

# 化学物質の抗酸化能

高精度で予測することに成功

#Organic # Chemical #Material Science #Material Informatics #Deeplearning with minimal data #High-precision predictions

食品中の化学物質の抗酸化能は、健康に対する重要な要素とされている。ここでは、一重項酸素吸収能測定法(SOAC法)による、脂溶性成分を対象とした活性酸素消去活性の測定方法に着目し、食品中の化学物質の抗酸化能を予測するモデルを作成、検証した。

## 【課題:Challenge】

新規または未検査の酸化防止剤のSOAC値について、実験データを元に決定するには、多くの時間と労力を要する。また、分子構造や溶媒パラメーター、SOAC値の関係は非線形で複雑である。

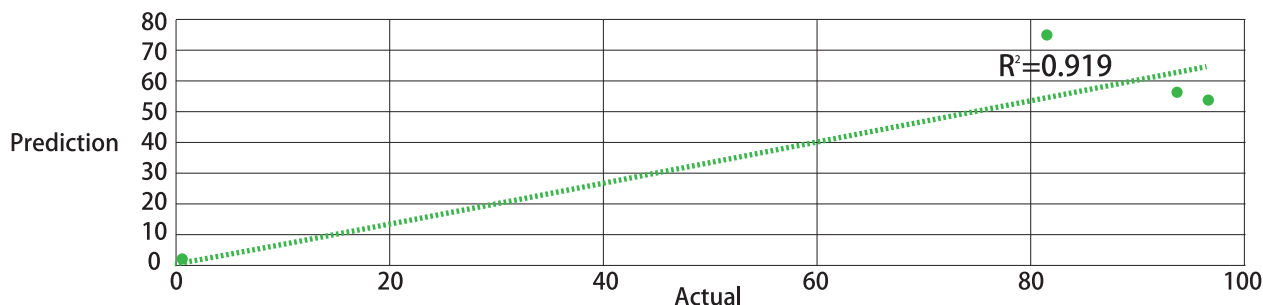
## 【ソリューション:Solution】

各SMILES(Simplified Molecular Input Line Entry System)表記から生成された分子フィンガープリントを入力パラメータとして、抗酸化物質のSOAC値を予測するAIモデルを作成した。ポリフェノールおよびカロテノイド抗酸化物質は、SOAC値の大きさに基づいて分類した。予測精度を高めるため、溶媒パラメータを取得し、SOAC値の計算に組み込んでいる。モデルは、既知の153種類の抗酸化物質のSOAC値と、検証用の42種類の値からなるデータセットで学習を行った。

## 【結果:Result】

高いAIモデル精度の作成: SOAC値10以上 RMSE: 0.094 SOAC値10以下 RMSE: 0.071

予測パフォーマンス: 各種化学物質の抗酸化能において、予測と実測の決定係数R<sup>2</sup> 0.919を達成



長岡伸一 (Affinity Science Corp.) 氏と共同で実施

出典: Ouchi A., Aizawa K., Iwasaki Y., Inakuma T., Terao J., Nagaoka S., Mukai K. Kinetic study of the quenching reaction of singlet oxygen by carotenoids and food extracts in solution. Development of a singlet oxygen absorption capacity (SOAC) assay method. J. Agric. Food Chem. 2010;58:9967-9978.

株式会社エイゾスは、Multi-Sigma™、AIコンサルティング、条件出し支援、受託研究開発などのAIサービスを提供しています。Multi-Sigma™ は、研究開発向けのクラウドAIソフトウェアで、実験の手間を大幅に削減し、最小限の実験データセットで研究者の実際の問題に対する革新的な解決策を見出す支援を可能とします。

### Contact Us

〒305-0031 茨城県つくば市吾妻1-5-7

<https://aizoth.com/service/multi-sigma/>

[info@aizoth.com](mailto:info@aizoth.com)

