

# 修士論文要旨

開放環境科学専攻	学籍番号 80226574	氏名 パク キョンア 朴 敬兒
(論文題目) ニューラルネットワークによる化学物質の内分泌攪乱性の予測		
(内容の要旨) 我々の生活および健康の向上に役立っている化学物質の中には、生体の正常なホルモン作用を攪乱させる化学物質が存在する。しかし、攪乱性が分かっているのは数十種類程度であり、大多数の化学物質は内分泌攪乱性が不明なまま流通している。そこで、内分泌攪乱性が未知のすべての化学物質について内分泌攪乱性を早急に評価する必要がある。 未知のすべての化学物質について動物実験で内分泌攪乱性を調べることは経済的、時間的に不可能である。そこで、化学物質の化学構造からその内分泌攪乱性を予測することができれば、動物実験の優先度が決まるので、化学物質管理の観点から意義は高い。 化学物質の化学構造から内分泌攪乱性のような毒性を予測する手法として、定量的構造活性相関の手法が用いられる。しかし、構造活性相関の手法を用いた既存の予測システムの性能は低く、実用的に利用できるものはない。ここで、内分泌攪乱性のようなもっと複雑な関係を強かに解析する手法を用いれば、既存の予測システムよりも性能が高いシステムを開発できる可能性がある。本研究では、その有効な手法としてニューラルネットワークを用いた。 まず、VBで3層型ニューラルネットワークをプログラムした。そして、130種類の化合物を対象物質と、ニューラルネットワークの入力層に化合物の構造記述子を入力し、出力層には内分泌攪乱性の有無を教師データとして入力した。構造記述子としては分子量、融点、水溶解度、蒸気圧、log P、イオン化ポテンシャル、LUMO エネルギー、絶対ハードネス、絶対電気陰性度の9種類を用いた。内分泌攪乱性予測の性能を求めるために全200種類の化合物の内199種類を学習データとしてニューラルネットワークに学習させ、収束後のニューラルネットワークに残りの1つを未学習データとして入力して出力層の結果から発ガン性の予測値を求め、実測値と比較するという操作を全ての化合物について繰り返した。その際、出力層の値が0.8以上なら内分泌攪乱性あり、0.2以下なら内分泌攪乱性なしと判定した。その結果、予測的中率は94.5%となり、既存のシステムより高性能の予測手法を開発することができた。 各々の構造記述子が予測性能に与える影響度を調べるために、記述子を8種類に減らし、解析した結果、どの記述子も内分泌攪乱性の説明には不可欠であることが分かった。また、本システムの予測性能は、絶対電気陰性度に一番影響されることがわかった。		

慶應義塾大学大学院理工学研究科 前期博士課程  
(内容の要旨は約25行程度で記入のこと)