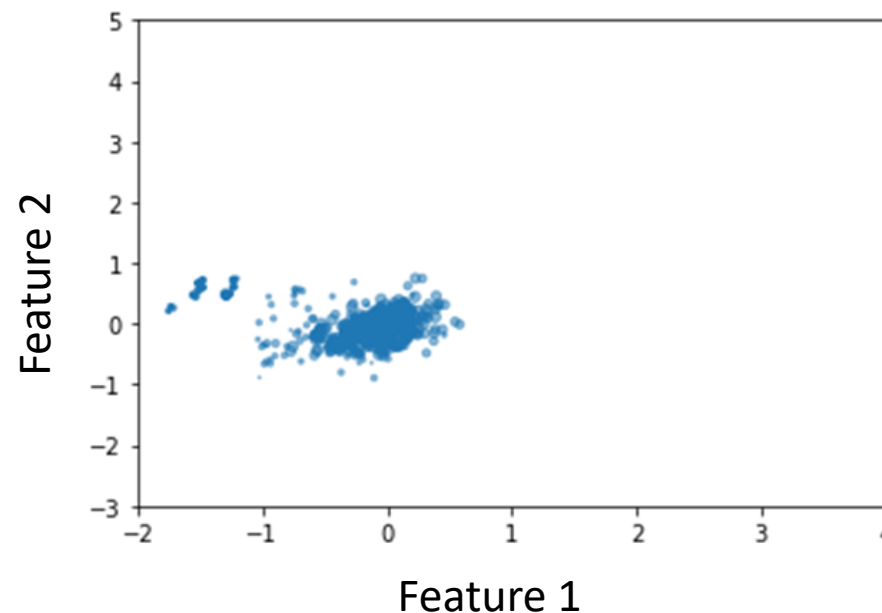
機械学習

500～600 nmに吸収を有する分子構造を10000個探索
計算レベル：Gaussian16/PM6/ZINDO

MCTS-GA-cluster法



従来の遺伝的アルゴリズム法



従来の遺伝的アルゴリズム法に比べて、当社が開発した構造発生方法MCTS-GA-cluster法は、多様な構造を生成することが確認できた。

メニュー画面

所望の物性入力

M-EVO Menu

Data

入力

編集

M-EVO GUI

設定

M-EVOについて

M-EVO

機械学習

構造探索

ベイズ最適化

分子提案

組成提案

MEVO

ジョブ投入	ターゲット物性	下限	最小	最大	上限	単位	重み	必須
X	SAスコア	1	1	4	10		100	<input checked="" type="checkbox"/>
X	最大吸収波長 (ML)	280	300	350	400	nm	100	<input checked="" type="checkbox"/>
+	高度な設定	0	0	0	0		0	<input type="checkbox"/>

実際のインプット

Add ML models from Host:

ジョブ一覧

ステータス

進捗

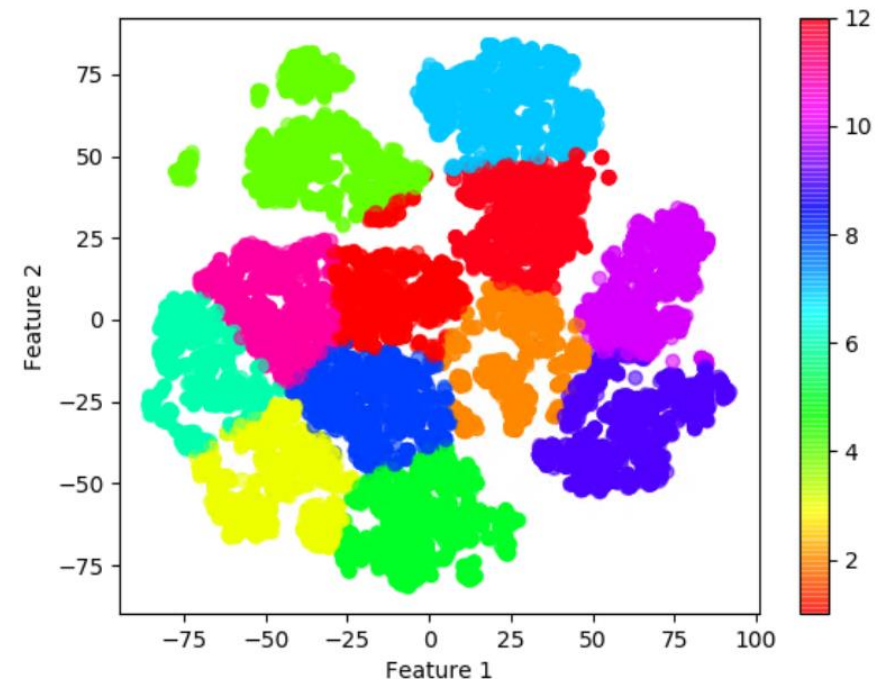
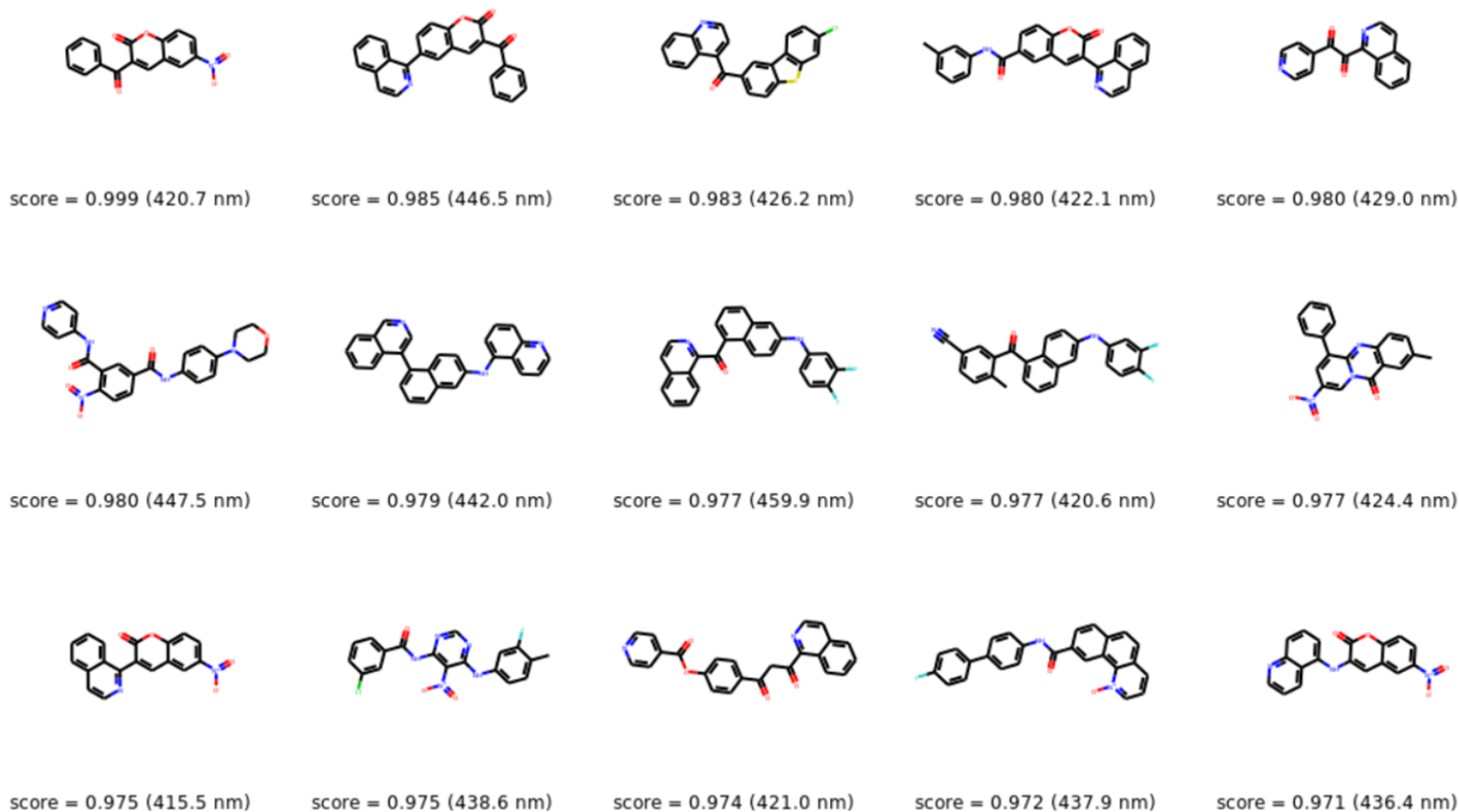
出力

ファイル名のベース:

・ 400 – 450 nmに発光波長を有する発光分子の探索例

各社のカタログデータをデータベースとして、機械学習を行い、発生した分子構造の発光波長を推定した。

計算時間：1万分子の探索にワークステーションで30分間



構造の分布図

短時間で多様な構造を探索できた。

・高屈折率分子の探索 : ① 屈折率1.95以上の分子構造を探索したい



データベース 281分子
(特許、Merck Index等から集めた分子構造)
SMILESのみのファイル
屈折率未記入

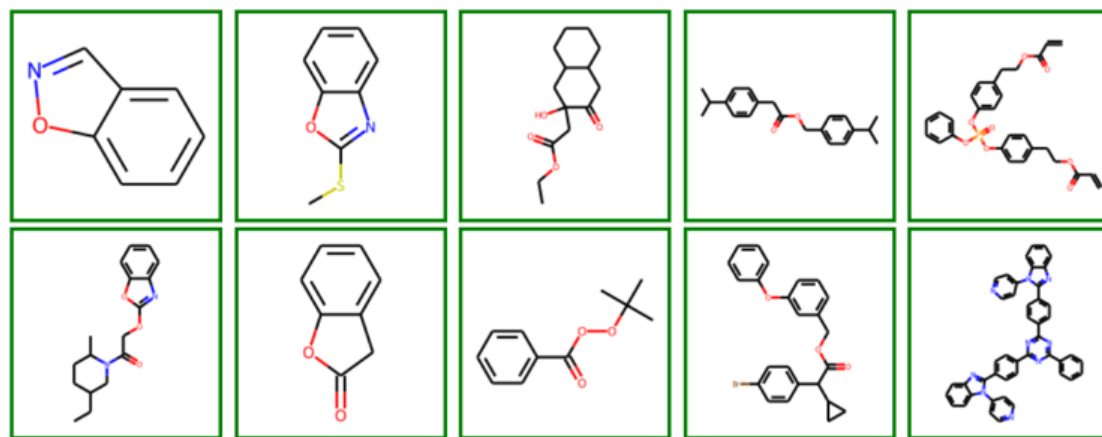
乱数で構造の遠い10分子を選択

屈折率測定 : ここでは文献値

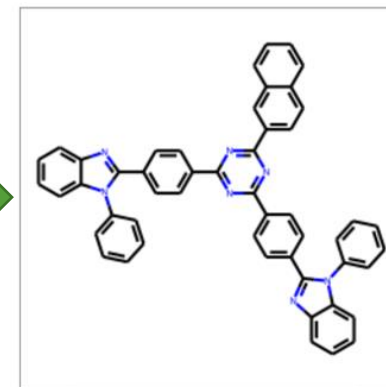
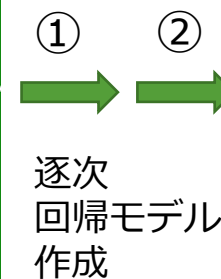
回帰モデル作成

次に実験すべき分子構造1個選択

最初の10分子の一例

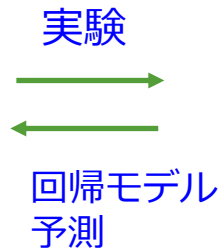


追加2回目の探索
12番目の分子構造
屈折率:1.963



ベイズ最適化：組成・製造条件の最適化

実験条件が遠い8水準を選び、
実験結果を記録する。



M-EVO®のガイドにしたがって、
1つずつ追加される実験水準に
ついて実験を行っていく。

組成提案

新しいジョブファイル | ジョブファイル読込

ジョブ名: Newjob221225

変数 実験 設定

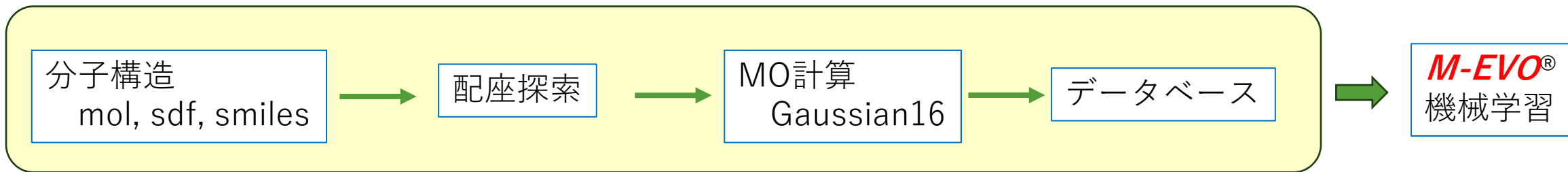
# of Exp.	ODBII	Bisphenol A	印加温度 / °C	印加時間 / sec	初期発色濃度 / arb	予測された 初期発色濃度 / arb	耐光性 / hr	予測された 耐光性 / hr	コメント
00001	0.233	0.767	120.566	8.801	---	---	---	---	
00002	0.573	0.427	131.626	6.204	---	---	---	---	
00003	0.31	0.69	76.343	5.577	---	---	---	---	
00004	0.548	0.452	87.768	7.212	---	---	---	---	
00005	0.57	0.43	122.053	6.89	---	---	---	---	
00006	0.455	0.545	94.234	9.545	---	---	---	---	
00007	0.296	0.704	123.057	6.823	---	---	---	---	
00008	0.346	0.654	102.494	8.606	---	---	---	---	

組成・実験条件保存

変数 実験 設定

# of Exp.	ODBII	Bisphenol A	印加温度 / °C	印加時間 / sec	初期発色濃度 / arb	予測された 初期発色濃度 / arb	耐光性 / hr	予測された 耐光性 / hr	コメント
00001	0.233	0.767	120.566	8.801	0.5	---	2	---	
00002	0.573	0.427	131.626	6.204	0.7	---	10	---	
00003	0.31	0.69	76.343	5.577	0.92	---	7	---	
00004	0.548	0.452	87.768	7.212	0.6	---	4	---	
00005	0.57	0.43	122.053	6.89	0.7	---	10	---	
00006	0.455	0.545	94.234	9.545	0.9	---	6	---	
00007	0.296	0.704	123.057	6.823	0.6	---	5	---	
00008	0.346	0.654	102.494	8.606	0.65	---	3	---	
00009	1	1	90	7	---	---	---	---	

選択した実験を削除 | 新しい実験 | 組成・実験条件提案 | 最初の実験提案



AutoQC WebServer [user001] [Menu](#) [Logout](#)

結果一覧

10 件表示

構造検索 CSV Excel

検索列を選択

MolID	Image	SMILES	User	Condition	ESP charges / e	Energy / eV	Dipole moment / Bohr electron	dH / eV	dG / eV	IR	Raman	Volume / cm ³ /mol	Polarizability (656.0nm) / Bohr ³
1		CC	hoge	B3LYP/6-31g(d)		-2172.2975	0.0000	2.1675	1.4646			39.1720	23.2686
2		c1ccccc1	hoge	B3LYP/6-31g(d)		-6319.8109	0.0000	2.8858	2.0573			69.4040	56.0764
3		CC=O	hoge	B3LYP/6-31g(d)		-4185.9329	1.0388	1.6506	0.8398			46.7910	24.1751
4		NCCc1ccccc1	user001	B3LYP/6-31G(d)		-9965.3886	0.5217	5.0249	3.8516				87.8345
5		O	user001	B3LYP/6-31G(d)		-2079.1946	0.8246						
6		C=CC	user001	B3LYP/6-31G(d)		-3208.4298	0.1397						

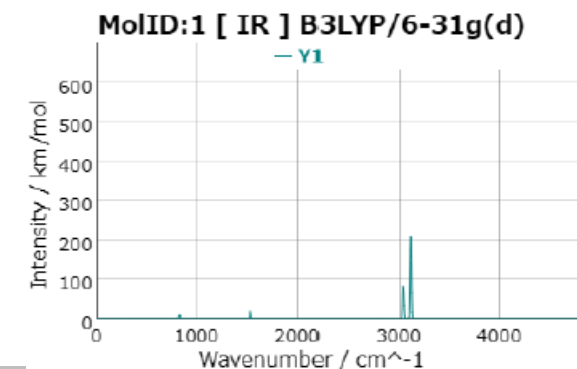
6 件中 1 から 6 まで表示

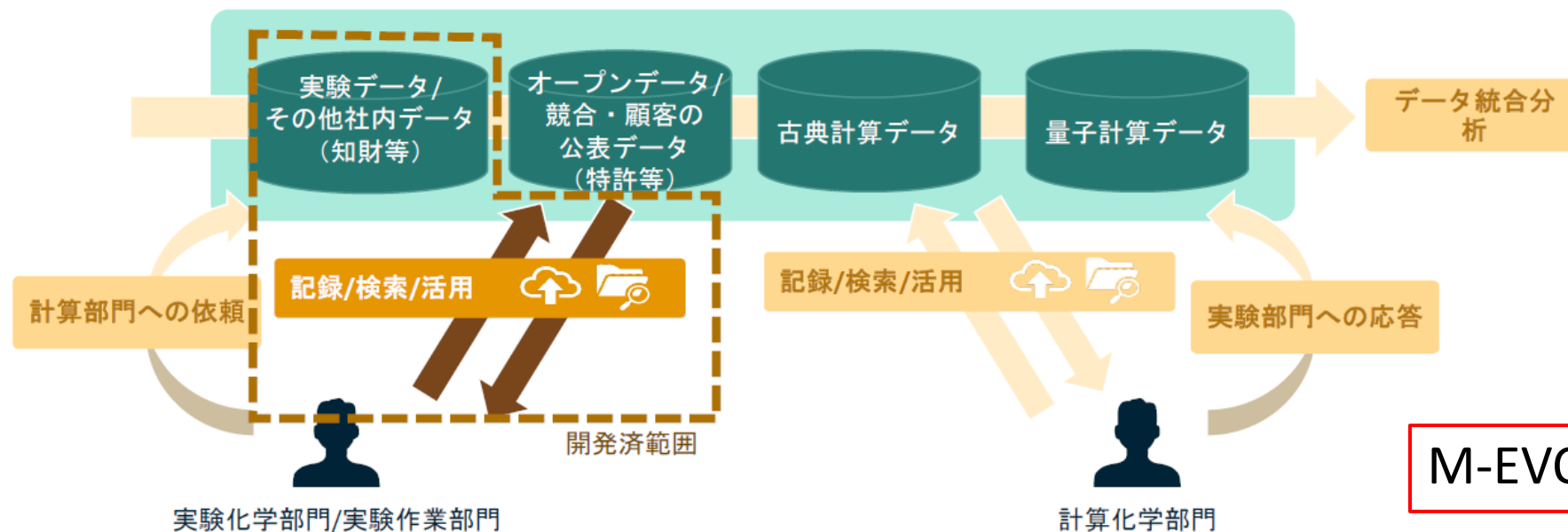
前 1 次

Excelファイルとしても保存できる。

	A	B	C
1	MolID	Image	SMILES
2			NCCc1ccccc1
3			O
4			Nc1ccccc1

各種スペクトルの表示ができる。





M-EVO®ベース最適化

カンバン方式でのステータス管理

電子実験ノート

データベース



シフト	シフト名	シフトID	シフト種別	開始日時	終了日時	ステータス	担当者	優先度	更新日時
1	シフトA	001	通常	2023/10/01	2023/10/01	完了	山田	1	2023/10/01
2	シフトB	002	通常	2023/10/02	2023/10/02	完了	田中	1	2023/10/02
3	シフトC	003	通常	2023/10/03	2023/10/03	完了	佐藤	1	2023/10/03
4	シフトD	004	通常	2023/10/04	2023/10/04	完了	鈴木	1	2023/10/04
5	シフトE	005	通常	2023/10/05	2023/10/05	完了	高橋	1	2023/10/05
6	シフトF	006	通常	2023/10/06	2023/10/06	完了	渡辺	1	2023/10/06
7	シフトG	007	通常	2023/10/07	2023/10/07	完了	山崎	1	2023/10/07
8	シフトH	008	通常	2023/10/08	2023/10/08	完了	佐々木	1	2023/10/08
9	シフトI	009	通常	2023/10/09	2023/10/09	完了	松本	1	2023/10/09
10	シフトJ	010	通常	2023/10/10	2023/10/10	完了	石川	1	2023/10/10



お問い合わせ先
hpc_chem@hpc.co.jp