

NEWSLETTER

日本化学会
情報化学部会

Division of Chemical Information and Computer Science
The Chemical Society of Japan

Vol. 4
No. 1

(January 1986)



目次

“情報化学” 雑感	田 中 信 行 1
関連行事	
第52春季年会化学情報・計算機化学プログラム	3
国際情勢	
米国企業におけるコンピュータ支援分子設計システムの状況 ...	花 井 荘 輔 4
国際会議開催案内	
第10回国際コーデータ会議について	6
文献紹介	
Computer Enhanced Spectroscopy (Vol.1, No.1 ~ Vol.2, No.4)	11
国際機関案内	
数理化学国際協会へのお誘い	14
情報化学雑学講座	
AIDS にならないように	細 矢 治 夫 15
会員の広場	16
部会員名簿	17

“情報化学” 雑感

日本事務器 (株) 田中 信行

情報産業の第一線にある会社に席をおき、日本化学会では欧文誌編集委員長として化学に関係しながら、しばらく“情報化学”にご無沙汰しているうちに、情報化学部会のニュースレターは第3巻の終りに近づき、情報化学討論会も第8回が終了した。討論会は極めて盛況であったと伺っている。藤原鎮男教授によれば、“情報化学”は発展期に入ったとのこと、ご同慶の至りである。本ニュースレターでは、既にこの分野の専門の方々が卓見を述べておられるので、改めて申し上げることもないが、折角の機会でもあるので、考えていることの中から、二つを記させていただくことにする。

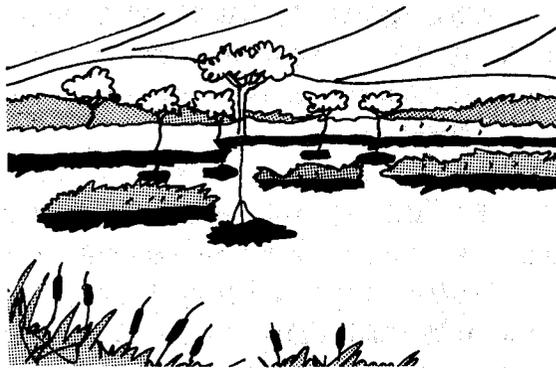
開かれた情報システム——千原秀昭教授が前号 (ニュースレターVol.3, No.5) に書いておられる“これからの化学情報システム”には全く同感である。国際純正応用化学連合 (IUPAC) の事業の一つとして、玉虫伶太博士 (現在福島大学教授) 山田明文博士 (現在長岡科学技術大学助教授) らのご協力を得て電気化学データベースを作成し、また、文部省科学研究費特定研究“トレースキャラクタリゼーション”の中で、情報システムTRACISの研究、構築をした経験などから痛感することは、情報システムは、“誰でもが、何時でも、どこからでも”使えなければいけないということである。東北大学に在籍当時、データベースを作成し、それらのデータベースを大型計算機センターでサービスしても、それを民間の研究者に利用させることはできなかった。このことに不満と不合理を感じたことしばしばであった。実際に会社の方などから、何故利用させてもらえないかという質問を受けたものである。

情報社会といわれ、さらに最近は知価社会という言葉も提案されている。情報あるいは知識の利用、活用に封建制が残ってはいけいないのである。利用する側が対価を払うのは当然であるが、対価を払えば自由に利用できる国内的にも国際的にも開かれた情報システムを構築したいものである。

“情報化学”——どなたか“情報化学”という言葉にこだわったと書いておられたが、筆者もこだわった一人である。事の始まりは化学の諸現象の計算機による処理であり、いまもそのことに変わりはない。計算機化学であり、化学情報処理学である。計算機の機能、性能が向上するとともに、計算機利用の手法も著しく進歩し、適用対象も拡大した。スーパーコンピュータによる分子軌道の計算、三次元ディスプレイによる分子の形状の検討、データベースとプログラムを活用する分子設計支援システムなど分子構造を対象にしたものから、化学反応の予測システムなどへとコンピュータの適用範囲は広がったが、やはり化学情報処理 (学) の域を出ていないように思う。つまり“I & C”である。

果して、“I & C”でない“IC”は成立するのであろうか。欧文誌に特別のセクションが設けられないだろうかという話が出たときに躊躇したのも、一つには“Information Chemistry”の名称のためであった。そういえば、情報化学部会の英名も“Division of Information Chemistry”ではなく、“Division of Chemical Information and Computer Science”である。

化学の名称には、無機化学、有機化学のようにその扱う対象を表現したもの、物理化学、分析化学のように方法論を示したものなどがある。生物化学は前者であり、電気化学はどちらかというと後者であろう。工業化学のように適用範囲を示したと考えられるものもある。(入試化学もその一つであろうか。)このような分類では、“情報化学”は方法論を示す物理化学、分析化学などの範疇に入ると考えてよいであろう。“情報理論に基づいた物質の構造と変化の取扱い”ということになるだろうか。とすれば、エントロピーも2種類のエントロピー、情報理論というエントロピーと化学で日常用いているエントロピーの両方が適用されるのであろうか。このような問題を情報化学部会の話題にしてみるのも一案ではなかろうか。これに関連して、湯川泰秀教授は注目すべきご意見を述べておられる(ニュースレターVol.3, No.3)。“情報化学”を厳密に定義すると取り扱う範囲が狭くなるかもしれないが、“情報化学”が成立すれば“応用情報化学”も成立するはずである。多くの人々が納得できる理論の構築こそ学問の発展につながるのではなかろうか。情報化学部会の一層の発展を期待する次第である。



関連行事

第52春季年会 化学情報・計算機化学プログラム

日時 4月1日(火)～4日(金)

場所 同志社大学(京都市上京区今出川通烏丸東入)

○会場 (尋真館31番教室)

4月4日(金) [化学情報・計算機化学]

(9:00～10:00) (座長 飯塚 健)

4001 C-13NMR化学シフト予測のCHEMICSへの応用(豊橋技科大) ○太田好人・船津公人・阿部英次・佐々木慎一

4002 C-13NMRシグナル数の予測(豊橋技科大) ○勝見広幸・船津公人・阿部英次・佐々木慎一

4003 H-1およびC-13NMR化学シフト間の定量的相互関連性の検討と構造推定への応用(豊橋技科大) ○Carlos A. Del Carpio・船津公人・阿部英次・佐々木慎一

4005 データベース・ANALYST(京工繊大繊維・工芸) ○山田 武・山田 悦・佐藤昌憲

4006 人工知能を利用した赤外スペクトル解析システム(愛知工大・日本分光・名大工) ○鬼頭繁治・金内美子・服部 忠・村上雄一

(10:00～11:00) (座長 田辺和俊)

4007 分子設計のための人工知能システムANALOGSの試作(2)(東京農工大工・東大理) 藤井良彦・川原淳次 ○安川民男・岡崎廉治

4008 虚遷移構造による有機反応の記述(富士フィルム足柄研) 藤田眞作

4010 3次元最大共通部分構造の自動認識に関する研究(豊橋技科大) 高橋由雅 ○前田重徳・阿部英次・佐々木慎一

4011 マイクロコンピュータによる動画システムMOLFASSを用いた分子構造模型の高速表示(埼玉大工・アデカア-ガス) 時田澄男 ○杉山孝雄・富永信秀

4012 拡張SPIRESの開発(1)パーソナルコンピュータによる会話型データ入力支援システムの開発(豊橋技科大) 佐藤裕久 ○奥山 徹・阿部英次・佐々木慎一

(11:00～12:00) (座長 阿部英次)

4013 分子力場計算用入力データ作成インターフェースプログラムの開発(化技研) ○田辺和俊・都築誠二

4014 インターカレーションシュミレーションにおける初期配置の検討(臨床研・お茶大理・群馬大) 鈴木 勇・熊崎ひとみ・細矢治夫・中田吉郎・大上徳子・神沼二真

4015 グラフィックディスプレイを用いた化合物構造処理システム—SPHINCS—の開発(3)構造物性・テキスト結合検索(富士フィルム足柄研) 宮川正美・中山章子 ○花井荘輔

4016 擬整分子構造の探索とその表示(群馬大学教育) 飯塚 健

4017 理論的節点番号付けによる計算機立体化学(東工大資源研) 内野正弘

4018 非経験的分子軌道プログラムMOLYXの開発(1)(慶大理工) ○岩田未廣・鎌田慎一・依田信幸・森山誠司・武藤良弘

※12:00～12:30 情報化学部会の総会をこの会場にて行います。皆様ご出席下さい。

米国企業におけるコンピュータ支援分子設計システムの状況

D.B.Boyd (Eli Lilly) QCPE Bulletin 5, (3), 85 (1985) より抄訳

- * 目的
米国の製薬、農業、化学、香料、写真業界48社におけるCAMD (Computer-Assisted Molecular Design) の現状を調査した。この分野で、長期的に大規模な活動を続けている会社はすべて含まれる。
- * CAMDの範囲
分子力場計算 (MM), 分子グラフィックス (MG), 化学構造データベース, 量子力学計算 (QM), 定量的構造活性相関 (QSAR), 合成経路設計をふくむ。
- * 計算機化学者 (Computational Chemist) とは
上記の各手法を開発・利用し, molecular modelling の計算をおこない, ソフトの設計, 開発, 保守をおこない, 分子設計では合成化学者と協力し, 他の化学者にはCAMDに関して援助の源となる。
次の人々は含まれない。電算システム部の人, データインプット担当者, CAMDソフトを使うが, 設計・保守はおこなわない化学者。
- * 計算機化学者の数
20年前に, Abbott, Dow, Eli Lilly, Scheringの各社が専門家を採用 (約10人) してから, 約5年で倍増のペースで増加し, 1985年には150人に達した。このうち75%がPhDと相当者である。合成化学, 理論化学, X線結晶学を専攻した人が多く, 量子力学専門家は18%である。
- * 多用されるシステム
CAMD専門家では, MMとMGが最も多用される。有機化学者は, MGと化学構造データベースの利用が多い。QMと分子ダイナミックス (MD) は, 計算時間を多く食う。
- * 盛んな会社
製薬会社が最も活発である。多くの専門家が社内用に特別にソフトを開発している会社もある。5人以上の専門家を抱えているのは, Abbott, Du Pont, Lederle/Cyanamid, Merck, Rohm & Haas, Searle, Smith-Kline, Upjohn の各社である。
- * 合成化学者との関係
CAMDが成功するためには, 有機化学者との密接な協力関係が重要である。合成化学者とCAMD専門家との比率は, 48社で平均2.9:1である。この比が低いのは, Abbott, Alcon, Allegan, Nelson, Philip Morris, Norwich Eaton/Procter Gamble, Searle, Shell, Union Carbide である。
- * 組織
コンピュータを合成化学者の手にゆだねている会社が多い。81%の会社では, 化学者 (Bench Chemist) が, 19%の会社では, CAMD専門家が, 主として計算を実行する。CAMD研究の組織的關係は次のようになっている。

・合成化学部門の一部	40%
・物理/分析部門の一部	17
・独立部門	15
・情報/コンピュータ部門の一部	15
・その他 (開発部, ポリマー部門 など)	13

半数の会社にCAMDのコンサルタントがいる。3分の1は, 計算機で働らく博士をうけいれようとしているが, 実際に働いている人の数は少ない。

* ハード
主コンピュータおよび周辺機器は、次のとおりである。(複数回答)

・コンピュータ		
VAX 11/780, 785, 730		77%
IBM 3033, 3083, 4341, etc.		31
Prime 450, 550, etc.		21
DEC 10 or 20		10
FPS 164 array processor		8
Gould SEL		6
・グラフィック端末		
E & S PS300		40%
Tektronix		35
Envision		31
Retrographics VT640		31
IMLAC		25
E & S MPS		17
NEC APC		15
AED		13
Hewlett-Packard		10
IBM PC		10
・プロッタ		
Hewlett-Packard		52%
Versatec		40
Tektronix		21
Envision		6

* ソフト

この種のソフトの開発には多くの人手が必要なので、QCPE, 大学, ソフト開発会社などの外部から導入する場合が多い。プログラム開発を外注しているのは、19%の会社である。96%の会社がQCPEのサービスを知っている。

44%の会社が、次の Ab-initio MO 計算プログラムのいくつかを利用している (多い順)
GAUSSIAN80, GAUSSIAN82, HONDO5, GAMESS, GAUSSIAN76, MONSTERGAUSS

48社で、市販のソフトを購入している比率は次のとおり。

Molecular Design Ltd.	67%
Tripos Associates	25
Chemical Design Ltd.	15
Bolt Beranek and Newman	6

80%を越える会社が、市販のソフトを導入していることになる。分子モデリングのソフト以外に、化合物の物性予測・検索, データベースマネジメント, 文献検索および統計解析の製品を購入できる。

Symposium on Computational Chemistry (Indiana Univ., March 8, 1985) にて

国際会議開催案内

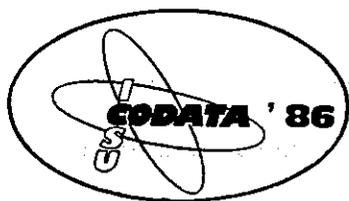
第10回国際コデータ会議について

コデータはCommittee on Data for Science and Technology (CODATA: 科学技術データ委員会)の略称でInternational Council of Scientific Unions (ICSU: 国際科学連合協議会)に属し、IUPACのような国際的学会連合および国が会員となっている国際機関であります。

主たる目的は、名称の通り科学技術の分野におけるデータに関する問題を協議、調整することである。従って情報化学部会の活動とは関連の深い国際活動と言えます。

コデータは2年に一度総会が催され、その際研究発表の場としての会議が開かれる。データの国際流通、高度利用、国際的標準化などに関する討議の場として最適のものであるので、都合のつけられる方の積極的参加をお奨めします。参考までに次回のプログラムおよび関係資料を下記に紹介します。

(筑波大学電子情報工学系 藤原 謙)



Tenth International CODATA Conference
The Westin Hotel
Ottawa, Canada

July 14 - 17, 1986

Sponsored by

The National Research Council Canada
with the collaboration of
The Royal Society of Canada
and
The Government of Ontario
Ministry of Industry and Trade

LOCATION AND DATE OF CONFERENCE

The Conference will be held at The Westin Hotel, 11 Colonel By Drive, Ottawa, Canada from Monday, July 14 to Thursday, July 17, 1986.

CODATA

CODATA, an interdisciplinary Scientific Committee of the International Council of Scientific Unions (ICSU), deals with data of importance to science and technology, quantitative data on properties and behavior of matter, quantitative data and characteristic values of biological, geological, and astronomical systems and other experimental and observational values in all areas of science represented by the member Unions of ICSU. Many of its activities bear upon problems which are common to the various disciplines.

SCIENTIFIC PROGRAM

Theme

"The Computer Handling and Dissemination of Data"

Invited Speakers

Prof. C.B. Alcock (Canada)	Real Time Data Acquisition
Dr. I. Ansara (France)	<i>Title not available</i>
Dr. Claude Bardinet (France)	Multisatellite Thematic Mapping on Tanzania Using NOAA 7, TIROS N, METEOSAT and LANSAT Data
Prof. Hélène Bestougeff (France)	Applications of Database and Knowledge-based Systems to Scientific Data
Dr. E. Bibikova (USSR)	The Problems of Isotopic Data Bank Development for Geochemical Modelling
Prof. Rita Colwell (USA)	<i>Title not available</i>
Dr. B.O. Fabricius (Finland)	Environmental Measurements in Soils/Biota
Dr. R.J. Feldman (USA)	Molecular Modelling; Interpolating Between Structure Data Points
Dr. Janne Forslund (Denmark)	Environmental Measurements in Water
Ms. Susan K. Foss (USA)	Evaluation of Fatigue Properties
Dr. Yuzuru Fujiwara (Japan)	Databases and Knowledge Bases as Scientific Research Tools
Prof. C.C. Gotlieb (Canada)	Options for Dissemination
Prof. Mu-Sun Guo (China)	Data Activities in the People's Republic of China
Dr. Gerard Guiho (France)	Expert Systems and Industrial Needs
Prof. L.V. Gurvich (USSR)	Data Bank on Thermodynamic Properties as Example of Some Problems in Creation of Chemical Databases
Dr. Jurgen Hahn (FRG)	Environmental Measurements in Air
Dr. M.M. Hall (UK)	Polymeric Property Data
Prof. Dieter Hammer (GDR)	Research Databases in the Academy of Sciences of the GDR
Dr. Joseph Hilsenrath (USA)	Micro Computers and Data Handling

Dr. W.W. Hutchison (Canada)	Computer Data Activities — The CODATA Perspective
Prof. I.L. Khodakovsky (USSR)	Feedback of Algorithms of Thermodynamic Data Consistency and Computer Simulation of Geological Systems
Prof. V.A. Koptug (USSR)	Problems of Input of Structural Formulas of Organic Compounds in Computer Databases.
Dr. A.D. Kozlov (USSR)	Systems of Standards and Reference Data of COMECON
Dr. A.D. Kozlov (USSR)	Industrial Materials Data Bank. Basic Principles and Problems of Organization
Dr. H. Langer (FRG)	COAL-DATA — a Collection of Numerical Data on Coal, Coal Liquids and Coal Chemicals
Dr. Edward S. Lennox (UK)	Database Usage and Needs in British Biotechnology
Dr. Roy Lindseth (Canada)	Seismic Data
Dr. Richard Luckenbach (FRG)	Chemical Handbooks Online: Status Quo & Perspectives
Dr. D.L. Massart (Belgium)	Environmental Data — Database Issues
Dr. Kenneth B. McAfee (USA)	Modelling Electronic Materials Preparations and Processes — Optical Communications Fibres and III-V Semiconductors
Dr. J. McCarthy (USA)	The Structure of Scientific Data
Dr. Randy Michelsen (USA)	Exploiting Parallelism in Expert Systems
Mr. Roger V. Moore (UK)	Digital Mapping Offers New Advances for Hydrological Modelling and Design Procedures
Dr. Fujio Okamura (Japan)	Application of Databases to CAD of Inorganic Materials
Prof. G. Östberg (Sweden)	Overview of the CODATA Materials Data Workshop at Schluchsee in September 1985
Prof. Arthur D. Pelton (Canada)	Numerical Databases and Thermodynamic Computations in Metallurgy and Materials Science
Prof. G. Petzow (FRG)	Evaluation and Data Base Storage of Ternary Alloy Phase Diagrams
Dr. S. Ramachandran (India)	<i>Title not available</i>
Mr. Lewis B. Sibley (USA)	Development of the DOE/ASME/NBS Computerized Tribology Database and Information Service
Dr. Hideaki Sugawara (Japan)	Data Activities for Life Science & Biotechnology in Japan
Prof. John Tukey (USA)	Using Probability Calculations for Greater Security, Not Less
Dr. G.M. Ugiansky (USA)	The NACE-NBS Corrosion Data Program

Prof. Kiyoshi Wadatsumi Development and Usage of Accumulative File Systems in Geoscience (Japan)

Prof. Takeo Yamamoto Data Handling and Dissemination in the Age of Expert Systems (Japan)

This is a preliminary and incomplete list. The completed list will appear in the Program booklet.

DATABASE DEMONSTRATION

A feature of the conference will be the inclusion of a facility for scientific and technical source database developers to present demonstrations of interest to their colleagues. In the case of mainframe databases, this facility will include appropriate hardware and software for access to commercial telecommunication networks; for those wishing to demonstrate microcomputer databases, there will be equipment provided along with table space and electrical power for anyone who might prefer to use his/her own system. While the facility will be provided on a complimentary basis, participants are expected to cover their telecommunications costs.

Those wishing to participate or those interested in receiving more information are requested to forward the enclosed form at their earliest convenience. Upon receipt, the Database Demonstration Coordinator will immediately make contact in order to determine technical details such as required communication protocol, type of terminal characteristics and similar relevant information. Furthermore, it is desirable that for those requiring a telecommunications linkage, a trial run be conducted (prior to the arrival of the demonstrator) in order to ensure complete compatibility. Interested participants are, therefore, encouraged not to delay notification of their intent.

AD HOC MEETINGS

These are intended for specialized discussions **TO BE ORGANIZED BY THE PARTICIPANTS** during the Conference period. Rooms will be reserved for these meetings, and facilities will be available to display daily announcements of such meetings. Please indicate your requirements by writing to the Executive Secretary prior to the Conference.

EXHIBITS

Provision is being made for an exhibition of equipment and services relevant to CODATA's broad range of interests. This is clearly an excellent opportunity for suppliers of communication and information products and services (database producers and disseminators, computer equipment manufacturers, telecommunications network operators and publishers, for example) to reach scientific data professionals from 20-30 countries. Further information may be obtained from the Executive Secretary, CODATA '86.

Official Languages

The official languages of the conference are English and French. All correspondence concerning the conference may be carried out in either of the official languages. Simultaneous interpretation will be provided for the plenary sessions.

Abstract Volume

A book containing abstracts of all invited and contributed papers will be distributed free of charge to all registrants at the conference.

Letters of Invitation

The Chairman of the Tenth International CODATA Conference will be pleased to send a personal invitation to participate in the Conference to any scientists making such a request to the Executive Secretary. It should be understood that such an invitation is not a commitment to provide any financial support.

Proceedings

The Proceedings of the Conference, to be published in early 1987, will contain the full texts of the plenary lectures, most of the symposia papers and some of the contributed papers. CODATA reserves the right to limit the length of all published papers. Authors are requested to indicate on the Abstract Form whether they are interested in having their contributions published in the Conference Proceedings. Manuscripts must be submitted in camera-ready format and delivered at the time of the Conference. Camera-ready sheets, along with the appropriate instructions, will be mailed by March 1, 1986.

CONFERENCE REGISTRATION

In order to participate at the Conference everyone must complete the Registration Form and mail it with the appropriate remittance to the Executive Secretary at the following address: CODATA '86, National Research Council Canada, Ottawa, Canada K1A 0R6

Each registrant should submit a separate registration form. Extra copies of this bulletin and the forms are available upon request.

Payment should be by cheque or money order in Canadian dollars, or the equivalent in U.S. dollars, made payable to CODATA '86 (NRC).

To qualify for the reduced rate the remittance must be received by May 15, 1986. If a registration form is received without payment it will not constitute registration.

Registration Fees

The registration fee covers attendance at the sessions and the exhibitions, attendance at the reception on Sunday evening, July 13, a copy of the abstract book, a program book, and coffee each morning and afternoon.

	Before May 15	After May 15
Registration Fee	\$225 Cdn or \$160 US	\$250 Cdn or \$180 US
Students	\$ 30 Cdn or \$ 20 US	\$ 30 Cdn or \$ 20 US

Cancellation and Refunds

Registrants may withdraw before June 1, 1986. All refunds are subject to a \$20.00 (Cdn) handling fee.

Confirmation of Registration

Receipts will be sent as soon as the remittance is received. Please present the receipt upon arrival at the Registration Desk in order to collect the conference material. Note that receipts will not be mailed out if there is not sufficient time to ensure delivery. Such receipts can be claimed at the registration desk upon arrival.

Registration Desk

The Registration Desk will be located at The Westin Hotel, outside the Confederation Ballroom, and will be open during the following hours:

Sunday, July 13	14:00 — 21:00 hours
Monday to Thursday, July 14-17	08:00 — 17:00 hours

SOCIAL EVENTS

Opening Reception

The opening reception will be held Sunday evening, July 13, at The Westin Hotel. All participants are invited to attend.

Conference Banquet

The banquet will be held on Wednesday evening, July 16, at 19:00 hours at The Westin Hotel. Tickets for this event will be available at a cost of \$25.00 (Cdn). Please indicate on the registration form the number of tickets required.

Conference Secretariat

CODATA '86
Huguette Lacoste, Executive Secretary
National Research Council Canada
OTTAWA, CANADA
K1A 0R6
Telephone: (613) 993-9009
Telex: 053-3145
BITNET/EARN: NUM001 @ TSS NRC00

文献紹介

COMPUTER ENHANCED SPECTROSCOPY

1983年に創刊されたこの雑誌は、主としてミニコンピュータやマイクロコンピュータを用いてスペクトロメータ（クロマトグラフを含む）の性能を向上させることに関する論文を収録している。ここでいう性能の向上とは、単に装置の精度や感度に関してではなく、データの解釈にまで及ぶものである。

日本では豊橋技術科学大学の佐々木慎一副学長がreginal editorとなっている。

1983年1月～3月 第1巻第1号 発表題目、著者、頁

Design, Control System and Software Organization of Multi-Purpose NMR Spectrometers. I. The Basic Requirements and Overall Design, *A. Bar, J. Smidt and T.A. Tiggelman*, p.3

Electron Paramagnetic Resonance Spectrometer Data Accumulation and Reduction System for Microcomputers, *J.D. Lipscomb and R.W. Salo*, p.11

Using a Hewlett-Packard Minicomputer for the Processing of Gamma-ray Spectra from Neutron Activation Analysis, *P.L. Main and M.J. Hughes*, p.17

Automated Control of a Mass Spectrometer Using a Central Minicomputer and Distributed Microprocessors, *R.S. Stradling, P.A. Ryan and J.D. Wood*, p.25

Curve Resolution of Electronic Absorption Spectra by Least-squares Methods as Applied to Transition Metal Compounds, *A. Bartecki, J. Soltowski and K. Kurzak*, p.31

A Multipurpose Computer Interface for a Scanning Optical Spectrometer, *D. Mihailovic, J.F. Ryan and W.J. Siertsema*, p.39

Measurements of Fast Changes in Absorption and Fluorescence Spectra Using an OMA System, *E. Friz, G. Gauglitz, T. Klink and A. Lorch*, p.49

1983年4月～6月 第1巻第2号 発表題目、著者、頁

Recent Advances in the Structure Elucidation System, CHEMICS, *H. Abe, I. Fujiwara, T. Nishimura, T. Kida and S.-I. Sasaki*, p.55

Apple II Interface to a Biomation 1010 Transient Recorder. A Powerful Spectroscopic Signal Averager, *R.T. Bailey, F.R. Cruickshank and N. Wagstaffe*, p.63

Interfacing a Microcomputer to an Analytical Instrumentation through an RS 232C Standard Interface, a Simple Software Implementation, *L. Fornari and G. Tessari*, p.71

Microprocessor Driven Electron Spin Resonance (ESR) Spectrometer, *F. Momo, G.A. Ranieri and A. Sotgiu*, p.79

The Use of Computers in the Processing of Large Arrays of Spectroscopic Data, *M.Kh. Salakhov, I.D. Grachev and I.S. Fishman*, p.83

COMEDY, A Microcomputer Based System for Controlling Pulsed Dye-Laser Experiments, *H.-D. Kronfeldt and S. Wasserroth*, p.89

Use of an Apple II plus Microcomputer as a Multichannel Analyser for X-ray Fluorescence Spectrometry, *K.Borowski, I.L.Preiss, J.J. La Brecque and C.Pauley*, p.99

Software for Deconvolution of Overlapping Spectral Peaks and Quantitative Analysis by ^{13}C Fourier Transform NMR Spectroscopy, *A.Kumar, C.H.Sotak, C.L.Dumoulin and G.C.Levy*, p.107

1983年7月~9月 第1卷第3号 发表题目、著者、頁

Identification of Multicomponents in Mixed Mass Spectra by Library Search System, *A.Yasuhara, J.Shindo, H.Ito and T.Mizoguchi*, p.117

A Smart Algorithm for Accelerating the Data Collection on an X-ray Diffractometer, *J.M.Quitin, H.Van de Velde and G.Platbrood*, p.125

Design, Control System and Software Organization of Multi-purpose NMR Spectrometers, 2-Spectrometer Control, Data Acquisition and On-line Data Processing, *A.F.Mehlkopf, A.Bax, J.Smidt and T.A. Tiggelman*, p.131

The Use of a Computer Controlled Luminescence Spectrometer in the Study of the Time Resolved Emission of Trivalent Europium in Yttrium Oxide, *A.T.Rhys Williams and M.J.Fuller*, p.145

Data Acquisition and Spectrometer Control with a Rockwell AIM-65 Microcomputer, *D.Bianchi, F.Cavatora and G.Lenzi*, p.151

Optimization of Parameters for Fourier Self-deconvolution, 1-Minimization of Noise and Side-lobes without Apodization, *W.-J. Yang and P.R.Griffiths*, p.157

Adaptation of the Top-hat Filter for Data Acquisition in Magnetic-sector GC/MS Instruments, *A.D.Graddon, J.F.Smith and J.D.Morrison*, p.167

Curve Resolution by Computer, a Caveat, *G.Snatzke*, p.171

1983年10月~12月 第1卷第4号 发表题目、著者、頁

Application of Membership Function to Automated Structure Analysis of Infrared Spectra of Organic Compounds, *Y.Ishida and S.Sasaki*, p.173

Advantages of UNIX Based Laboratory Data Processing, *R.L.White*, p.185

A Microcomputer Based Digital Data Acquisition and Manipulation System for Raman Spectroscopy, *M.Diem*, p.191

Microcomputer Controlled Decoupler for NMR Spectroscopy, *V.Sklenar, I.Krejci, V.Husek and Z.Stareuk*, p.201

A Microcomputer Network for Intelligent Linkage of Spectroscopic Instruments, *H,Susaki and S.Minami*, p.209

The Use of Computers in the Investigation of Optically Thick Inhomogeneous Plasmas by Their Emission and Absorption Spectra, *M.Kh.Salakhov, E.V.Sarandayev and I.S.Fishman*, p.213

1984年1月~3月 第2卷第1号 发表题目、著者、頁

Efficient Algorithms for the Processing of Multidimensional Spectroscopic Data Arrays, *I.D.Grachev, M.Kh.Salakhov and I.S.Fishman*, p.1

SIRIUS - An Efficient Infrared Spectra Search System, *K.Tanabe, J.Hiraishi, S.saeki, I.Suzuki and M.Tasumi*, p.13

A Comparison Between Kawata-Minami and Savitzky-Golay Smoothing Methods with Raman Spectral Data, *K.Tanabe and J.Hiraishi*, p.17

A Microcomputer Data Acquisition System for Mass Spectrometry, *D.M.Desiderio, J.S.Laughter, I.Katakuse, M.Kai and J.Trimble*, p.21

A Microcomputer-controlled Photoelectron Spectrometer for the Detection of Short-lived Gas Phase Intermediates, *O.Grabandt, H.G.Muller and C.A.de Lange*, p.33

Control of a Novel Ion-translational-energy Spectrometer Using an Apple Microcomputer, *G.W.Trott, F.M.Harris, M.S.Thacker, S.Singh and J.H.Beynon*, p.43

1984年4月~6月 第2卷第2号 发表题目、著者、頁

Application of Computers to Vibronic Spectra, *A.Bartecki and J.Myrczek*, p.53

Automatic Peak Assignments for *in vivo* ^{31}P NMR Spectra, *C.Dumoulin*, p.61

Optimization of Parameters for Fourier Self-deconvolution:2-Band Multiplets, *W.-J.Yang and P.R.Griffiths*, p.69

A Programmable Spectrometer Interface Based on a Commercial Microcomputer System, *L.Van Haverbeke, H.Duijvewaardt and M.A.Herman*, p.75

New Approach to Increased Dynamic Range in Fourier Transform Infrared Spectrometry, *G.M.Brissey and C.L.Wilkins*, p.85

Microprocessor Synchronization of a Multichannel Analyser with a Monochromator, *M.Carleer and J.P.Walgraeve*, p.91

1984年7月~9月 第2卷第3号 发表题目、著者、頁

COSMOS - Combined Search System for Molecular Spectra, *K.Tanabe, J.Hiraishi, T.Tamura, O.Yamamoto, M.Yanagisawa and N.Wasada*, p.97

Software System for Calculation and Manipulation of Spectral Line Parameters, *O.K.Voitsekhovskaya, Yu.S.Makushkin, A.I.Popkov, V.P.Rudenko, N.N.Trifonova, N.E.Yakovlev, O.N.Sulakhina and V.N.Cherepanov*, p.101

Automated Infrared Spectrometer for Measurement of Surface Electromagnetic Waves, *G.N.Zhizhin, A.I.Kuryatnikov, G.Yu.Lopatovskii, M.A.Moskalova, V.I.Silin, V.V.Tkachev and V.A.Yakovlev*, p.107

Automated Spectral Data Processing, *C.L.Dumoulin and J.E.Harrington*, p.113

The Regularized Algorithm of Local Emission Reconstruction in the Spectroscopic Study of an Optically Thin Plasma of Arbitrary Shape, *M.Kh.Salakhov, I.D.Grachev, R.Z.Latipov and I.S.Fishman*, p.117

On-line Processing of Densitometer Readings of Photographic Emulsion Plates for Spectrochemical Analysis using a Desk-top Computer, *M.F.Guns*, p.125

Computer Studies on the Composition and Electronic Spectra of Separate Complex Species in Solution, *A.Bartecki and Z.Staszak*, p.129

1984年10月~12月 第2巻第4号 発表題目、著者、頁

Using a Hewlett-Packard Minicomputer for the Processing of Tunable Diode Laser Spectra, *G. Blanquet and J. Walrand*, p.135

A Multibus/IEEE-796 Compatible Interface Board for Instrumentation Control and Data Acquisition, *D. Ricci and D. Guidarini*, p.141

Several Alternative Implementations of a Numerical Method for Extracting Single-Component Mass Spectra from GC-MS Data Arrays, *M. D. King*, p.149

Photokinetic Evaluation by Microprocessor Controlled Fluorescence Data Acquisition, *G. Gauglitz and R. Goes*, p.159

Aids for Building and Maintaining Speciality In-house Mass Spectral Libraries, *D. F. Magin and B. W. Good*, p.167

国際機関案内

数理化学国際協会へのお誘い

1985年9月ユーゴスラビアのドゥブロヴニクで、International Symposium on Application of Mathematical Concepts to Chemistryが開かれた（「化学と工業」2月号「レーダー欄」参照）。その時にInternational Society for Mathematical Chemistry設立の話し合いがもたれ、次のような趣旨と組織が決まった。ご関心の向きは細矢宛に連絡をいただきたい。

- 目的
1. 数理化学の発展を推進する。
 2. 数学者と化学者の間で緊密な連絡をはかる。

- 活動
1. 年に3回程度のニュースレターの発行（当面は無料）。
 2. 国際会議の開催。
(1987年3月15~20日、International Conference on Graph Theory and Tonology in Chemistry、米国ジョージア州、アセンズ、ジョージア大学)
 3. 雑誌 (Journal of Mathematical Chemistry) の発行 (1987年予定)。

組織

会長	Milan Randic, Dept.Math., Drake Univ., Des Moines, Iowa 50311, USA.
事務長	D.H.Ronvray, Dept.Chem., Univ.of Georgia, Athens, Georgia 30602, USA.
幹事	Danail Bonchev, Burgas, Bulgaria.
	Brce King, Univ.of Georgia, USA.
	Poul G.Mezey, Univ.of Saskatchewan, Canada.
	Osker E.Polansky, Max-Planck Inst., Mulheim, FRG.
	Haruo Hosoya, Univ.of Ochanomizu, Tokyo, Japan.
会計	Alan L.Goodson, Columbus, USA.

(お茶の水女子大 細矢治夫)

A I D S にならないように

お茶の水女子大学理学部 細矢 治夫

あなたの頭が化学のことで一杯だったなら、Analysis of Radical Reactions という英語を見れば一寸まごつくであろう。しかし、数学の人ならば、「根号(平方根のような)解の解析」として素直に頭に入ると思う。日本語にしてみても、「反応機構」という言葉を知っているのは、理学や工学の研究者の中でも化学の間人だけではないだろうか。生物学では、反応という言葉はaction-reactionの反作用という意味で使われている。物理系や工科系の人ならば、機構という言葉は機械のメカという意味に受けとるであろう。また分子科学研究所は、岡崎国立共同研究機構の一翼を担っている。

さてこれが英語の頭文字だけから成る省略語だったらどうであろうか。正にジャーゴン(jargon)の氾濫で、分野が違えば何が何だかわからないのが現状である。わたしが昔行っていたアメリカのある大学の学際的な研究所では、同じIRという言葉が、2階の連中はInternational Relation、1階の連中はInformation Retrieval、地下の研究室ではInfrared (Spectrum) という意味で使っているという笑い話があった。英語の先生が、「あれ、infrareなんて動詞があったっけ？」と頭をひねるかも知れない。過ヨウ素酸(Periodic Acid)を周期酸と訳す人だっているかも知れない。「現代用語の基礎知識」を見ると、Polyisoprene RubberをIRということもあるらしい。

化学や情報学で使われている略語で紛らわしいものを並べてみよう。

- | | | |
|-----|---------------------------------------|----------------|
| BCG | Bromocresol Green | (pH指示薬でよく使う) |
| | Bacillus Calmette Guerin | (腕の傷あとがにくらしい) |
| CD | Circular Dichroism | |
| | Compact Disc | |
| | Cash Dispenser | (現金自動支払機) |
| | Civil Defense | (民間防衛) |
| | Certificate of Deposit | (譲渡性預金) |
| JCS | Journal of Chemical Society | |
| | Japan Convension Service | |
| | Joint Chiefs of Staff | (統合参謀本部) |
| QED | Quantum Electrodynamics | (量子電磁力学) |
| | Quod Erat Demonstrandum | (証明終了) |
| SDI | Selective Dissemination of Infomation | (知らないと部会のもぐり) |
| | Strategic Defense Initiative | (こわいこわい戦略防衛構想) |

おまけに、もっとこわいAとZを一つずつ。

- | | |
|------|--|
| AIDS | Acquired Immune Deficiency Syndrome |
| | Acquired Information Deficiency Syndrome |
| ZIP | Zone Improvement Program |
| | Zero Information Person |

お互いに気をつけましょう。

会員の広場

トレーニングキットとして発売された手造りマイクロコンピュータのTK-80に始まり、PC-8001、PC-8801を経て、i8086を搭載したPC-9801に至って、NECとのご縁も深まった。Techknowシリーズのようなシステム解析の本にも助けられ、マイクロコンピュータに関する知識は極めてゆっくりではあるが着実に一歩ずつ前進しているように思う。この間に学生実習用に多数の機材を何回も借用させていただいた。NECのご関係の方々に心から謝意を表したい。

ところで、私たちの研究室では、小規模ではあるが熱量測定システムを開発してきた。マイクロコンピュータは、このシステムの一部分になって、信号のやりとり、測定結果のオンライン処理、数値微分などの計算を行う必要があるの、ソードのマイクロコンピュータを何台か愛用している。雷の稲妻とともに画面が一瞬みだれたのを記憶しているが、マイクロコンピュータそのものに起因するトラブルは、ハードウェア、ソフトウェアともにあまり経験がなかった。NEC製品もPC-8001ではトラブルは全く経験していない。PC-8801には、ディスクドライブにPC-80S31を使用しているが、ディスクI/Oエラーや、使えなくなったフロッピーディスクが続出し、コピーを作ることが不可欠になった。PC-9801F2は、買ったばかりでもあり、ソフトウェアもNECの純正品以外を初めて使ったので、様子がわからなかったこともあるが、本体の上に、ニデコの高解像度ディスプレイを乗せて、管理工学研究所の松を走らせると、ある部分の漢字変換時に極めて再現性よくディスクI/Oエラーがでた。松に傷がついたのかと思って書き換えてもらったり、ディスクドライブが不良品ではないかと思って修理に出したりした。原因がわかってみれば、どうしてもっと速く気がつかなかったのかと思うが、実は、本体ケース（外箱）はディスプレイの重みを支えることができず、フロッピーディスクの読み書き用ヘッドがディスプレイの重みで押さえつけられていた。本体ケースとディスクドライブとの間に2mm位の空間があり、指で押してもポコポコ音がする。ニデコのディスプレイは、純正品より重かったのだろう。いずれにせよ、多社の製品を組合わせて使う時は、自分でトラブルを解決しなければならないので、注意が必要である。以来問題はありませぬので、念の為。

（お茶の水女大理化 藤枝修子）

情報化学部会部会員増加にご協力を！

情報化学部会が発足して3年がたち、部会活動もようやく軌道に乗り、これからいよいよ活発な発展へと進もうとしておりますが、当部会の会員数はまだ 250名余であるというのが現状であります。

当部会では予てから、日本化学会会員以外の人でも部会活動に参加できるよう、準部会員制度の導入を日本化学会理事会に申請していましたが、このほど承認されました。

準部会員（日本化学会非会員）は、正部会員（日本化学会会員）より部会費が 1,000円高い他は、ほとんどそのメリットはかわらず、年6回のニュースレター配布や部会主催事業の参加費割引などの特典を受けられます。

この準部会員制度の導入を機会に、多くの方々のご入会を期待しておりますので、部会員の皆様もご協力ください。

【昭和61年部会費】	正部会員（日本化学会会員）	2,000円
	準部会員（日本化学会非会員）	3,000円
	法人部会員	一口 30,000円（一口以上）

※ご入会を希望される方は、下記あて入会申込書をご請求下さい。

〒101 東京都千代田区神田駿河台1-5

社団法人 日本化学会 会員部（電話 (03) 292-6160）

ニュースレター Vol.4, No.1

1986年1月31日 発行

事務局：101 東京都千代田区神田駿河台1-5, 日本化学会情報化学部会（略号 DCICS/CSJ）

Office of the Secretary: The Chemical Society of Japan, 1-5, Kanda-Surugadai, Chiyoda-ku, Tokyo 101, Japan

NEWSLETTER

日本化学会
情報化学部会

Division of Chemical Information and Computer Science
The Chemical Society of Japan

Vol. 4
No. 2

(March 1986)

目次

部会行事

- 第9回情報化学討論会(発表募集) 1

関連行事

- 第14回構造活性相関シンポジウム(発表募集) 1

海外動向

- 191 st ACS National Meeting
Division of Chemical Information 2
Division of Computers in Chemistry 3

国際会議

- Pittsburgh Conference & Exposition on Analytical
Chemistry & Applied Spectroscopy 7
European Conference on Artificial Intelligence 8
AAAI-86 The national Conference on Artificial Intelligence 9

文献紹介

- Quantitative Structure-Activity Relationships 10
Journal of Chemical Information and Computer Sciences 14

最近のニュースから

- 学術情報センターの創設 16
電子図書館実現へ 17
CASの新しい情報処理技術 17
Journal of Chemical Information and Computer Science誌に新企画 18

機関利用案内

- CAS ONLINE 大学割引制度 19

図書紹介

- A Handbook of Computational Chemistry 20

- 会員の広場 22

部 会 行 事

第 9 回 情 報 化 学 討 論 会 (発 表 募 集)

- 共 催 日本化学会・日本化学会情報化学部会・日本農芸化学会・日本薬学会
日本分析化学会
- 日 時 10月17日(金)、18日(土)
- 会 場 名古屋工業大学鶴舞キャンパス(名古屋市昭和区御器所町)
- 主 題 コンピュータを用いる化学の方法一般
※口頭発表のほかにポスター発表の場を新設しますので、ふるってご応募
下さい。ポスター発表も3～5分の口頭説明が可能(予定)。

講演申込締切日 5月31日(土)〔必着〕

- 1) 講演題目・研究場所・発表者氏名(講演者に○印をつける)、
 - 2) 申込者氏名、3) 申込者連絡先(所属・郵便番号、所在地、電話番号)
 - 4) 150～200字の内容要旨(プログラム編成用)
- をB5の用紙にお書きのうえ、下記あてお申し込み下さい。

講演予稿集原稿締切日 8月2日(土)〔必着〕

オフセット用原稿用紙を6月下旬にお送りします。

申込先 ㊟101 東京都千代田区神田駿河台1-5
日本化学会第53秋季年会係 (電話 (03) 292-6169)

関 連 行 事

第 1 4 回 構 造 活 性 相 関 シ ン ポ ジ ウ ム (発 表 募 集)

- 共 催 日本化学会・日本農芸化学会・日本薬学会・日本農業学会
構造活性相関懇話会
- 日 時 10月18日(土)、19日(日)
- 会 場 名古屋工業大学鶴舞キャンパス(名古屋市昭和区御器所町)
- 主 題 医薬・農薬などを含む天然あるいは合成生理活性物質の構造と活性との相関
関係の解析、とくに定量的方法および定量的ドラッグデザイン

講演申込締切日 5月31日(土)〔必着〕

- 1) 講演題目・研究場所・発表者氏名(講演者に○印をつける)、
 - 2) 申込者氏名、3) 申込者連絡先(所属・郵便番号、所在地、電話番号)
 - 4) 150～200字の内容要旨(プログラム編成用)
- をB5の用紙にお書きのうえ、下記あてお申し込み下さい。

講演予稿集原稿締切日 8月2日(土)〔必着〕

オフセット用原稿用紙を6月下旬にお送りします。

申込先 ㊟101 東京都千代田区神田駿河台1-5
日本化学会第53秋季年会係 (電話 (03) 292-6169)

191ST ACS NATIONAL MEETING

NEW YORK CITY, N.Y.

APRIL 13-18, 1986

DIVISION OF CHEMICAL INFORMATION

1. NLM Chemical and Toxicological Files Overview, *M. Perkins*
2. Chemical Information and Information Technology - A History, *R.L. Wigington*
3. Optical Strage Technology, *T.C. Bagg*
4. Optical Disk Storage for Biomedical Documents, *G.R. Thorma*
5. Optical Publishing: New Information Products, *J.B. Schwerin*
6. Human Factors and Computer Technology in the Workplace, *L.F. Norman*
7. Metaphor, Wherefore, and Whatfour of Artificial Intelligence Expert Systems, *E.T. Cremmins*
8. Knowledge-Based Systems and the Evolution of Information Systems, *S.K. Sieck*
9. Telecommunications: An Overview, *C.A. Johnson*
10. An Intergrated Architecture for Information Access, Distribution, and Utilization, *F. Zappert*
11. A Manager's View of the Impact of New Technology, *P.B. Moses*
12. Expansion of Online Retrieval Services of Local Mass Storage Devices, *W.F. Marovitz*
13. Knowledge Engineering in Chemical Information and Retrieval Systems, *W.W. Zachary*
14. An Expert System for Machine Aided Indexing, *J. Lucey and C. Martinez*
15. Development of a Knowledge-Based System to Aid in Searches of the Chemical Abstracts, *P.J. Smith, D.A. Krawczak, S. Shute and M. Chignell*
16. An Expert System for First Responders to Chemical Emergencies, *J.M. Hushon*
17. An Expert System as a Search Tool for a Coal Liquefaction Database, *W. Fuchs, W.C. Peters, I.A. Monarch and J.G. Carbonell*
18. Electronic Document Delivery of Primary Research Journals, *T.B. Hickey and R.A. Love*
19. Consolidation of Library Technical Services at Exxon Research & Engineering Company, *E.H. Soled*
20. Experiences at Colorado School of Mines Searching CAS ONLINE, CA File, under their Academic Program, *A.A. Lereu*
21. Microcomputer Access to an interactive Academic Library Network, *L.M. Wert*
22. Teaching Graduate Students to Access the Chemical Literature - Experiences and Perspective, *J. Pinzelik*
23. Citation Analysis and Research Mapping - Principles and Practice, *H.G. Small*
24. CHEMPOX - Toxic Substance Database Manager, *A. Milch*
25. Designing a Full-Text Database: the Primary Journal Full-Text Database through STN international, *R.A. Love and L.R. Garson*
26. Online Searching of Chemical Abstracts by End-Users at Exxon with a SEARCHMASTER-Based Front-End System, *K.R. Walton*

27. Development and Implementation of PEER REVIEW PLUS: A Computerized Tracking System for Editorial Offices, *J.D.Spring, J.T.Keys and L.R.Garson*
28. Automated Telecommunication Software for Editorial Offices, *J.D.Spring, J.T.Keys and L.R.Garson*
29. Software Engineering and Chemical Database Applications, *E.K.F.Ahrens, R.L.Briggs, Jr., G.M.Hazen, L.O.Serrao, M.F.Van Duyne and B.Van Vliet*
30. Algorithmic Identification of Data Elements in the Chemical Literature, *D.P.Martinsen*
31. Award Address. (herman Skolnik Award sponsored by the Division of Chemical Information.) Chemical Information Across International Borders: Problems and Solutions, *D.B.Baker*
32. Information Processing - An Integral and Solutions, *P.Rhyner*
33. Main Characteristics and Trends of Chemical Information, *J.Michel*
34. Japan's Contribution to International Chemical Information Activities: Present Status and Prospects, *H.Chihara*
35. Will the New Information Order Differ from the Old Chaos ? , *H.Grunewald*
36. Chemical Use and Economic Information - Industry Needs and Sources, *M.Sittenfield*
37. Chemical Business Information - Status and Outlook, *E.J.Johnson*
38. Patents Databases as Sources of Business Information, *M.W.Jones*
39. A New Dimension in Business Intelligence, *K.O'Leary*
40. CHEMCYCLOPEDIA - A New Concept in Buyer's Guides, *J.H.Kuney*
41. Chemical Business (Summary) Reports, *C.E.Lumley, Jr.*
42. Vendor Demonstrations by Corporate Assessment Support Service, Pergamon InfoLine, PROBE Economics and DIALOG Information Services
- 43.
44. How to Index a Polymer Patent and Why, *P.A.Dorler*
45. Polymer Searching in the IFI COMPREHENSIVE Database, *K.M.Donovan, B.B.Wilhide and S.L.Hunsicker*
46. Using the IFI CLAIMS Databases in a Large, Diversified Company, *V.K.Veach*
47. Online Use of the CLAIMS Patent Databases, *B.E.Mason*
48. Information Science Abstracts: An Overview of History, Purpose and Goals, *D.Thomas and M.D.Rosenberg*
49. Online Demonstrations of IFI Databases, *R.Richeson and D.Slaughter*

DIVISION OF COMPUTERS IN CHEMISTRY

1. Molecular Similarity and Notations for Molecular Graphs.
Microcomputer Programs for I.C.P.A.C. and Nodal Nomenclature, *W.C.Herndon and S.H.Bertz*
PRESENTED (Three types of linear notational schemes for molecular graphs)
INCLUDED (Linear string representation of IUPAC and nodal nomenclature system)
OUTLINED (Computer programs for unique numbering and final notation)
COMPARED (Molecular graph similarity by string matching, similarity by all subgraphs)
PRINCIPLE_OF_THE_METHOD_IS (nth power of the adjacency matrix counts paths of length n)
2. Molecular Distortions in Small Spiroalkanes, *W.Leuf and R.Keese*
ANALYZED_BY_SYMMETRY_DEFORMATION_COORDINATES (The configuration of the central C(C)₄ fragment of spiro[m,n]alkanes with $2 \leq m, n \leq 4$)

3. Molecular Modelling of Organophosphorous Compounds: Parameterization, *C.S.Kralhanzel, G.S.Famini and J.M.Leonard*
DISCUSSED (MM2 for phosphorus(III) and phosphorus(V) compounds)
DETERMINED_BY_AB_INITIO_AND_SEMI-EMPIRICAL_MOLECULAR_ORBITAL_METHOD (the force constants and barrier to rotation)
4. Vibrational Modelling in the Bixbyite Structure, *L.A.Tucker and S.H.Lin*
APPLIED_FOR_VIBRATIONAL_FREQUENCY_CALCULATION_OF_BIXBYITE_STRUCTURE_FOR_YTTRIUM_OXIDE_AND_SEVERAL_OF_THE_CUBIC_RARE_EARTH_OXIDES (Minimization method WMIN of W.R. Busing)
5. Kinetics, Molecular Mechanics and MO Calculations on a Microcomputer, *K. E. Gillbert, J. J. Gajewski, S. Russo*
PORTED_TO_THE_IBM_PC (DIFSUB, MM2, MNDO)
DISCUSSED (Hardware advances to boost the power of PC into the range of a VAX 11/750)
6. Combining Sample Preparation and Analytical Instrumentation Utilizing Laboratory Robotics, *M. L. Salit, P. Barrett, B. J. McGratten A. C. Cerino*
DESCRIBED (A system for automated sample preparation and analysis)
PRESENTED (A typical application to illustrate the level of communication between the robot, analytical instrument and laboratory computer in a system)
7. Automated Sample Preparation and Instrument Interfacing for Totally Automated Analyses, *R. K. Brown, K. E. Sharicz, A. Martin*
DISCUSSED (Interfacing the automatically prepared sample with the subsequent instrumental measurement)
APPLIED (UV-VIS, GC, LC)
8. A New Robotics Language, *A. J. Koller, G. G. Fisher, C. L. Guglielmino, S. A. Liddell*
DESIGNED (Robotics language PERL to help the user interact with hardware)
9. Fast Applications and Start-up Techniques for Laboratory Robotics, *R. K. Brown, K. E. Sharicz, P. R. Volk*
DEVELOPED (Technique to speed start_up of a laboratory automation system)
INCLUDED_IN_THESE_TECHNIQUES (The concept of sample scheduling and menu based input)
10. Robotics Automation of Spectrophotometric and Kinetic Assays, *J. F. Williams, P. A. McGrattan*
USED_FOR_TWO_TYPICAL_BIOASSAYS (The Perkin_Elmer MasterLab robotics)
DEVELOPED (Task scheduling trading rules for batch and serial processes)
COMPARED (Manual versus robotics)
11. Interactive Statistical Graphics, *A. J. Wilks*
MADE_POSSIBLE_THE_CONVERGENCE (Interactive statistical computing and statistical graphics)
12. Automated Spectrum Interpretation and Molecule Assembly, *A Recent Merger, B. D. Christie, M. E. Munk*
DESCRIBED (A strategy for the conversion of the spectral properties of a compound to a set of compatible molecular structures)
SPECTRAL_DATA_AND_MOLECULAR_FORMULA_ARE_EXPRESSED_AS (Two separate sets of spectrally compatible fragments)
STRUCTURES_ARE_CONSTRUCTED_FROM (Fragments of the first set)
MOLECULAR_ASSEMBLY_PROCESS_IS_PROSPECTIVELY_CONSTRAINED_BY (The fragments in the second set)

13. Pattern Recognition Studies of Complex Chromatographic Data,
P. C. Jurs, B. K. Lavine
ANALYZED (GC profiles of cuticular hydrocarbon extracts from 179 fire ants)
GC/PR_USED_FOR (Differentiating between European and Africanized bees)
14. Self-Training Interpretive Systems for Unknown Spectra, *F. W. McLafferty, D. B. Stauffer*
SELECTED (Some twenty classes of mass spectral data which are indicative of particular types of structural features)
MOLECULAR_FEATURES_ARE_IDENTIFIED_BY (Matching the unknown's spectral data in each class against the corresponding data of all reference spectra and checking the best matching for the occurrence of common functionalities)
15. Statistics, Numerical Analysis, Artificial Intelligence and Quantitative Interpretation of Non-ideal Spectra, *G. C. Levy, E. J. Dudewicz, T. J. Harner, F. Delaglio*
STATISTICAL_AND_NUMERICAL_ANALYSIS_USED_FOR (In vivo NMR spectroscopy)
16. Use of Interorganization Networks Among R & D Laboratories,
D. L. Estrin
DISCUSSED (The organization implications of inter-organization communication by computer networks)
THE_ANALYSIS_SUPPORTED_BY (Inter-Organization Network among industrial and university research and development laboratory)
17. LEP3NET and HEPNET: Computer Networks for Research in High Energy Physics, *H. B. Newman*
DISCUSSED (Experience gained in the planning, design, and implementation of two networks for high energy physics)
18. PROPHET Workstations and Network Access, *B. J. Woznick, D. L. Franklin*
PROPHET_CONSISTS_OF (Graphics workstations and collections of host computers)
HOST_COMPUTER_PROVIDE (Database, computational, and mail services)
THE_COMMUNICATION_ARCHITECTURE_BASED_ON (The Internet Protocol)
19. Wide Area Networks in Support of Research: APPANET, BITNET, CSNET, and NSFNET, *R. D. Edmiston*
NETWORKS_COMPARED (ARPANET, BITNET, CSNET, NSFNET)
EMPASIS_ON (Support of scientific research)
20. Award Address: (ACS Award for Computers in Chemistry sponsored by Digital Equipment Corporation.) Electronic Laboratory, *R. E. Dessy*
ELECTRONIC_LABORATORY_CONSISTS_OF (Personal computer, Integrated software packages, local area networks, laboratory Information Management system, and mainframe)
DESCRIBED (Introductory lecture of the electronic lab.)
21. Chemical Microsensors, *H. Wohltjen*
DESCRIBED (Fabrication techniques, operating mechanism, and typical performance capabilities of several emerging microsensor technologies)
EXAMPLES (Surface acoustic wave devices and chemiresistors)
22. Laboratory Information Management Systems: The Framework of Laboratory Data Access and Scientific Decision-Making, *K. Caserta*
DESCRIBED (Current LIMS technology, choosing or developing LIMS, application of EXPERT systems, software unification schemes, voice data entry, project management software)

23. Mainframe Technology in a Laboratory Workstation, *S. L. Mullen*
 IMPLEMENTATION_OF_A_MAINFRAME_ARCHITECTURE_USING_SEMICONDUCTOR_TECHNOLOGY
 (MASSCOMP systems)
 EQUIPPED_WITH(high speed integrated real_time subsystem)
 UP_TO (2 million samples per second)
24. Digital Image Processing and Analysis, *P. A. Jansson*
 APPLICATIONS_INCLUDE (2-D gel-electrophoresis pattern quantitation, computer
 aided microscopy for neuroanatomy, the analysis of particle size and shape)
25. Automated HPLC Methods Development with Optimization, *S. Abbott,
 R. Bach, W-H. Chu, J-L. Excoffier, J. Karnicky, T. Schlabach*
 DESCRIBED(Expert chromatographic assistance system)
 SYSTEM_PERFORMS(The task of designing, analyzing, optimizing, and trouble
 shooting the HPLC separation method)
26. A Laboratory Robotics Toolbox, *G. D. Owens, R. J. Eckstein*
 ROBOTICS_TOOL_BOX_CONTAINS (Six compartments)
 COMPONENTS_IN_COMPARTMENTS (1. justification and planning tools, 2. robotics
 engines composed of microcomputers linked to mechanical manipulators,
 3. pneumatic components to handle heavy loads, 4. fluid_handling devices,
 5. peripheral equipment engineered to be 'robot-friendly', 6. variety of
 sensors)
27. The Kalman Filter in Analytical Chemistry: A New Approach for
 Solving Old Problems, *S. D. Brown*
 FILTERING_INVOLVES (The fitting of experimental data to some sort of a model)
 FITTING_DONE_FOR (To remove noise, to resolve different components, to estimate
 parameters)
 KALMAN_FILTER_IS(The newer method for filtering data obtained on chemical
 system)
 DESCRIBED_THE_USE_OF_KALMAN_FILTER_IN (Noise removal, peak resolution,
 parameter estimation, and drift compensation)
28. Energy Calculations and Molecular Dynamics in Protein Engineer-
 ing, *M. Levitt*
29. Protein Engineering of Yeast Tribse Phosphate Isomerase, *G.
 Petsko, T. Alber, T. Ahearn, R. Davenport, A. Klivanov*
 SITE_DIRECTED_MUTAGENESIS_USED_TO (Unravel the details of the catalytic mechani
 sm, and improve the stability of the protein against irreversible thermal
 inactivation)
30. Forecasting the Commercial Impact of Proteing Engineering,
K. Ulmer
 EXAMINE (Current status of protein engineering and the central role of
 molecular modeling)
31. Prediction of Protein Structure, *F. Cohen, I. D. Kuntz, R.
 Abarbanel, R. Fletterick*
 DESCRIBED (A pattern-matching program to identify turns and other secondary
 structures in globular protein)
32. Computer Tools for the Prediction of Protein Structure, *M. J. E.
 Stemberg*
 ONE_CAN_MODEL_BUILD_A_MOLECULE_OF_UNKNOWN_STRUCTURE (Based on the known
 conformation of an homologous protein)
 AREAS_OF_MAJOR_CONFORMATIONAL_CHANGE_ARE (The loop region connecting the
 regular secondary structures)
 ENERGY_CALCULATION_APPLIED_FOR (The loop region)

33. Computational Tools for Macrostructural Analysis and Comparison,
M. N. Lledman
TOOLS_FOR_ANALYSIS_AND_COMPARISON_OF_MACROMOLECULAR_STRUCTURES_CONSIST_OF
(The linear distance plot, difference linear distance plot, distance matrix)
TOOLS_ENABLED (The separate, quantitative comparison of secondary, tertiary
and quaternary levels of structure)
STRUCTURAL_SIMILARITY_DEFINED_INDEPENDENTLY_OF_THE_AMINO_ACID_SEQUENCE_HOMOLOGY
_BY (The tools)
CAN_BE_RELATED (The three dimensional structure, physicochemical properties)
34. Designing Completely New Proteins, *D. Richardson*
COMPUTER_GRAPHICS_IS_CRUCIAL_AT_TWO_DIFFERENT_STAGES (In examining the known
protein structures to derive and evaluate the design rules, in constructing
a model of the proposed structure and modifying it)
AIME (To provide direct experimental tests of the various design rules)
ARE_IN_THE_PROCESS_OF_CONSTRUCTION (8-strand beta sheet sandwich, a 4-helix
cluster)
35. Computer Modeling as a Predictive Tool in Protein Engineering,
R. Bott
SITE_SPECIFIC_MUTAGENESIS_USING_RECOMBINANT_DNA_EMPLOYED_TO (Change
the enzymatic properties of several enzymes)
MOLECULAR_MODELING_USED_TO_PREDICT (Result of single amino acid substitutions)
36. Computational Approaches to Designing Structurally Stable Proteins,
R. Salemme
37. New Loops for Old in Thermolysin, *R. C. Lander*
FOLD_REVERSIBLY_INTO_FOUR_HELIX_DOMAINS (The C-terminal fragments of
thermolysin)
OFFER_A_CONVENIENT_TEST_GROUND_FOR_THEORIES_OF_PROTEIN_FOLDING (These small
domains)
PRESENTED (A method of producing a wide variety of connections between helices)



PITTSBURGH CONFERENCE & EXPOSITION ON ANALYTICAL CHEMISTRY
& APPLIED SPECTROSCOPY

ATLANTIC CITY, N.J.

MARCH 10-14, 1986

SIMPOSIA

ON-LINE IDENTIFICATION IN HIGH-PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHY

On-line HPLC/NMR, *C.L. Wilkins and D.A. Laude Jr.*

Ultrasensitive Photothermal Deflection Spectroscopy for Liquid
Chromatography, *T.W. Collette and J.H. Griffin*

Magic-LC/MS - a Powerful Detector for Liquid Chromatography,
R.F. Browner, P.C. Winkler, D.D. Perkins and L.E. Abbey

Continuous Solvent Elimination HPLC/FT-IR - Recent Developments,
P.R. Griffiths and D.J.J. Fraser

Plasma Emission as an Element-Sensitive Detector for Liquid
Chromatography, *M.B. Denton, T.R. Smith and R.B. Bilhorn*

PERSONAL COMPUTERS IN THE LABORATORY - A TUTORIAL WORKSHOP

- I. Selecting and Implementing Systems
- II. Instrumental Control and Data Acquisition
- III. Computer Interfacing

This workshop will begin at the introductory level and will proceed through to an intermediate level. It is the intention of the lectures that the attendees, after participating in the workshop, will be in a position to more fully appreciate the following symposium on "Computers in the Laboratory: Dedicated, Intelligent, and Communicative." Furthermore, for those who are in a position to purchase hardware, this workshop will provide an excellent introduction to the variety of hardware available, much of which will be available for scrutiny on the exposition floor.

COMPUTERS IN THE LABORATORY: DEDICATED, INTELLIGENT, AND COMMUNICATIVE

- New Laboratory Automation, *S.R. Crouch*
- New Generation of Intelligent Instrumentation, *M.B. Denton, R.B. Bihorn and G.R. Sims*
- Integrating Laboratory Automation, *J. Liscouski*
- Computer languages for Instrumentation, *J.P. Avery*
- Some Aspects of Artificial Intelligence for Analytical Chemistry, *D. Betteridge*
- Panel Discussion - Computers in the Laboratory: Where Do We Go from Here ? , *J.P. Avery, S.R. Crouch, M.B. Denton, J. Liscouski, D. Betteridge and C.G. Enke*

ROBOTICS

- Hardware Considerations for the Implementation of Laboratory Robotics, *B.J. McGrattan, C.G. Fisher and P. Barrett*
- Automated Sample Preparation and Instrument Interfacing for Totally Automated Analyses, *K.E. Sharicz, R.K. Brown, A. Martin and L. Simonson*
- Error-Free Sample Identification and Analysis from Acquisition to Final Report, *J.S. Poole*
- Nonroutine Applications of Laboratory Robotics, *C.H. Lochmuller, K.R. Lung, T.L. Lloyd, M. Kaljurand and M. Koel*
- Biotechnology Applications of Laboratory Robots, *G.L. Hawk and B.G. Lightbody*
- Laboratory Robotics for the Pharmaceutical Industry, *J.R. Strimaitis*
- Trends in Laboratory Robotics, *F.H. Zenie*

EUROPEAN CONFERENCE ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE

BRIGHTON, U.K.

JULY 21-25, 1986

ECAI is the largest biennial European conference sponsored by the European Coordinating Committee on Artificial Intelligence and co-sponsored in 1986 by the Society for the Study of Artificial Intelligence and Simulation Behaviour. A tutorial will precede the conference.

Authors are invited to submit papers of substantial, original and previously unreported research in any aspect of AI, including

previously unreported research in any aspect of AI, including reports on scientific research as well as industrial applications.

Topics of Interest

For the Scientific Programme:

1. Foundations (incl. Social Issues)
2. Knowledge Representation
3. Problem Solving
4. Knowledge Acquisition and learning
5. Communication (incl. Natural language Processing)
6. Perception and Robotics
7. Cognitive Modelling
8. Applications (no-industrial)
9. Tools for AI Research

For the Industrial Programme:

1. Industrial Applications (incl. Expert Systems, Natural Language Systems, Robotics Applications, Tutoring Systems)
2. Engineering Issues (incl. Managing AI Projects, Follow Up and Performance Evaluation, User Reactions)
3. Financing (incl. National and International R&D programmes in AI, AI Companies)
4. Tools for Building Industrial AI Systems

AAAI-86 THE NATIONAL CONFERENCE ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE

Philadelphia, PA

August 11-15, 1986

Sponsored by the American Association for Artificial Intelligence

In response to the growing interest in AI applications, AAAI-86's Technical Program will have two distinct tracks: science and engineering. The Science track, scheduled for the beginning of the week, will stress the computational principles underlying cognition and perception in man and machine. The engineering track, scheduled for the last two days of the week, will highlight pragmatic issues that arise in applying these computational principles. Particular attention will be given to in-depth analyses of problem domains and novel approaches to implementation and system integration.

Topics of Interest

Authors are invited to submit papers to either the science or engineering tracks of the conference. To facilitate the reviewing process, authors are asked to explicitly identify one particular track with the Technical Conference and one or more topics from the following list:

- *Applications (e.g., Computer Integrated Manufacturing, Diagnosis, Engineering Design, Finance, Process Modeling, and Simulation)
- *AI and Education

- *AI Architectures and Languages
- *Automated Reasoning (including automatic programming, commonsense reasoning, design, diagnosis, planning, qualitative reasoning, search, and theorem proving)
- *Cognitive Modeling
- *Impacts of AI Technology (including methods of technology transfer and organizational, economic, and social implications)
- *Knowledge Acquisition and Learning
- *Knowledge Representation
- *Natural Language (including generation, understanding)
- *Perception and Signal Understanding (including speech, vision, and data interpretation)
- *Philosophical and Scientific Foundations
- *Robotics
- *User Interface Technology

文献紹介

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

この雑誌は、西ドイツのVCH出版社が年4回発行するQSARの専門誌です。内容は、QSARおよびそれに関連したコンピュータ技術の応用に関するオリジナル論文と、QSARに関する世界の論文のアブストラクト（1号あたり、50~60件収録）から成っています。アブストラクトは、ファクトデータに重点を置き、化合物名（又は系統）、生物材料、測定データ種、化学記述子、結果（回帰式、図表）などが簡潔に記述されています。

1982年 第1巻第1号 発表題目、著者、頁

A Comparison by QSAR, Crystallography, and Computer Graphics of the Inhibition of Various Dihydrofolate Reductases by 5-(X-Benzyl)-2,4-diamino-pyrimidines, *R. Li, C. Hansch, D. Matthews, J.M. Blaney, R. Langridge, T.J. Delcamp, S.S. Susten and J.H. Freisheim*, p.1

Quantitative Comparative Studies on Peripheral and Central Bradycardia Induced by Imidazolidines, *P.B.M.W.M. Timmermans, A. de Jonge and P.A. van Zwieten*, p.8

Absorption of Ionizable Drugs: Nonlinear Dependence on log P, pKa and pH - Quantitative Relationships, *K.-J. Schaper*, p.13

1983年 第2巻第1号 発表題目、著者、頁

Rationalisation Among Heterocyclic Partition Coefficients Part 1: The π -Value of Phenyl, *S.J. Lewis, M.S. Mirrlees and P.J. Taylor*, p.1

BC(DEF) Coordinates 3. Their Acquisition from Physical Property Data, *R.D. Cramer III*, p.7

BC(DEF) Coordinates 4. Correlations with General Anesthesia, Nerve Blockade, and Erythrocyte Stabilization, *R.D. Cramer III*, p.13

1983年 第2卷第2号 发表题目、著者、頁

Structural Information and a Flexibility Index from the Molecular Connectivity χ_p Index, *L.B.Kier and L.H. Hall*, p.55

2ⁿ-Factorial Schemes in Drug Design Extensions Increasing Versatility, *V.Austel*, p.59

Some Critical Remarks Concerning the the Inductive Parameter σ_1 , Part I: Aliphatic Amines, *G.J.Bijloo and R.F.Rekker*, p.66

1983年 第2卷第3号 发表题目、著者、頁

Prediction of New Leads from a Distance Geometry Binding Site Model, *G.M.Crippen*, p.95

Rationalisations among Heterocyclic Partition Coefficients Part 2: The Azines, *S.J.Lewis, M.S.Mirrless and P.J.Taylor*, p.100

Rational Selection of Test Series for QSAR-Analysis, *K.-J.Schaper*, p.111

Computer-Assisted Prediction of Bioactive Compounds Based on the Hansch-Fujita Analysis, *C.Takayama, Y.Miyashita and S.Sasaki*, p.121

Some Critical Remarks Concerning the Inductive Parameter σ_1 , Part II: Aliphatic Carboxylic Acids, *G.J.Bijloo and R.F.Rekker*, p.124

1983年 第2卷第4号 发表题目、著者、頁

BC(DEF) Coordinates.5.Shape-Specific vs. Orientation-Averaged Interactions of Neuroleptics and Other Centrally Drugs: Correlation of Effects in Five *in vitro* Test Systems, *L.M.Yunger and R.D. Cramer III*, p.149

Nonadditivity of 1-Octano/Water Partition Coeffecients of Disubstituted Benzenes: An Explanation and Its Consideration in Log P Estimation, *W.J.Dunn III, E.Johansson and S.Wold*, p.156

Estimation of Substituent Group Electronic Influence from Molecular Connectivity Delta Values, *L.B.Kier and L.H.Hall*, p.163

Relationships between Octanol-Water Partition Data, Chromatographic Indices and Their Dependence on pH in a Set of Nonsteroidal Anti-Inflammatory Drugs, *M.I.La Rotonda, G.Amato, F.Barbato, C.Silipo and A.Vittoria*, p.168

1984年 第3卷第1号 发表题目、著者、頁

A QSAR study of the ames Mutagenicity of 1-(X-phenyl)-3,3-dialkyl-triazenes using molecular potential energy fields and molecular shape analysis, *A.J.Hopfinger*, p.1

Theoretical investigations on interactions between Pharmacon molecules and receptor models,V: Construction of a model for the ribosomal binding site of chloramphenicol, *H.-D.Höltje and M.Tintelnot*, p.6

Correlation and estimation of aqueous solubilities of polycyclic aromatic hydrocarbons, *R.J.Baker, W.E.Acree, Jr., and C.-c.Tsai*, p.10

Regularities of the partition coefficients of bis, tris, and tetrakis (acetylacetonato)metal (II, III, and IV) complexes, *H.Watarai, H.Oshima and N.Suzuki*, p.17

1984年 第3卷第2号 发表题目、著者、頁

Biological Receptor Maps.1 Steric Maps. The SIBIS Method, *I.Motoc*, p.43

Biological Receptor Maps.2 Steric Maps of Benzoate Antibody and Carbonic Anhydrase, *I.Motoc*, p.47

Correlation Between Affinity Towards β -Adrenergic Receptors and Electrostatic Potentials of Phenylethylamine Derivatives, *T.Šolmajer, M.Hodošček, D.Hadžić and I.Lukovič*, p.51

Structural Requirements for the Membrane Damaging Effect of Non Homologous Series of Nonionic Tenzides, Structural Requirements for the Biological Activity of Tenzides, *T.Cserhádi, M.Szőgyi, B.Bordas and A.Dobrovoszky*, p.56

Selective Antimetastatic Triazines: A Quantitative Approach, *L.Lassiani, C.Nisi, T.Giraldi, G.Sava and R.Cuman*, p.59

1984年 第3卷第3号 发表题目、著者、頁

Some Critical Remarks Concerning the Inductive Parameter σ_1 -Part III: Parametrization of the Ortho Effect in Benzoic Acid Phenols, *J.J.Bijloo and R.F.Rekker*, p.91

Specificities of Subtilisin BPN' and Intracellular Proteinase from *Bacillus Amylolyquefaciens* in Reaction with Organophosphorus Inhibitors, *A.Aaviksaar, M.Peips, P.Sikk, Y.Y.Strongin, A.N. Markaryan and V.M.Stepanov*, p.96

PCB and Dioxin Binding to Cytosol Receptors: A Theoretical Model Based on Molecular Parameters, *J.D.McKinney, G.A.Long and L.Pedersen*, p.99

Predictive Power of Robust Regression Applied to QSAR Studies, *I.Moriguchi, K.Komatsu and Y.Matsushita*, p.106

Some Critical Remarks Concerning the Inductive Parameter σ_1 -Part IV: Parametrization of the Ortho Effect in Anilines and Pyridines, *G.J.Bijiloo and R.F.Rekker*, p.111

1984年 第3卷第4号 发表题目、著者、頁

Multivariate Structure-Activity Relationships Between Data from a Battery of Biological Tests and an Ensemble of Structure Descriptors: The PLS Method, *W.J.Dunn, III, S.Wold, U.Edlund, S.Hellberg and J.Gasteiger*, p.131

Quantitative Description of α_2 -Adrenergic Potency in Terms of Receptor Affinity and Intrinsic Activity, *A.de Jonge, P.B.M.W.M. Timmermans and P.A.van Zwieten*, p.143

Chemometric Investigation of Antitumor Tests, *C.Ebert, L.Lassiani, P.Linda, C.Nisi, S.Alunni and S.Clementi*, p.143

The Application of the PHL Concept to QSAR: Detection of Dta Deficiencies Cross Validation of Alien Effects, *H.Mager*, p.147

1985年 第4卷第1号 发表题目、著者、頁

The Anesthetic Activitic and Toxicity of Halogenated Ethyl Methyl Ethers, a Multivariate QSAR Modelled by PLS, *S.Hellberg, S.Wold, W.J.Dunn III, J.Gasteiger and M.G.Hutchings*, p.1

The Chemical Shift of the Alpha Carbon in Amino-Acids as a Parameter for QSAR Studies of Oligopeptides, *J.-L.Fauchere and J.Lauterwein*, p.11

Topological Pharmacophores: New Methods and Their Application to a Set of Antimalarials. Part 1: The Methods LOGANA and LOCON, *W.J. Streich and R.Franke*, p.13

Quantitative Structure-Activity Relationships in the Displacement of the Dihydroafrole Metabolite-Cytochrome P-450 Complex, *M.Murray, C.B.Marcus and C.F.Wilkinson*, p.18

Quantitative Structure-Activity Relationships in the Displacement of the D

A Quantum Chemical QSAR Study of Carbonic Anhydrase Inhibition by Sulfonamides. Sulfonamide Carbonic Anhydrase Inhibitors: Quantum Chemical QSAR, *P.G.De Benedetti, M.C.Menziani and C.Frassinetti*, p.23

1985年 第4卷第2号 发表题目、著者、頁

Topological Pharmacophores: New Methods and Their Application to a Set of Antimalarials. Part 2: Results from LOGANA, *R.Franke and W.J.Streich*, p.51

Topological Pharmacophores: New Methods and Their Application to a Set of Antimalarials. Part 3: Results from LOGONA, *R.Franke and W.J.Streich*, p.63

The Prediction of Substituent Interactions in Lipophilicity of Disubstituted Benzenes using RP-HPLC, *N.El Tayar, H.van de Waterbeemd and B.Testa*, p.69

Hansch Approach and Kinetics of Drug Activities, *S.Balaz, E.Sturdik and M.Tichy*, p.77

1985年 第4卷第3号 发表题目、著者、頁

Multiple Regression and Principal Component Analysis of Antibacterial Activities of Sulfones and Sulfonamides in Whole Cell and Cell-Free Systems of Various DDS Sensitive and Resistant Bacterial Strains, *E.A.Coats, H.-P.Cordes, V.M.Kulkarni, M.Richter, K.-J.Schaper, M.Wiese and J.K.Seydel*, p.99

A Shape Index from Molecular Graphs, *L.B.Kier*, p.109

A Method for Determining the Theoretical Carcinogenicity of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, *E.Rachin and N.Ralev*, p.116

Structure - Molar Refraction Relationships of Alkylsilanes Using Molecular Connectivity, *E.J.Kupchik*, p.123

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCE

1985年11月 第25卷第4号 发表题目、著者、页

The Chemical Substance Information Network: User Service Office Evaluation and Feedback, *J.A. Page-Castell and C. Hollister*, p.359

Chemical Patent Information: The challenge of Change, *Montagu Hyams*, p.365

Polymer Patent Information Systems Could Be Even Better!, *Stuart M. Kaback*, p.371

The Paradox of Patentability Searching, *Edlyn S. Simmons*, p.379

A Numerical Index for Characterizing Data Set Separation, *Diana Hunter LaFemina and Peter C. Jurs*, p.386

Planning of Synthetic Pathways on the Basis of Synthesis Strategis, *Jakob Hermann Winter*, p.389

A History of General Subject Indexing at Chemical Abstracts Service, *D.F. Zaye, W.V. Metanomski and A.J. Beach*, p.392

A Versatile, Efficient and Interactive Program To Build Molecular Structures for Theoretical, *James Kao, Charles Eyermann, Loraine Watt, Robert Maher and Diane Leister*, p.400

Procedures for Sorting Chemical Names *Chemical Abstracts' Indexes*, *Allen C. Isenberg, Joann T. LeMasters, Abe F. Maxwell and Gerald G. Vander Stow*, p.410

On Randic's Molecular Identification Numbers, *K. Szymanski, W.R. Muller, J.V. Knop and N. Trinajstic*, p.413

End-User Searching: The Amoco Experience, *Robert E. Buntrock and Aldona K. Valicenti*, p.415

Can You Teach Me TO Do My Own Searching? Or Tailoring Online Training to the Needs of the End-User, *Martha B. Reiter*, p.419

Meeting the Needs of the End User, *Mary Ann S. Palma and Charles Sullivan*, p.422

TOSCA: A Topological Synthesis Design by Computer Application, *Reinhard Doenges, Bengt-Thomas Groebel, Herbert Nickelsen and Juergen Sander*, p.425

1986年2月 第26卷第1号 发表题目、著者、页

Replacement-Nodal-Subtractive Nomenclature and Codes of Chemical Compounds, *Otto R. Gottlieb and M. Auxiliadora C. Kaplan*, p.1

A Simple Method for the Representation, Quantification, and Comparison of the Volumes and Shapes of Chemical Compounds, *Terry R. Stouch and Peter C. Jurs*, p.4

Electronic Publishing and Document Delivery of German Patent Information, *Gerd Tittlbach*, p.13

The Chemical Reactions Documentation Service: Ten Years On, *Alan F. Finch*, p.17

A Method for Early Identification of Loss From a Nuclear Material Inventory, *David E. Booth*, p.23

Cambridge Crystallographic Data Centre. 7. Estimating Average Molecular Dimensions from the Cambridge Structural Database, *Robin Taylor and Olga Kennard*, p.28

TERRE-TOX: A Data Base for Effects of Anthropogenic Substances on Terrestrial Animals, *S. Mark Meyers and Susan M. Schiller*, p.33

Implementation of Nearest-Neighbor Searching in an Online Chemical Structure Search System, *Peter Willet, Vivienne Winterman and David Bawden*, p.36

※「ニュースレター」第3巻第3号と第4号に掲載されていない部分です。

1985年5月 第25巻第2号 発表題目、著者、頁

Atom Pairs as Molecular Features in Structure-Activity Studies: Definition and Applications, *Raymond E. Carhart, Dennis H. Smith and R. Venkataraghavan*, p.64

Computer Code for Producing Eh-pH Plots of Equilibrium Chemical Systems, *Dennis R. Drewes*, p.73

Clustering Tendency in Chemical Classifications, *Peter Willett*, p.78

A Method for Early Discovery of Poisoning in Catalytic Chemical Processes, *David E. Booth and Thomas L. isenhour*, p.81

Method for Estimating the Human and Environmental Exposure Potential of Chemicals Having Designated Uses, *Wendy L. Byer*, p.84

Use of MACCS within ICI, *George W. Adamson, John M. Bird, Graham Palmer and Wendy A. Warr*, p.90

Monte Carlo Studies of the Classifications Made by Nonparametric Linear Discriminant Functions. 2. Effects of Nonideal Data, *Terry R. Stouch and Peter C. Jurs*, p.92

NAPRALERT: Computer Handling of Natural Product Research Data, *W. D. Loub, N. R. Farnsworth, D. D. Soejarto and M. L. Quinn*, p.99

CSEARCH: A Computer Program for Identification of Organic Compounds and Fully Automated Assignment of Carbon-13 Nuclear Magnetic Resonance Spectra, *Hermann Kalchhauser and Wolfgang Robien*, p.103

A Concise Connection Table Based on Systematic Nomenclatural Terms, *J. D. Rayner*, p.108

Comparative Efficiency of Searching Abstracts Text in the Chemical Abstracts Service Database, *M. Herz, H. K. Kaindle, A. A. Salib and R. Warszawski*, p.111

An Algorithm for Chemical Superstructure Searching, *Peter Willett*, p.114

A New System for the Designation of Chemical Compounds. 2. Coding of Cyclic Compounds, *Ronald C. Read*, p.116

Experience in Developing an In-House Molecular Information and Modeling System, *James Kao, Victor Day and Loraine Watt*, p.129

学術情報をすばやく

国公立大結ぶ情報センター設置——5年後に整備目指して

優れた独創的、先駆的な学術研究を生み出すための基盤として、大学等の研究者が必要とする学術情報を迅速、的確に提供し、研究成果を国内外に普及するための全国的な学術情報システムの整備を図ることが急務となっているが、文部省では61年度新たに全国の国公立大学等を結ぶ学術情報システムの中核となる「学術情報センター（仮称）」を創設する。東京大学文献情報センターが国立大学共同利用機関として生まれ変わるものだが、国立大学ばかりでなく、公立や私立の図書館や情報処理センターなどもデータ通信網を結ぶことになっており、わが国の学術情報の中枢となる。61年度予算案は10億2千5百万円。

「学術情報センター」は、国公立大学等の大型計算機センター、情報処理センター、図書館、分野別外国雑誌センター、国立大学共同利用機関などのデータのネットワークを結び、学術情報システムの中核として機能を果たすもので、事業の内容は①学術情報システムの計画・連絡調整、②学術情報に関する総合的研究開発、③一次情報の収集と目録・所在情報の提供（図書館等による学術図書や雑誌などの一次資料の体系的・網羅的収集に対応した、図書・雑誌の目録・所在情報の形成および迅速・的確なサービス）、④情報検索サービスの提供（数値・画像等のファクトデータや書誌、文献抄録などの二次情報の迅速・的確な提供サービス）、⑤データベース形成の促進、⑥教育訓練—など。

計画では、学術情報研究系とシステム研究系にそれぞれ3部門ずつの研究部門が設置されることになっており、前者では①情報図書館に関する研究、②情報の管理に関する研究、③データベースに関する研究が、また後者では①システム工学に関する研究、②ソフトウェア工学に関する研究、③ネットワーク工学に関する研究が行われることになっている。

61年度中には、7つの大型計算機センター、31の情報処理センター、16の大学図書館（私大を含む）がネットワークに加わることになっており、5年後には全国の大学の図書館や新たに新設される情報処理センターなども接続される予定。

（1986年1月31日、科学新聞より転載）

“電子図書館”実現へ E L 研が研究結果—会社組織で黒字化

電子画像による新聞、雑誌などの記事データベースとそのサービスを提供する電子図書館の可能性を検討していたエレクトロニック・ライブラリー（E L）研究会は30日、これまでの検討結果をまとめ発表した。

研究会には日刊工業新聞社をはじめ朝日、毎日、読売など全国紙・専門紙、出版社計40社が参加しているが、検討結果によると、産業・経済分野のデータベースは潜在的なニーズが高く、十分な市場性が期待できるという。そのためE Lの事業を行うには資本金10億円程度の会社設立が望ましく、研究会参加各社をはじめとしてマスコミ、金融機関などから広く資本金を募る。会社設立後2年目に約200社を対象にサービスを開始し、3年目にユーザー500社、年間売上高15億円を達成し、単年度黒字化を図る。サービス開始6年目にはユーザー数700社、年間21億円を達成、累損を解消できる見込み。近く設立準備委員会を設置、事業化に踏み切る。

E Lの特徴は主要新聞、雑誌などの記事情報を横断的に検索できるオンラインデータベースであり、しかも各記事の原文を画像情報（写真、図形付き）としてファクシミリ、専用端末から即時に取り出せる。収録する記事は人文・社会からビジネス・技術まで広範囲にわたり、当面新聞が20～60紙、雑誌600誌から記事数にして月8万件、年間百万件を電子ファイルに収録していく。

ユーザーは専用端末やファクシミリ、パソコンで検索、出力する。E Lのサービスメニューは一般ユーザー向けとしては、書誌データ、原文複写のオンラインサービスのほか、あらかじめ登録したテーマに合致する情報を定期的に提供するサービスなどがある。

一方、I P（情報提供者）には索引作業の代行のほか、I Pの調査・資料部門の業務を一部代行することも考えられる。

料金は固定会費制とし、一定量以上の使用については従量料金とする。

（1986年1月31日、日刊工業新聞朝刊から転載）

C A S の新しい情報処理技術

C A S と D E C は、C D - R O M により環境化学関係5万件の Chemical Abstract を “Chemical Abstracts: Health and Safety in Chemistry” として発表した。

この Optical Disk には、検索用ソフトウェアが含まれており、Micro VAX I, II, VAX station II、および IBM'S PC-XT で使うことができる。

（1986年1月、C & E N より転載）

米国化学会の発行する Journal of Chemical Information and Computer Science 誌は最近の号の会告で、同誌の1986年2月号(季刊誌なので第1号に相当する)から従来の書評欄等に加えて次の2種類の欄を新たに追加するむね発表した。追加された欄は "Software Reviews" と "Software announcements" であり、前者は既存のソフトウェア・パッケージ(有料・無料を問わず)への論評であり、後者は商用ではない(実費で頒布予定の)ソフトウェアの発表である。同誌ではこのための専任の編集者として、USDA-Agricultural Research Service(ARS)の Stephan R. Heller博士を編集スタッフに加えた。多くの読者には既に御存じの事であろうが、ヘラー博士は Chemical Information System の開発者として良く知られている。ソフトウェア・パッケージへの評論は書評とほぼ同一のスタイルを取る。編集者にパッケージが送られ、化学者がどれぐらい有効に使用できるか否かの可能性について評価がされることも、また、特に商用のパッケージの場合には、直接の利害関係のない第三者に論評を委ねることもある。一方、無償ソフトウェアの発表は編集局に寄せられたコピーを直接印刷する事で行われる。目的は有用なソフトウェアの化学者間での交換であり、この為に、発表は送料と使用メディア実費のみを請求する無償ソフトウェアに限定される。この場合同誌は発表の仲介をするだけで論評はせず、内容について責任はとらない。発表の内容は、パッケージの題目、簡単な説明、必要なハードウェア、移行の費用などである。ゆわゆる商用のパッケージ(有償ソフト)は含まれないが、上の条件を満たすかぎりでは営利団体でも発表することはできる。

これまで個人のレベルでは有用なソフトは数多く作られているが、なかなか頒布されなかったのには色々の理由が考えられるが、同誌ではソフトウェアの存在そのものが知られていなかったのが大きな原因ではないかとし、個人のレベルを越えてソフトウェアの交換を促進する原動力にこの欄となる事を大いに期待をかけているとしている。

(文責：鈴木 功)

機関利用案内

CAS ONLINE 大学割引制度

CAS ONLINEは、米国化学会の一部門 Chemical Abstracts Service のオンライン化学情報検索サービスですが、“大学教育におけるCAS情報の利用”援助を目的として大学割引制度（Academic Program）があります。

これは、利用時間に制限（下表の斜線部分が利用可能時間）があるものの、通常料金の10%の料金で利用できるものです。

【夏時間】（昭和61年4月27日～昭和61年10月25日） 【冬時間】（昭和61年10月26日～昭和62年4月26日）

	0	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24
月													
火													
水													
木													
金													
土													
日													

	0	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24
月													
火													
水													
木													
金													
土													
日													

ただし、Chemical Abstracts を講読している大学が対象で、利用料金支払のための口座開設一時金11,500円と預託金50,000円が必要です。

詳細は、化学情報協会（☎ 03-816-3462）へお問い合わせ下さい。

図 書 紹 介

T.Clark 著 “A Handbook of Computational Chemistry”, John Wiley and Sons;
New York, 1985年, ISBN 0-471-88211-9, 332 p

計算機化学に関する極めてユニークな本が最近出版された。この本は計算機化学における三大計算法（分子力学，半経験的および非経験的分子軌道法）の代表的なプログラムMMP2, MOPACおよびGAUSSIAN82の使い方を化学者向けに解説している。代表的プログラムとしてこの三つを選んだ理由はとくに本の中にはっきりとは述べられていないが，的を得ていると思う。MMP2は最も人気の高いMM2の1982年版を含んでいてしかも共役 π 電子系の計算機能を提供している。MOPACはMINDO/3, MNDOを含んでいる上に振動解析，熱力学関数計算，反応経路探索などの化学者向きのオプションが多く，最も使いやすい半経験的MOプログラムである。GAUSSIAN82もこの前の版のGAUSSIAN80に比べると電子相関オプションが強化され，振動解析が非常に便利に行えるなど格段に良くなっている。

これらのプログラムはいずれも大部なものであって，いわゆる超大型ないしスーパーミニコン級の計算機で動かすことになっている。一般ユーザーにとって泣きどころはマニュアルであった。マニュアルには計算機用語がはっきりなしに出てくるので意味が分かりにくいし，また方法の原理などは全く解説されていない。この本の狙いは計算機用語を全く知らぬ化学者にたいして化学的な意味を解説しつつ入力の手続きおよび出力の読み方をくわしく説明することである。この狙いは極めて満足すべき水準で達成されているように思われる。

特に各方法を基礎から説明してある部分は非常に良く書かれている。著者の T.Clark はアイルランドの McKervey 教授の研究室で実験化学者としての教育を受けて学位をとったが，その後直ちにプリンストン大学の Schleyer 教授の博士研究員となって以来既に10年以上 Schleyer と共に計算機化学を推進してきた中心人物の一人である。実験化学に関する深い素養があって，しかも計算機化学のすべての手法に精通しているという意味で，この種の本の著者として最適任であろう。

Schleyer の序文が実にふるっている。ここにその一部を英語のまま再録すると：

“The chemist now has incredibly powerful mathematical tools (namely computers) at his disposal. These tools are simple to use and are about the only ones that continue to become less expensive. The future directions of chemical research are already programmed!”

蛇足で恐縮だが最後の言葉 programmed には計画するという意味とソフトウェアプログラミングをかけているようである。

蛇足ついでにこれら三大プログラムの入手法について触れておく。MMP 2 は本書によると Molecular Design 社からソースを入手して手近な大型計算機用に手直ししたと述べられているが、実はこれは特別な「コネ」によって行われていて一般的には Molecular Design 社から 1 万ドル（日本で買うと 2 万ドル以上という噂がある）の対価を払ってロードモジュールを購入する必要がある。日本における代理店は富士通。アメリカ国内では大学関係者は QCPE からロードモジュールを入手できるが日本に送られてきた例はまだない。

MOPAC は以前 QCPE から公開されたが (NO.455)，これはひどい代物で虫だらけで動かす苦い経験をなめた方が多い筈である。本書で扱っている MOPAC は旧版を Clark 自身が改訂したバージョンである。幸いなことに先月改訂拡張版 (3.0) が QCPE から公開された。3.0 版には AM1 が組み入れられているほかにポリマー、グラフィックなどのオプションが追加されている。

GAUSSIAN 82 を入手するにはカーネギーメロン大学の Pople 教授と契約書を取り交わす必要がある。もともとは VAX 用に作られているが IBM 版もある。

(大沢映二)

会員の広場

血液型にA型とB型があるように、情報にもA型とB型があり、このように分けて考えると情報が少し分かり易くなるという。これは最近週刊エコノミストに金子郁容氏が書かれている論文(61.1.14号)を見て初めて知った次第で、不勉強をはじめる思いである。

上のように考えると情報化学といわず、なべて一般の情報も理解しやすくなるが、その前にA、Bの区別を若干、氏の文から引用しよう。「大量のA型情報がほんのわずかなスペースに磁氣的に貯蔵でき、貯蔵された情報は様々なキーワードによって容易に検索が可能になる。そのように貯蔵された情報はいろいろな場所でいろいろな人によって多重目的に使用される。一方立てつけの悪い扉をうまく開ける「ちょっとしたコツ」といったB型情報は効率よく伝達しにくい」。一言でいうとマニュアルはA型、know-howはB型ということだろうか。情報化学(学問一般かも知れない)はまさにB型をA型に変換することなのではないか(A型、B型情報それ自身を獲得することも大切であるが……)。A型、B型で今一つ大切な要素として、提供者と受け手のレベルにより、また環境によりその境界がゆれることが考えられる。

情報化学はまだ融合した一学問分野になりきっていなくて、コンピュータを媒体として(ほんとうの目指すところは情報を媒体として?)学際的な学問を形づくろうとしているように見える。そうだとすると(そうでなくてもどのみち)どの種のテーマにも専門外の人が多いのではないだろうか。話し手はA型情報のつもりでも、聞き手にはB型情報であったりすることはしばしば経験するところである。この辺を考えての運営をお願いしたいものである。誌面にもそのような場外情報を掲載していただければ大変参考になるだろう。

話は変わるがAI(人工知能)に関する議論が活発である。1950年代にも活発な研究がなされたが、1960年代の暗黒時代を経て、第2期の活動期を迎えているような情景であるが、もう一うねりしてはじめて実用的になるのではなからうか。というのも企業人の「プログラムは書き直しして3度目に初めて実用になる」という含蓄のある主張を何度か聞いたことがあり、自分自身もそう思っているからにはかならない。

もう一つ、化学工学でもComputer Aided Chemical Engineeringがモノになるのに20年の歳月を要したと思われる。後追いでなく、ほんとうの意味でのDry Chemical Pilot Plantとして実用的になるために要した日時のことである。情報化学も20年かかる(?)とは思わない。環境の進歩が著しいことを考えるともっと早いのではないかという気もする(現在何年目なのかとの認識が重要)。B型情報をいかに早くA型情報に変えられるかが鍵ではなからうか。

少々(いや大いに)勇み足のきらいがあるが、これがトリガーになって会員諸兄姉の活発なるご意見が披露されるならば、情報化学部会の発展につながるとの想いで敢て筆をとった次第である。

(三井東圧化学㈱ システム部 宮原昶中)



NEWSLETTER

Division of Chemical Information and Computer Science
The Chemical Society of Japan

日本化学会
情報化学部会

Vol. 4
No. 3

(May 1986)

目 次

物質から正しい情報を引出すために	南 茂 夫	1
年会報告		4
海外動向		
国際協力によるデータベースの作成		
— 画像工学特許検索システム ITPAIS —	田 淵 利 明	7
20th ACS Great Lakes Regional Meeting		
Computers in Chemistry		9
Chemical Education		10
国内の動き		
国際科学技術情報オンラインネットワーク		
「STN-International」について	佐 原 卓	11
Full Text Database	野 上 法 正	13
中 尾 健 治		
国際会議		
Calendar		17
Second Symposium on Chemical Information		18
文献紹介		
Computers & Chemistry (Vol.9, No.4~Vol.10, No.1)		19
Journal of Molecular Graphics (Vol.4, No.1)		21
企画案内		22

物質から正しい情報を引出すために

大阪大学工学部 南 茂夫

至局当然の問題を表題に掲げた訳は、実のところラボラトリ・オートメーション（LA）ブームの蔭で、意外と“物質から引出される情報の質”という原点に位置する問題が忘れられ勝ちであることを痛感しているからである。情報化学の領域において、物質とインターフェースするいわゆる測定の前フロントエンドでの仕事に、測定技術という面から長年月関わってきた者として、コンピュータは両刀の剣であることを、機器のユーザの方々にもっと認識して頂きたいと思っている。

私自身、LA発祥の地は化学の分野であることを認めているし、その証拠に他の分野のLAにおいて新手法・新技術であると信じられているものが、化学分野では既に10年以上も前に実行されていたという例が実に多いのである。近年LAに関する認識が高まってきているが、その議論の中では、データの収集・処理・機器制御など計測端におけるコンピュータ利用自動計測は第一世代のLAであり、新しいLAとは得られた情報のコンピュータ支援による高度利用やコンピュータシミュレーション、それに加えて情報管理や研究管理までも含んだものであるとしている。勿論この考え方に異論はなく、共に今後研究・開発の効率化にはキーテクノロジーともいうべき事柄である。問題は従来からの計測端におけるLAは、今や完全に定着してしまって新味がないというニュアンスを含んでいる点である。ただしこれは我国におけるLAの考え方であり、外国においては上述した第一世代のLAこそ真のLAと定義されており、今後のLAと称される部分は、LIMS (Laboratory Information Management System)、LDBMS (Laboratory Data Base Management System)、DLS (Dry Laboratory System) などと名付け、リサーチ・オートメーション (RA)、あるいは研究支援システムと呼ぶのが普通である。当日本化学会情報化学部会でも、この点を明確に区別しているのは正しいと思う。

さて真の意味でのLA、すなわち計測の前フロントエンドにおけるオートメ化に携る者にとって常に気懸りなのは、収集されたデータの中に正しい情報がどれだけ含まれているかということであろう。情報 (Information) の定義は各様であるが、ここでは“データを加工・解析し意味のある形にまとめたもの”と考えている。言うまでもなく意味のある情報を入手するには、計測の方法論という原点まで立戻らねばならない。特に化学分野で目標となる物質情報は、数百万におよぶ化学種を対象とするものであり、そのミクロ的構造や振舞は多種多様のパラメータによって支配されるという点で、他分野の計測で対象となる情報とは格段に高度で複雑である。したがって、たとえ計測端におけるデータの収集と取扱いという一見単純な仕事に見えても、化学分野におけるそれは無限の深さを持ち興味の尽きないところである。兎に角データは大量で且つバリエーションに富む。しかし意味ある情報は、データを細心かつ精密に加工・抽出することによって得られることは言うまでもない。その手続きを介しての

み、物質の構造や振舞あるいは種類や含有量など正しい最終情報に到達できるのである。データが大量且つバリエーションに富むということは、測定者が物質に対峙する場所での物質へのアプローチの仕方に多くのフェーズがあることにもつながる。物質はその観察方向によって異なる姿を現すことも、他分野における計測とは違った面白さを持つ点である。一つの物質に対して可能な限りのあらゆる測定手段を適用し、総てのデータの相関関係を読み取ることで、最終情報に到達する速度と確度を向上させることもできる。以上の事柄から計測端でのコンピュータの有効な利用法は、測定手段の設定と密接な関係を持ちながら進めるべきことは自明であろう。

ここでLAの源流ともなった初期の頃の化学の領域でのコンピュータ利用を振り返ってみる必要がある。大型計算機センタがぼつぼつ各所に設置され始めた頃から、主として物質の構造解析への利用が開始されると同時に、機器分析データの自動演算を介しての定性・定量分析も試みられた。その頃はコンピュータを活用しようとする研究者・技術者はまだ数少く、データ加工を行うためのアルゴリズムについても事前に慎重な検討がなされ、また計測器からの生データの扱いについても充分注意が払われたのは当然のことである。コンピュータの扱いにおいても担当者の間で十分な意志の疎通が図られたことも、計算費用や事前準備の繁雑さを考えればよく理解できる。

余程恵まれていたりあるいは数値計算に特別な興味を持っているか、何れにせよ一握りの人々によってコンピュータが利用されていた当時からすれば、今日のコンピュータの普及はまさに隔世の感がある。特にマイコンは社会全体に一大変革をもたらしたと言っても過言ではない。こと化学分野に限ったとしても、今やコンピュータを内蔵しない測定機器は皆無と言ってよく、また実験ベンチや個人の机上でいとも気楽にパソコンが使われている。メーカーが市場に登場させる機器はマイコンのお蔭で益々ブラックボックス化し、個々のメーカーが独自の思想でインテリジェント化した機器を、ソフトの内容も知らずに使われるユーザも数多い。その上、傍に容易に何時でも使えるパソコンがあるから、生半可な数値計算の知識で安易にデータ加工を行い、貴重な生データに乗った情報を台無しにしてしまうことは勿論、誤った情報でデータベースを構築してしまうことも少くはないと思われる。コンピュータが完全に定着してしまっただけでなく、現在こそ、コンピュータは使い方によっては毒にもつながる良薬であることを、ユーザもよく認識しておかねばならない。この点機器メーカーもユーザも共に初心を忘れてはならないことを肝に銘ずべきであろう。

何れにせよマイクロエレクトロニクスの進歩は留まる所を知らない。マイクロプロセッサは16ビットから32ビットに向いつつあるし、それを用いたパソコンは価格を保持したまま機能は増強される一方である。幸いにしてOAフィーバもこれに大きく貢献している。パソコンネットワークや簡易データベース構築の方向も、LAにとってはまさに渡りに舟であり、その成果を積極的に利用すべきであろう。このように考えてくると、強力なコンピュータがパーソナルな実験ベンチ上で自在に使えるのも目前と思われる。LAは最早自動化だけではなく、知能化においてその特徴を出さなければならぬ。物質と直接インターフェースする計測フロントエンドでも、正しい情報

を引出すためには知能化の基本であるデータの数値処理に益々重点を移すべきであると考える。そもそも物質から採取されるデータには、我々が目標とする情報のほかに邪魔な不要情報が多量に混在する。後者をできるだけ減らすため、従来は有効情報が特異的に多くなる条件を探るか、あるいはその条件を人為的に作ってデータを採取する手法がとられた。そのために測定対象物質ができるだけ影響を受けない形で、試薬などで物質を修飾する法もよくとられるが、物質の自然の姿を破壊するという意味から好ましくないことは確かである。また、無効情報が多量な状態下でも、その中には幾許かの有効情報が混っていることも多い。玉石混交の状態で総てのデータを採取した方が有効情報の絶対量は多い筈であり、そこから同じく多量に存在する無効情報をどのように除くかが、高度な数値処理が望まれるゆえんでもある。しかし残念ながらデータを加工すればする程、情報量が減るとするのが通例であり、上述した両者の間には妥協が必要である。

この妥協点を見出すために、強力なベンチサイドのコンピュータが必要となるのである。これまでの手法では、直感あるいは経験的にできるだけ有効対無効情報比が大きくなるよう測定条件を定めてデータを取り、そのデータをコンピュータにより事後処理して有効情報のみを抽出するのが常道である。これからは測定条件をコンピュータにより推定するいわゆる事前処理にもポイントを移し、事前ならびに事後処理の両者のバランスを取りながら、最大量の有効情報を手中に収める方向に動くであろうと思われる。多変量解析やオペレーションズ・リサーチ (OR) に用いられる諸手法、高度なシミュレーションテクニックなどを駆使するのであるが、知識ベース、推論、学習を基本とした本格的AI手法を、LAに導入する方向への一里塚と考えてよいだろう。

強力なパソコンの実験サイトへの定着を期待するもう一つの理由は、それがこれ迄予想もされなかった新しい測定手段を生む切掛になるのではないかという点である。その代表例がフーリエスペクトロスコープであることは周知の事柄である。コンピュータ援用計測ではなく、コンピュータが主体となる計測法であり、これには従来の測定原理を離れて、物質やそれを支配するパラメータが数学的手法とどのように関わっているかを原点に戻って確かめることである。勿論これには物質のセンシング手法全般の洗い直しが不可欠であり、センサとコンピュータが車の両輪となって初めて実現する。特に最近クローズアップされている、バイオセンサやバイオコンピュータの中にもその種が隠されているかも知れない。

以上のように考えてみると、実験装置や実験室のコンピュータによる自動化と狭く定義され、古いLAという感が持たれているこの分野にも、まだまだアプローチすべき問題が無限に存在するようである。兎に角物質の構造や振舞いを解明するには、十分に解析に耐えうる正しいデータを提供することが、我々測定手法や機器の研究・開発に携る者に課せられた永遠のテーマと思っている。コンピュータ利用を唯一のセールスポイントとしている測定機器のメーカ、メーカが提供するインテリジェント機器からの出力を何ら疑いを挟むことなく物質解明に使い込む研究者・技術者、それらを巻き込みながらのオートメ化フィーバを眺め、当事者の一人でありながら反省することの多い昨今である。

年会報告

第52春季年会 報告

(その1) 化学情報・計算機化学の講演

4001、4002、4003では、開発を続けている有機化合物の自動構造推定システムCHEMICSの正解率をより高めるための方法が発表された。分子式およびスペクトルデータに矛盾しない構造式の列挙機能によって創出される複数個の候補構造式をさらに絞りこむ方法として、候補構造式よりC-13NMRのケミカルシフト及びシグナル数の予測を可能にする方法、H-1およびC-13NMR化学シフト間の定量的相互関連性を見出す方法を開発した。鎖状構造に対する精度は一般的に高いことが考えられるが、環構造では問題が在るのではないかという指摘があった。

4005ではコンピュータ・プログラムの検索およびその内蔵プログラムのダウンロードが可能なコンピュータ・プログラムのデータベース化をおこなった。ユーザーにとって有難いシステムである。この種の仕事は連絡協議会のもとで共通性の高いフォーマット出来るだけ早い時期に作製して取り掛かるのがよいであろう。

4006では専門家が有する赤外線スペクトルの解釈に関する知識をIF ($-\text{cm}^{-1}$ にスペクトルがあれば)、THEN (—グループが存在する)形式のルールとして表現した知識ベースを構成し、官能基分析を行うシステムを開発した。まだ化合物の数は限られているが今後の発展が期待されよう。

4007では、ANALOGという人工知能システムで所定の生理活性を示す一群の化合物について共通の構造因子をできるだけ一般化された形で抽出し、それを逆に利用することでよりすぐれた特性を持つものを設計するためのシステムである。本講演では具体例として甘味発現に必要な高次共通構造因子の検討結果が報告された。

4008では、有機反応を記述する新規の表現法として虚遷移構造 (ITS、imaginary transition state) が提案された。これは、出発系と生成系に含まれる全ノードをトポロジカルに重ね合わせ、出発系にのみ存在する結合、生成系にのみ存在する結合、および両系に存在する結合を区別した構造式である。この構造に現れる結合を一組の整数 (a b) と一対一に対応させ、これにより結合表の形でITSをコンピュータに蓄積することができる。このITSにより導かれる新規概念のうちの幾つかについて報告が行われた。

4010では、構造活性相関を意図した類似薬理作用を有する化合物間の共通部分構造の自動認識に関する研究の一環として、分子の立体構造を考慮した3次元最大共通部分構造の探索法が報告された。

4011では、NEC PC-9801により種々の動画を効率的に出力するパッケージプログラムMOLFASSを開発し、これを用いた分子構造立体模型の高速表示についての報告がなされた。

4012では、パーソナルコンピュータを用い、会話型でNMRのデータを入力するための機能を加えて、SPIRESシステムの拡張の報告があった。

4013は化学構造式の線型表記法の一つを開発したとの報告であった。質問にもあったように、多環式など複雑な構造式の表記は、これまでに開発されている多くの線型表記法と同様、必ずしも容易ではないとの印象を受けた。

4014はDNAと薬物分子のインターカレーションモデルを分子力場計算により推定する際の初期配置についての報告であった。一つの結論が出されたようであるが、これがどこまで一般的なものであるかを検討するのがこれからの課題であろう。

4015は化合物構造処理システムの現状報告であった。短い時間では無理とは思えるが、何をどのように解決したのかが必ずしも明確では無かった。

4016は立体化学に新しい(?)術語、擬整を導入しその記述法を提案した。重要な問題でもあり、出来ればB講演でもっと詳しい説明が欲しかったところである。

4017は昨年の第8回情報化学討論会で報告された構造式の立体化学記述法の改良についての報告であった。

4018は汎用性、移植性の高いab initio 分子軌道計算プログラムの紹介であった。

(その2) コンピューターが関係する日本化学会第52春季年会の一般講演

第52春季年会には一般講演3318件、特別講演88件が26部門において発表された。情報化学部会に關係する講演は第22部門の化学情報・計算機化学のところ、A講演が14件、B講演が2件の計16件の発表があった。この部門の講演総数は一般研究発表が行なわれた22部門のうちで一番少なかった。3年間本部の広報専門委員をつとめてみて或る種の片身のせまさを感じて、少ないのは化学情報・計算機化学関連の講演は別の会場で発表されているからと弁明?をしておいた次第である。度々情報化学部会の役員会の席上でもそのことが話題になったが、実際にどの位の数になっているのかは精確に調べられることはなかった。そこで今回広報室につとめている間に、講演予稿集I、II、特別講演予稿集、受賞講演予稿集の4冊を一頁ずつ繰り見ながら調べてみた。D会場は物理化学の中の構造(結晶構造を除く)に関する研究で3日間で40件発表されている。この中のどの発表もコンピュータを使用して研究が行われている。コンピュータなくしては研究が行われない領域といってもよいので、もはや「コンピュータによる…」表現は埋没してしまっている。

25年位前であつたらうか紫外分光光度計や赤外分光光度計の測定が自動化され一時「自記分光光度計」が機器のセールスポイントであつた。また現在この種の機器は殆どといつていい位コンピュータが内蔵され自動制御化がなされているので、「コンピュータ内蔵…」は売り出し当時はセールスポイントになつたであらうが、もはや時代遅れの表現になりかねないだらう。

このような意味に理解され、使用される Computer aided chemistry でなく、化学研究の最前線でコンピュータが不可欠の要素でしかもその持ち味を十分に生かした使い方をする新しい研究方法が期待され、しかも出現しているように見える。

年会プログラムの中からマイコンも含めてコンピュータがおもきをなして関係したと思われる講演を題目だけから拾ってみた。従って妥当でない選択もあることを予めお許しいただきたい。

化学教育：3A13*,3A15*,3A17*,3A34,3A35*,3A37,3A38*

赤外・ラマン：1D44,3D04

電子状態理論：3D30,3D34,3D37,3D39,3D42

磁気共鳴：4D26

ラジカル結晶：3E01

シミュレーション：3E10*,3E12,3E13,3E14,3E15,3E16,3E25,3E28,3E29

放射線化学：3F28

素過程，速度・機構：3F31,4F15

分析化学その他：3I01

高分子物性：2J36

化学情報・計算機化学：全講演

水質環境化学：2P27

大気環境化学：3P18,3P43

有機化学，構造と物性：1V12,1V14,1V15,1V16,1V28

この検索の作業は1項目づつ全て目で追っていったが、自動検索はコンピュータの得意とする領域でもあり、しかもコンピュータがここまで進んだ時代の作業としてはあまりにも能率が悪いことを痛感した。日化年会のプログラムには、研究発表者索引とともに事項索引 (Subject Index) をそろそろつけてはどうだろうか。講演申込時に1件当たり2または3項目のキーワードを付記して、事項別に並べておけば今のような作業のためではなく、多額の旅費と時間をさいて学会に出席する際、どんな講演がどの会場であるかを知るために、多分全ての人が今と同じ作業をしたであろうことを考えると、そのための手間をかける価値は十分にあると思うのだが。

(群馬大教育 飯塚 健，お茶の水女大理 藤枝修子)

海外動行

国際協力によるデータベースの作成 — 画像工学特許検索システム ITPAIS —

富士写真フィルム㈱

田淵 利明

富士写真フィルム、米国のコダック、西独・ベルギーのアグファ・ゲバルトの三社が共同で開発・維持している ITPAIS という検索システムがある。これは Image Technology Patent Information System の略称で、画像工学分野の特許や文献に種々の索引を付けコンピュータで検索するシステムである。

ITPAIS はそのデータベースの作成機関が、学協会や情報センターではなく、使用する言葉も歴史的背景も異なる三か国の競合している民間企業である点が特徴的である。国際間の公的機関が共同でデータベースを作成している例はあるが、それでもなかなか真の共同関係を作り出しにくいという話を聞いたことがある。しかし、ITPAIS は共同をはじめてもう 15 年になり、データベースは益々拡充されている。

このような共同が継続的に行えた理由の一つは、技術情報が増加の一途をたどっていることにある。とくに、特許情報が増加したために、他社の特許を厳密に調べて相互に権利の侵害がないようにしなければならず、それには特許の内容を分析してすぐれた分類や索引を付けた特許情報のファイルが必要となる。また、世界の主要国の特許を読んで索引を付けるには、数か国の言語に精通していなければならない。

これらの問題を解決するには、膨大な知的労力と費用が必要で一企業ではむずかしい。国際間で協力しあえば、索引作成のための知的労力を相互に削減でき、言語障壁の問題も取り除くことができる。また、同業企業と共同すれば、蓄積の対象となる情報がすべて相互に興味のあるものとなる点も意義がある。

検索の鍵となる ITPAIS の索引システムは、次のように多面的に設計してある。特許明細書中の文章情報はディスクリプタで索引付けをする。ディスクリプタは、索引を付ける時と検索をする時の間で索引用語の選択にいちがいを生じないようにするため、自然語（キーワード）に使用上の統制を加えた用語である。ディスクリプタには必要に応じて、その用語が表わす概念範囲を定義したスコープ・ノートを付け、さらに、同義語や上位、下位の概念を表わすディスクリプタや関連する概念のディスクリプタを体系的に示して、検索したい内容を表わす索引用語を的確にひろい出せるようにしてある。シソーラス（索引用語集）には、さらに、ディスクリプタの KWIC (KeyWord In Context) 索引を付けてあるので、ディスクリプタ表現中の任意のキーワードを手がかりにして、目的のディスクリプタをさがすことができる。

文章情報の検索には、市販オンライン検索システムに見られるように、文章情報をコンピュータに記憶させ、その情報と調べたい概念を表わすキーワードを照合して、必要な情報を検索する方式もある。しかし、もれなく目的の情報をさがし出すには、記述された情報の内容を厳密に分析して索引付けをしなくては、検索精度の向上はのぞめない。

化合物の索引としては、上記のディスクリプタによる索引の他、分子式索引や化合物の通俗名索引、ポリマーの部分構造名索引がある。所望の構造をもつ化合物を化学構造式からさがすには、化学構造を線型コードに変換して標記するシステム (MCC-TSS: Mechanical Chemical Code - Topological Search Screen) *¹ を用いていたが、当社は化学構造を直接入力できる SPHINCS システム *² を完成し、両者を併用している。

さらに、このデータベースには、ディスクリプタ索引や化合物索引のほか、出願人や出願年、対応特許に関するデータもファイルしてある。情報検索において、一つのシステムや一つの索引化法で完璧を期すことは現在のところむずかしく、ITPAIS ではこのようにいくつもの索引システムを組み合わせる総合索引システムとし、検索精度を高めている。このITPAIS システムやデータベースは単に三社のみの利用にとどめず、画像工芸技術の発展のために、1977年に有償で他企業にも公開し、利用されている。

我が国の物の輸出は輸入を大きく上まわり、貿易摩擦のことが連日のように新聞やテレビをにぎわしている。しかし、技術情報についていえば、我が国の各企業は海外諸国の多数のデータベースを利用して端末機から必要な情報を輸入している。それに比べ、我が国のデータベースは、言語の障壁があるとはいうものの、ごくわずかしが輸出されていないであろう。そういう意味で、今後は他分野でもITPAISのような国際協力が必要かもしれない。

*¹ D. Lefkovitz, J. Chem. Doc. 7(4), 186-192(1967)

*² 花井荘輔 有機合成協会誌 42(8), 715-721(1984)

20TH ACS GREAT LAKES REGIONAL MEETING

MARQUETTE UNIVERSITY, MILWAUKEE

JUNE 2-4, 1986

COMPUTERS IN CHEMISTRY

1. Electronic Mail and Chemistry, *P. Lykos*
2. "CERL Cluster" Computer-Based Education System, *S. A. Falk Milosevich*
3. Computer Science Track in Chemistry, *R. M. Richman*
4. Survey of Chemical Economic Periodicity, *R. B. Gayhart, M. A. Taylor*
5. Computer-Based Education on a "COLOSSAL" System, *S. A. Falk Milosevich*
6. Computational Chemistry on Microcomputers, *K. E. Gilbert*
7. Computer Calculation on Real Chemical Problems, *M. E. Schwartz*
8. Numerical Integration of Complex Mechanism by the Power Series Method, *J. Szamosi*
9. Teaching Thermodynamics Through Interactive Computer Graphics, *K. R. Jolls, J. P. Ries, J. E. Finn*
10. Relaxation Spectrometry: Evaluation of Experimental Data, *J. Szamosi*
11. Computer Programs for the Physical Chemistry Laboratory, *R. H. Anderson*
12. Communication Skills and Technology, *P. Lykos*
13. Searching Chemical Abstracts Online in Undergraduate Chemistry:
1. CA File, Boolean and Proximity Operators, *M. Krumpole, D. Trimakas, C. Miller*
14. Searching Chemical Abstracts Online in Undergraduate Chemistry:
2. File Crossover, Structure and Substructure Search in Registry File, *M. Krumpole, D. Trimakas, C. Miller*
15. Interactive Videodisc in the Teaching of Chemistry, *S. Smith, L. Jones*
16. Computer-Aided Instruction in the General Chemistry Laboratory, *C. A. Wilkie*
17. Applications of Molecular Mechanics to Metal Carbonyl Cluster Compounds, *P. L. Blodgan, C. P. Horwitz, D. F. Shriver*

18. Molecular Modeling and Microcomputers, *V. S. Goodfellow*
19. Protein Structure Prediction on the Personal Computer for Teaching and Research, *H. S. MacDonaid, V. M. Kushnaryov, J. Bedore*
20. Computer Animations in the Chemistry Lecture, *R. D. McKeivey*
21. Application of Pattern Recognition to the Study of Atmospheric Aerosol Chemistry, *E. J. Baum*
22. Using Computer Simulations To Train Instrument Operators, *P. F. Schatz*

CHEMICAL EDUCATION

1. Active-Site Modeling, *G. Marshall*
2. Evaluation and Estimation of Partition Coefficients, *M. G. Koehler, R. L. Lopez de Compadre, W. J. Dun III, S. Grigoras*
3. Computer Tools for Chemists, *D. Weininger*
4. Using the IBM-PC in the Laboratory, *S. C. Gates*
5. Use of Customized Database Programs in the Rapid Identification of Antibiotics, *M. Buytendorp, W. Andres, G. Brill, L. Coen, K. Grebner, M. Scherr, J. Wakat*
6. Protein Structures, *J. Greer*

国内の動き

国際科学技術情報オンラインネットワーク「STN-International」について

JICST 企画室

佐原 卓

本年2月18日から21日の4日間に渡り、東京でJICST、CAS西独のFIZ-IVの三者による「STN-International」東京サービスセンターに関する交渉が行なわれ、基本的合意に至った。

既に61年度の予算として約5億円がJICSTに認可され、現在62年度サービス開始に向け準備作業が進められている。

この国際的な協同事業（以下STNと略記）は「データベース作成者は利用者と密接なつながりを保持しているべきであり、そのためには自ら提供活動を行うべきである」という考え方を発端としており、提供はDialog等のディストリビュータ任せという従来の分業の考え方へのデータベース作成者の反省の上に立つものである。従って、STNは自らデータベースを作成し、提供も行なおうと意図している機関をサービスセンターとし、それらを全世界的なネットワークで結び合せ、各々が所有する情報資源を相互利用することにより、科学技術情報を総合的に提供する世界規模のオンライン情報サービスの実現を目指すものである。STNは最初CASとFIZ-IVの間で検討され、具体化が進められた。そして、ある程度軌道に乗った段階で更に発展を期し、58年末に日本の参加を呼び掛けてきたのである。その後2年間に渡る交渉の結果合意に至ったことは前述の通りである。ここでSTN共同事業の内容を簡単に御紹介する。

- (1) データベース作成者相互の協力による科学技術情報の提供活動である。
- (2) 世界の主要地域の主要な非営利のデータベース作成機関をサービスセンターとして配置し、そこにシステムを運転するコンピュータとデータベースを収納するための磁気ディスク等ハードウェア資源を用意し、それらセンター間を国際データ通信回線により接続する。
- (3) 各サービスセンターは自ら作成するデータベースをSTNを通じて提供することは言うまでもなく、広くデータベース作成者に対し開かれた提供手段としてSTNが活用されるように、各自の地域で活動するデータベース作成者に対し便宜を図るものとする。
- (4) 統一ソフトウェアの使用により、ユーザにとっては多数のデータベースが同一のコマンドで使用出来、使い易さが向上する、また提供の為のソフトウェアの共同開発が可能となり開発コストが節約される。
- (5) 統一ソフトウェアはCASにより各サービスセンターに提供され、各サービスセンターはソフトウェアの改善の為に資金の積み立てに協力する。
- (6) 各サービスセンターが対等・公平に活動できるように、各サービスセンターの代表により構成される委員会の協議に基づき運営される。
- (7) 同一データベースは地域に関係なく、全ての利用者に対して同一価格（通信コストの差額は有る）で提供される。

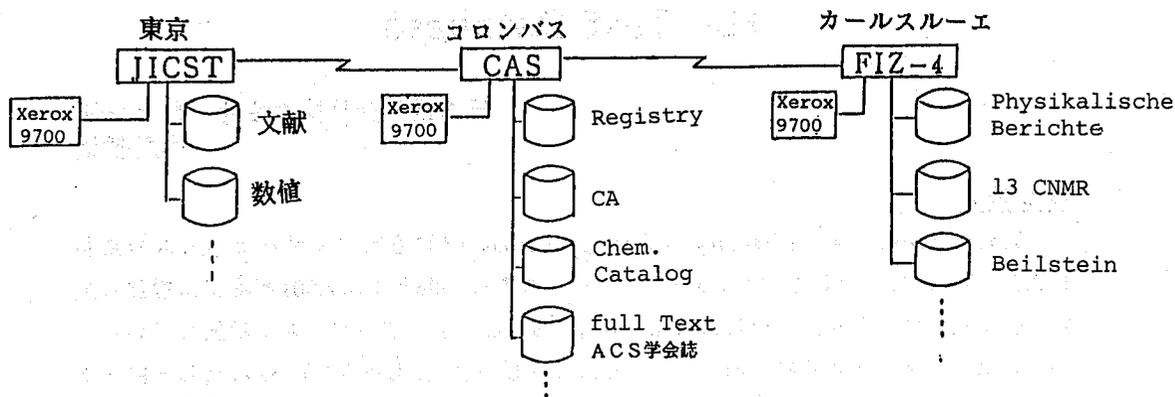


図1 STN概念図

図1にSTNの概念図を示す。

次にSTNの長所と考えられる点をいくつか紹介することにする。まず利用者にとっては(1)同一のコマンドで多数のデータベースが利用できる。(2)サービスセンターが身近にあって便利。(3)データベース作成者によるサービスなのでシステムとデータベースの一体性が強く、サービスの品質が良い。と言った事が期待できる。また提供者にとっては(1)データベースの相互利用が出来るので経済的な情報サービスが可能。(2)世界の主な地域に共同事業者がいるので自ら作成したデータベースを全世界を対象に提供し易い。(3)ソフトウェアの開発が効率的。(4)共同事業者であるデータベース作成者間でデータベース作成について協力できるので、各々が作成するデータベースの総合利用を可能とするような工夫をする等より付加価値の高いデータベース作成が期待出来ると言った点が挙げられる。

以上御紹介したようにSTNは現在スタートラインに着いたばかりで、当面は文献データベースが提供情報の中心である。JICSTとしても国内で発生する文献の英文データベース化したものを中心にSTNを通じ全世界に提供することにより、まず情報の片貿易に対する国際的批判に添えていく予定である。

しかし、今後総合的な科学技術情報の流通手段としてSTNが発展していくためには、非営利の各国の情報機関の相互協力事業という性格を生かし、各国の主な学会との連携を深め学会誌のオンライン提供をもサービス対象とする努力が必要と思われる。そして学会との協力活動の基盤の上に、更に学会相互間、学会と会員間、会員相互間等の個人情報のレベル迄国境を越えて国際的流通にSTNが寄与出来るようになった時、科学技術に国境はないとの精神に立った、各国の科学技術者達の真の情報流通手段としてSTNが存在出来ると思われる。またSTNがそのように発展することを筆者は大いに期待する次第である。

Full Text Database

日本電子計算株式会社 野上 法正
中尾 健治

はじめに

Cuadra社が発行するDirectory of Online Database^{1,2)}にもとづくデータベースの推移を表1に示す。1979年に400であったデータベース数は1986年には2,901と着実に増加している。また、オンラインサービス数は59から454へと、より速いペースで増加している。こうしたデータベースの中にFull Text Database(以下全文DBと略す)と呼ばれる一群があり、日本からも1983年頃から利用可能となってきた。この全文DBの概要を紹介する。

年	データベース数	提供機関数	オンラインサービス数
1979(秋)	400	221	59
1980(秋)	600	340	93
1981(秋)	965	512	170
1982(秋)	1,350	718	213
1983(秋)	1,878	927	272
1984(秋)	2,453	1,189	362
1985(春)	2,764	1,316	414
1986(1月)	2,901	1,379	454

表1 データベースの推移^{1,2)}

1. 全文DBの定義

Directory of Online Database^{1,2)}ではデータベースをReference DatabaseとSource Databaseに大別し、Reference DatabaseはBibliographicとReferralの2種類に、Source DatabaseはNumeric、Textual-Numeric、Full Text、Softwareの4種類に分類している。そして、Full Text(全文DB)はSource Databaseの一つとして次のように定義している。

Full Text. Contain records of the complete text of an item, e.g., a newspaper item, a specification, a court decision, or a newsletter.

すなわち、各記事の書誌的情報だけでなく、一次資料の本文すべてを収録したデータベースが全文DBである。この解釈は、通商産業省のデータベース台帳総覧やKnowledge Industry Publications社のData Base Directoryでもほぼ同じである。

2. 全文DBの作成状況

全文DBの予備調査として、まずDirectory of Online Databaseの1986年1月号²⁾から手集計した。その結果、全2,901のデータベース中577を全文DBとして分類していた。すなわち、データベースの5分の1は全文DBである。

オンライン検索でデータベース数を調べることもできる。図1にBRS提供のKIPDデー

```

ENTER DATABASE NAME_: KIPD
• WELCOME TO DATA BASE DIRECTORY SERVICE, AN ONLINE PRODUCT
• OF KNOWLEDGE INDUSTRY PUBLICATIONS, INC. IN COOPERATION WITH
• THE AMERICAN SOCIETY FOR INFORMATION SCIENCE.
• COPYRIGHT 1984 KNOWLEDGE INDUSTRY PUBLICATIONS, INC. •
•SIGN ON 0:38:21 03/17/86
KIPD 1983 - JAN 1986
BRS SEARCH MODE - ENTER QUERY
  1_: (82$2 83$2 84$2 85$2 86$2).AN.           (全データベース数)
    RESULT          2608 DOCUMENTS
  2_: BIBLIOGRAPHIC.TY.
    RESULT          578 DOCUMENTS
  3_: REFERRAL.TY.
    RESULT           4 DOCUMENTS
  4_: DIRECTORY.TY.
    RESULT          167 DOCUMENTS
  5_: NUMERIC.TY. NOT (TEXTUAL ADJ NUMERIC).TY.
    RESULT          458 DOCUMENTS
  6_: TEXTUAL ADJ NUMERIC.TY.
    RESULT          479 DOCUMENTS
  7_: FULL ADJ TEXT.TY.                       (全文DB数)
    RESULT          464 DOCUMENTS
  8_: 2 3 4 5 6 7                             (Reference Database数)
    RESULT          1932 DOCUMENTS
  9_: 1 NOT 8                                  (Source Database数)
    RESULT           676 DOCUMENTS

```

図1 全文DB数の調査(KIPDデータベース使用、斜字は入力)

データベースの検索結果を示す。このKIPDデータベースはData Base Directoryのオンライン版である。1986年3月時点で全2,608のデータベース中464が全文DBであった。データベースの数え方や分類に多少の差があることを考慮すると、手集計と機械検索とは本質的に同一結果といえる。

同じKIPDを使い、医学、薬学、化学関係の全文DBの状況を検索した(次ページ図2)。これらの分野の全文DBは以外に少ない。そこでビジネス関係についても同様に検索し、比較したのが表2である。ビジネス関係は全文DBが相対的に多い。これは日本と比べビジネス関係の比重が高い3)欧米のデータベース市場構造を反映したものと考えられる。

データベース数	医学、薬学、化学関係	ビジネス関係
全データベース数	371	685
全文DB数	48	146
3社提供の全データベース数	77	88
3社提供の全文DB数	7	12

表2 医学、薬学、化学関係とビジネス関係の比較(KIPDデータベース使用)

1_: AGRICULTURE.SU.
 RESULT 30 DOCUMENTS
 2_: BIOLOGY.SU.
 RESULT 5 DOCUMENTS
 3_: BIOTECHNOLOGY.SU.
 RESULT 9 DOCUMENTS
 4_: CHEMICALS.SU.
 RESULT 29 DOCUMENTS
 5_: CHEMISTRY.SU.
 RESULT 20 DOCUMENTS
 6_: DRUGS.SU.
 RESULT 9 DOCUMENTS

----- 中略 -----

18_: 1 2 3 17 (全データベース数)
 RESULT 371 DOCUMENTS
 19_: 1 AND FULL ADJ TEXT.TY.
 RESULT 4 DOCUMENTS
 20_: 2 AND FULL ADJ TEXT.TY.
 RESULT 0 DOCUMENTS

----- 中略 -----

36_: 19 20 21 35 (全文DB数)
 RESULT 48 DOCUMENTS
 37_: 18 AND (BRS DIALOG SDC).VI. (3社提供の全データベース数)
 RESULT 77 DOCUMENTS
 38_: 36 AND (BRS DIALOG SDC).VI. (3社提供の全文DB数)
 RESULT 7 DOCUMENTS
 39_: ..P DB,SU,VII/ALL (概要の端末出力を指示)

1
 DB DATABASE NAME: COMBINED HEALTH INFORMATION DATABASE.(CHID).

2
 DB DATABASE NAME: COMPREHENSIVE CORE MEDICAL LIBRARY.(CCML).

3
 DB DATABASE NAME: CURRENT RESEARCH INFORMATION SYSTEM, U. S.
 DEPT. OF AGRICULTURE.(CRIS/USDA).

4
 DB DATABASE NAME: HEALTH AUDIOVISUAL ONLINE CATALOG - OHIO.
 (HAVC).

5
 DB DATABASE NAME: DRUG INFORMATION FULLTEXT.(DIF).

6
 DB DATABASE NAME: IRCS MEDICAL SCIENCE.(IRCS).

7
 DB DATABASE NAME: ACS JOURNALS ONLINE. (CHEM FULL TEXT; CFTX;
 AMERICAN CHEMICAL SOCIETY PRIMARY JOURNAL DATA BASE)

SU SUBJECTS: Chemistry.

VI VENDOR/PRICE INFO: BRS, cost/connect hour \$50 royalty/hour, plus \$16 to
 \$35/hour BRS fee, plus telecommunication cost of \$8 to \$14/hour as of March
 1985; \$.48/page offline print.

図2 医学、薬学、化学関係全文DB(KIPDデータベース使用、斜字は入力、出力は一部略)

3. 全文DBの特長

図2にはBRS、DIALOG、SDCがオンラインで提供している医学、薬学、化学関係の全文DB7件を検索し、概要出力を抜粋した結果を示す。最後のCFTX以外はSU(SUBJECTS)とVI(VENDOR/PRICE INFO)を略したが、1、2、4、5、6、7はBRSが提供している。3と5はDIALOGが提供している。なお、5は両社提供している。CFTXは米国化学会発行の*J. Amer. Chem. Soc.*や*J. Org. Chem.*等の全雑誌の図表部分以外の全文を収録している。1983年7月に上記7件中で最初に提供を始めた。その思想や検索法はChemical Abstracts ServiceのCohenら⁴⁾、American Chemical SocietyのTerrantら⁵⁾の論文に詳しい。

本稿では、全文DBの特長の中から作成時と利用時のタイムラグについて紹介する。CA SearchやMEDLINEに代表される書誌データベースは、一次情報誌が発行されてから書誌情報を収録するまでに2~6月程度の作成時タイムラグが生じる。その原因は書誌事項の整理、抄録作り、索引づけなどにある。全文DBではこれらの作業が不要となる。従って作成時タイムラグが原理的には発生しないため、「データベース作成機関の運用次第」で検索者にとって有効な手段となる。「データベース作成機関の運用次第」としたのは、データベース作成機関が印刷出版物の売り上げにデータベースの売り上げ以上に関心が強い場合は、意図的な作成時タイムラグを設定することがあるためである。作成時タイムラグを全く設定していないデータベースもある。例えば、COMPREHENSIVE CORE MEDICAL LIBRARY(CCML)中のNew England Journal of Medicineは雑誌発行当日からオンライン検索を可能としている。

このCCMLは救急医療を中核とする25誌のデータベースであるが、希少臨床事例についても昼夜を問わず検索、出力できることから、アメリカでは「町医者」の利用が急増している。すなわち、書誌情報を入手から原報取り寄せまでの利用時タイムラグの不在が、新しい利用法を生み出している。彼ら「町医者」は一次情報誌代替や二次情報誌代替というよりも、ベテラン専門医代替としてCCMLを利用している。このことは全文DBと印刷出版物が必ずしも競合せず、むしろ従来なかった新市場を作り始めていることを示す。

今後、CCMLやCFTXにみられる全文DBの試みが広く採用され、新たな利用法が増えていくことをデータベースサービスを担当する一員として期待する。

引用文献

- 1) "Directory of Online Database". Cuadra Associates, Inc., 6(3), Spring 1985.
- 2) "Directory of Online Database". Cuadra/Elsevier, 7(1), January 1986.
- 3) 「活用 データベース」, データベースサービス業連絡懇談会編, 昭和60年5月, 東洋経済新報社.
- 4) Cohen, S. M.; Schermer, C. A.; Garsen, L. R. "Experimental Program for Online Access for ACS Primary Documents", *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 1980, 20, 247-252.
- 5) Terrant, S. W.; Garson, L. R.; Meyers, B. E.; Cohen, S. M. "Online Searching: Full Text of American Chemical Society Primary Journals", *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 1984, 24, 230-235.

国際会議

CALENDAR

<i>Date</i>	<i>Title</i>	<i>Organizer</i>	<i>Place</i>
1-4 June	Symposium on Computational and Mathematical Chemistry	Contact: Dr. P. G. Mezey Dept. of Chemistry Univ. of Saskatchewan, Saskatoon, Saskatchewan Canada S7N 0W0	Saskatoon Canada
22-26 June	Computer Vision and Pattern Recognition	Contact: CVPR, PO Box 639, Silver Spring MD 20901, USA Tel: (301) 589-8142, TWX: 710 825 0437 IEEECOMPSO	Miami Beach FL, USA
23-27 June	9th Canadian Symposium on Theoretical Chemistry	Contact: Mrs S. J. McClelland, Dept. of Chemistry, Univ. of Toronto, 80 St. George Street, Toronto, Ontario M5S 1A1, Canada	Toronto Canada
4-8 August	Gordon Research Conference on Computational Chemistry	Contact: Dr. K. B. Lipkowitz, Dept. of Chemistry IUPUI, Indianapolis, IN 46223, USA Tel: (317) 9231321	New Hampton NH, USA
31 August -5 September	International Symposium on Structure and Dynamics in Biomolecules	Contact: Prof. E. Clementi, IBM Corporation, Dept. 48B/428, Neighborhood Road, Kingston, NY 12401, USA, Tel: (914) 385-4964	Riva Del Garda, Italy

SECOND SYMPOSIUM ON CHEMICAL INFORMATION

The "Centre National de l'Information Chimique" (CNIC, or French National Center for Chemical Information) is organizing the Second Symposium on Chemical Information. This meeting will be held on November 13 and 14, 1986 in Lyon, at the Palais des Congrès.

The aim of the second symposium is to organize round-table discussions on ways and means of mastering chemical information, including existing methods as well as the eventual development or adaptation of new methods.

Chemical information has two main characteristics :

- The outstanding development of chemical production for the past 20 years (more than 400,000 new compounds created every year) presents a real problem of information in all activity fields that are concerned by these discoveries.

- In fact, never obsolete, this information is abundant, complex and scattered in many different works and hundreds of databanks whose approach is often difficult.

This symposium is intended, of course, for the information specialists in chemistry, but also all the persons working in large, medium, small size companies, research centers, marketing or legal divisions, concerned by the new technics and new ways to take advantage of the chemical information, including pharmacology, cosmetology, biotechnology.

Several topics will be discussed :

- usage of information related to patents,
- safety, toxicology, regulations and standards,
- computer assisted synthesis chemical reactions and relational studies,
- business information concerning chemistry,
- from raw information to refined information,
- the evolution in chemical information.

A round table discussion will be organized on each of these topics, during which the main elements for consideration will be presented first in the form of papers by three or four experts, with total presentation time for the papers being about one hour, to be followed by a general discussion including the participation of experts and of members of the audience. This second part will last for about the same time.

During this symposium, organizations offering services related to chemical information will have the opportunity to make demonstrations and to present their products.

This symposium will have an international dimension. Several experts from different European countries, USA and Japan and information policy makers from developing countries will actively participate.

The papers may be in either French or English. Simultaneous interpretation will be provided so that the participants may use either language.

Registration and organization :

PACKAGE - 55, montée de Choulans - 69323 LYON Cedex 05

Tél - 78.42.29.53

Télex - PACK 330 295

文 献 紹 介

COMPUTERS & CHEMISTRY

1985年第9卷第4号 論文題目、著者、頁

An algorithm to generate the compact name of benzenoid hydrocarbons, *J. Cioslowski and A. M. Turek*, p.247

An application of computer animation in the study of dynamical aspects of nonadiabatic transitions in the Li-H₂ system, *K. Mizutani, M. Toyama, K. Taguchi and S. Matsumoto*, p.259

Chemical draftsman (CDRAFT), *L. Watt and J. Kao*, p.269

Programmable Calculator Section

Programme de simulation de spectres RMN ²⁹Si obtenus par inversion selective de population, *M. Grignon-Dubois et M. Laguerre*, p.279

Evaluation of one-center Coulomb integrals involving s-functions by a programmable calculator, *Y. Hase*, p. 285

Application Section

An algorithm for entering mathematical functions as input to a FORTRAN program, *J. R. Kingsley, and R. L. Hilderbrandt*, p. 289

Calculation of the crystal field Hamiltonian for an arbitrary distribution of ligands, *H. G. Hecht*, p. 295

A low cost system for the graphical display of space-filling models of proteins, *R. Rowlett*, p.301

An inexpensive chromatographic data system for the Apple II+, *R. S. Tse*, p. 317

Book Reviews

Pascal for FORTRAN Programmers, by Robert Weiss and Charles Seiter, *D. F. DeTar*, p.325

Computer Education of Chemists, edited by Peter Lykos, *D. F. DeTar*, P.325

1986年第10卷第1号 論文題目、著者、頁

The Choice of initial vectors for the calculation of the eigenvectors of multiple eigenvalues of a symmetric tri-diagonal matrix by Wielandt's iteration, *C. Opitz*, p.1

Computer pattern recognition of ^{13}C nmr data for classification of glycosides, *K. R. Beerwinkle, R. C. Beier and B. P. Mundy*, p.3

The use of PROLOG as a protein querying language, *A. J. Morffew and S. J. P. Todd*, p.9

Ion trajectory modelling in time-dependent potential fields: Application to RF-only quadrupoles, *B. E. Wilson, J. W. Chai and C. E. Enke*, p.15

Programmable Calculator Section

Evaluation of normal frequencies for isotopic nonlinear X-Y-Z molecules by a programmable calculator, *P. Paneth*, p.21

Applications Section

Computer program for determining the porous texture of solids using a modified Broekhoff-DE Boer method, *J. B. Parra Soto and C. Otero Arean*, p. 27

Configuring a dual processor based microcomputer as an integrator for chromatography applications, *H. Gunasingham, K. P. Ang and P. C. Thiak*, p.31

Construction of the crystal field Hamiltonian for f-electrons according to the angular overlap model for an arbitrary distribution of ligands, *H. G. Hecht*, p.41

An interactive computer program to draw Newman projections, *J. Kao and L. Watt*, p.47

Note

Warning to the users of the "Geomo" program system, *R. Voets, L. C. Van Poucke and J. P. François*, p.81

Book Review

Microcomputers in the Process Industry, by E. R. Robinson, *Delos F. DeTar*, p.83

JOURNAL MOLECULAR GRAPHICS

1986年第4卷第1号(3月)

論文題目、著者、頁

Measurement of protein surface shape by solid angles, *M L Connolly*, p.3

Conformational studies on histamine H₂-receptor antagonists: deduction of a simple structure-activity relationship, *M Tintelnot and H-D Höltje*, p.7

Pharmacophoric pattern matching in files of 3-D chemical structures: selection of interatomic distance screens, *S E Jakes and P Willett*, p.12

Computer-aided structural comparisons of clonidine and guanfacine with cyclazocine, *B J Cheney and J Kalantar*, p.21

Electrostatic potentials of the alpha helix dipole and of elastase, *R J Abraham, B D Hudson, W A Thomas and A Krohn*, p.28

Central nervous system drug design, *P R Andrews, E J Lloyd, J L Martin and S L A Munro*, p.41

Statistical method for surface pattern-matching between dissimilar molecules: electrostatic potentials and accessible surfaces, *S Namasivayam and P M Dean*, p.46

Similarities of pharmacophoric patterns revealed by the MEP of metoclopramide, molindone and piquindone, a subgroup of dopamine D-2 receptor antagonists, *H van de Waterbeemd, P A Carrupt and B Testa*, p.51

Analysis of the pharmacological properties of clozapine analogues using molecular electrostatic potential surfaces, *H P Weber, T Lybrand, U Singh and P Kollman*, p.56

Approach to modelling specificity determinants in receptor-ligand complexes: congeners of serotonin, *M N Liebman*, p.61

Computer graphic modelling in drug design: conformational analysis of dihydrofolate reductase inhibitors, *V Cody*, p.69



NEWSLETTER

Division of Chemical Information and Computer Science
The Chemical Society of Japan

日本化学会
情報化学部会

Vol. 4
No. 4

人口知能・エキスパートシステム 特集号

(July 1986)

目 次

化学のエキスパートシステムへの期待 米 田 幸 夫 1

特集：人口知能・エキスパートシステム

特集の意義 工 藤 喜 弘 3

紙上パネル 4

丸山 雅雄	土屋 晋	服部 忠
新 重光	田中 一雄	永井洋一郎
塩入 孝之	伊藤 健児	木坂 一彦
山崎 康男	小川 秀昭	紙上 匿名
小山 菊彦	安川 民男	鬼頭 繁治
今井 賢		

AIに何が期待できるか 原 尾 政 輝 17

資料(宮原量中資料集より) 20

会社研究所紹介 25

花王知識情報科学研究所	蛋白工学研究所
三菱総合研究所	CSK総合研究所
野村総合研究所	

関連行事

第9回情報化学討論会プログラム 37

第14回構造活性相関シンポジウムプログラム 44

国際会議

World Congress III of Chemical Engineering 47

化学のエキスパート・システムへの期待

米田 幸夫 (情報化学部会長・東海大学教授)

化学関連産業の各分野で、分子設計 (材料設計を含む) と反応設計 (合成設計) による広範な研究開発を急速に遂行することが、その産業の死命を制するとしても過言ではない。

その研究開発に当って膨大な”知識”が集積されているけれども、これまでの創造的な研究開発は主として研究者個人の天賦の資質に頼り、いわば、英雄待望論であった。

分子設計と反応設計は最終的には研究者個人によってなされるものではあるが、既に、急速に進展している情報技術の成果を利用した、計算機による”支援システム”の活用により、予測・設計が可なり促進されている。

これまでの支援システムも知識を利用していた。“知識ベースシステムによるエキスパート・システム”は、その知識、即ち、実験事実、理論、経験法則、ノウハウを、質的にも量的にも飛躍的に増強し、これらを記号化した述語で記述した”知識ベース”と、これを三段論法などの論理によって活用する、エキスパートの推論過程を収容した”推論機構”とを併せ持つものであって、その開発により、高度の予測・設計が著しく促進されることが期待できる。これらの詳細は、この特集号の随所に解説されるであろう。

さて、予測・設計の過去・現在・近未来の状況はどのようであろうか。

過去では、情報源である文献 (報文・特許) から研究者が知識を収集しこれをノートに記入する。ここで、ノートは、頭脳と文書と考えて良い。ノートに記載された知識を元として、研究者がその経験、直感を駆使して予測、設計し、ピーカ、フラスコで象徴される、古典的な実験室で実証し、これが再びノートに記入され、知識が蓄積されてきた。古き良き時代ではあった。

現在では、情報源が著しく増加 (10年で倍増) したので、文献所在情報データベースが普及し、ファクト・データベースも可なり実用化してきた。しかしながら、知識の集積・活用は過去と同じくノートへの記入が主流である。予測、設計に就いては、小規模な知識を収容した支援システム、すなわち、エキスパート・システムが利用されているに過ぎない。

近未来では、情報源は更に増加し、文献データベースは増強され、これと、著しい発展が期待されるファクト・データベース (全文 (フルテキスト) データベースを含む) の統合システムは、知識の獲得に大きく寄与することとなる。知識の集積・活用にはその可なりの部分は、知識ベースシステムを主体とする、エキスパート・システムに移されるであろう。研究者は予測・設計に当っては、エキスパート・システムに適切な質問を発すると、豊富な知識ベースと高度な推論機構から得られる、多様な解答、即ち、示唆が出力される。これには、知識の内容と推論の過程が明示されるので、研究者は経験と直感により、最適な予測・設計を行う事ができよう。この予測・設計はロボット化を含む、高度な研究室自動化 (LA) によって短時間で検証され、その結果は再び知識ベースとノートに記入され、予測・設計の信頼度を向上させるのである。

知識ベースシステムを中核とする近未来のエキスパート・システムと、それを取り巻く文献・ファクトデータベース、研究者向けのワーク・ステーションが完備することにより、

卓抜な予測・設計がエキスパートである研究者のみならず、更に広汎な研究者によっても実施されるようになり、その目的とする化学物質などの研究開発は画期的に促進されよう。

この種のエキスパート・システムは、診断、翻訳、予測、制御、設計などに活用される。この内、設計はその創造性が最も高いものである。また、故障診断や、医療診断は、一般にはその原因は唯一で、しかも確定的であるに対し、設計の解、すなわち、設計結果は複数で、不確定であって、最適解の評価を要する。

しかしながら、このシステムの確立は決して容易ではない。これは、知識という概念とその表現が必ずしも確定していないこと、設計の基礎となる理論、経験法則、事実の蓄積が不完全であることによるものである。したがって、共通基盤となる基礎化学の知識ベースの構築と、知識のデータベースからの半自動的取得を含めて、幅の広い基礎的なシステムの開発と、限定された対象についての実用的なシステムの構築を当面の目標とすべきであって、更に長期の研究・開発に対する可能性検証を早急に実施すべきである。また、このシステムの構築により、設計理論、諸事実の間の非整合性(矛盾性)や、これらの欠落(いわゆる,missing link)が、検出されることが期待され、設計支援を質的に著しく向上させるであろう。

このような時点で、当部会の NEWSLETTER に、「人工知能・エキスパート・システム」の特集号が企画されたのは、正に時宜を得たものといえよう。

これと時を一にして、科学技術庁の科学技術振興調整費により、「化学物質設計等支援のための知識ベース・システムに関する研究」が、今年秋から第1期3ヶ年にわたり、予算約10億円で実施されることとなった。テーマの表現にお役所らしい含みがあるが、要するに、分子設計・材料設計・反応設計のエキスパート・システムを目指して、その有力なツールである推論システム、特に化学に多い、定性的、半定量的、あるいは、あいまいさを含む知識を処理する高度の新システムの構築と、分子、材料、反応の設計についての、その検証に耐える程度の知識ベースの構築を目標としたものである。ある範囲の設計について、実用に供する知識ベースの構築には第2期の2ヶ年を要するであろう。

推論システムは正に雨後の筈のように作成されているけれども、化学の大型知識ベースについては、国内外を通じてお手本がない。このプロジェクトは、化学技術研究所を始とする、国立研究所群、NTT、幾つかの化学関連企業と、学からは、佐々木慎一教授(豊橋技科大)、藤原 譲教授(筑波大)、その他、当部会のメンバーがその研究・開発に参加し、不肖、私が其の実施委員会の責任を取ることになっている。

約、20年前に誕生した情報化学がやっとここまで成長したとの感慨が深い、感傷に浸っている時ではない。情報化学部会の各位のご協力を得て、第2世代の情報化学システムの花を咲かせたいと念願している。

★ 特集の意義

山形大学工学部 工藤喜弘

いまや常識といった感のある人工知能(AI)やエキスパートシステムの特集の担当になってしまった。当方もその常識が備わっているとは言いがたいので、本業が忙し過ぎてこの方面に首をつっこんでいる暇のない方、また日頃縁のない方などの立場から構成を考えてみた。紙面は宮原資料集から拾った情報、化学者の方々のご意見、AI専門家の解説とからなる。宮原資料集とは宮原早中・情報化学部会幹事の収集になるものである。

AIやエキスパートシステムなる言葉の厳密な定義は難しいそうなのでしないことにした。とにかく柔軟性のあるこの名前を選んだ命名者には感服する。

この新常識のことをてっとり早く知るために安直を求めるのだが、あまり多過ぎて適当な物を見付けだすためのエキスパートシステムが欲しい所である。さて、本紙の規模では一次資料はおろかそれらの解説や目録(二次資料)作成さえ手に余るので、二次資料の目録(三次資料)を作成して参考に供することにした。情報源は宮原資料集である。

次に最近の動きがわかるようにと宮原資料集採録の学会講演プログラムやニュースの中から特に関連がありそうな研究発表や出来事を選んで羅列してみた。

AIビジネス花盛りである。広い意味でのAI活動をしている企業を宮原資料集から拾い(下表)、このうちいくつかは自己紹介をしていただいた。

東芝	日本DEC	住友電気工業	ITI (インテリジェントテクノロジー)
伯東	日立製作所	野村総合研究所	ASRインターナショナル
富士通	沖電気工業	三菱総合研究所	日本DG (データゼネラル)
JBA	日本IBM	富士ゼロックス	ソニー・テクノロジクス
NTT	CSK総研	三井物産	日本シンボリック
花王	シャープ	富士電気	東洋情報システム
ユニー	三菱電気	日本電気	蛋白質工学研究所
CRC	ニチメン		

最後の企画はできるだけ多くの化学者から意見や疑問や希望を述べて頂きそれに対して専門家から解説を頂く、というものである。この企画が100%あたらればお声をお寄せいただいた皆様を代表とする我々の疑問も氷解し、同時に、専門家も潜在利用者としての化学者の考えを知り得る、という一石何鳥かの我ながらすばらしいアイデアである。先決問題は専門家の確保であったが、幸い原尾先生のご快諾下さったので道が開けた。厚く御礼申しあげる。またお忙しい中、当方の無理なお願ひに承えてご協力下さった方々にも心から御礼申しあげる。皆様お忙しい方々ばかりで、タイミングのずれなどで企画の意図通りにいかなかった面もあるが八割方は成功ではなからうか。なお、紙上匿名という便法を早く思いついていればご意見をあといくつかは頂けたのだが、残念なことをした。

ご意見は、肯定派と誇大広告論(我が意を得たり!)に代表される疑問派とに大別できた。この両者の違いはAIを固有名詞と理解するか普通名詞にとるか、の差から来ると考えるがいかがであろうか。

特に積極的なご応募をいただいたのは鬼頭、安川、今井の3氏であるが、面白いことにこのご三方は偶然当方の基準では専門家に属するのである。

これらの意見交換の結果へのご意見やご感想をぜひ「会員の広場」欄などにお寄せくださるようお願いする。なお上述のタイミングのせいもあって原尾先生は化学者側の疑問すべてに言及されてはおられない。そこで、読者の方々からまた新しいご意見などを寄せて頂いたらそれらをも合わせて原尾先生に改めておうかがいできればと、ひそかに願っている。

★ 紙上パネル

人工知能への疑問

宮城教育大学 丸山 雅雄

コンピューターは、ワープロや測定機器を通して道具の一種として使っているにすぎない私が、工藤先生から「素人として人工知能について考えていることを書いてもらいたい」と依頼され、素人としてという事と、半年あればなんとかなるだろうと簡単にお引き受けして、今、何ともならないことを痛感している。その間、工藤先生のお薦めで人工知能に関する本を読み、感じたことを述べて責を免れたい。

人工知能の思考過程と人間のそれとを比較して解説したものがあり、興味深く読んだ。その中には、例えば「コンピューターが自然言語を理解する手順は、人間の場合とさほど変わらない」という文章がある。また、前に有機化合物の分子式を求めるのに、コンピューターに人間の計算方法とは全く違う過程で求めさせた発表を聞いたことがある。素人として、両者の思考過程がどのような時に同じで、また違うのか。それはどこから来るのか。またその得失などの比較をわかり易く教えていただきたいと思う。

またこれに関連して、人工知能の研究開発が進めば、将来人間の思考過程のあるもの、例えば教育によって訓練される部分などで、人工知能の思考過程の方向に変わっていくものもあるのだろうか、等という疑問も生じた。

人工知能に望むこと

山口大工 土屋 晋

最近「人工知能」という言葉をよく目にする。脳死の人のためのものかと思っていたら、そうではないらしい。しかし、「知能」というからには、脳に似ているか又はそれ以上のものでなければなるまい。脳にはナメクジウオの脳もあるし、人間の脳もある。これから開発してゆこうとするからには、人間の脳以上のものをねらうのは当然であろう。

「知能」である以上、少なくとも次のことができなければなるまい。

1. (総合的判断) 確かな情報と不確かな情報又は正しい情報と誤っている情報が渾然一体となって与えられたとき、それらを総合的に取捨選択して、適確な判断を下す能力のあること。
2. (自己啓発) 将棋の駒の動かし方を覚えた少年が、その後の努力によって、有段者のみならず名人にすらなることがあるように、少量の基本的知識と原理を教えれば、そのあとは時間の

経過につれて、能力の向上があること。

3. (審美眼) 美しいものとそうでないもの、こちよいものと不快なものを感じ、識別できること。

4. (創造性) どんなに「創造性がない」と評される人でも、何がしかの創造性はもっているものである。

最近発表されているエキスパートシステムは、多くの場合どうもシステムがエキスパートなのではなくて、エキスパートが使用するシステムのようなものである。例えば病名診断システムにしても、小便や血液を試験管に入れて前に置けば病名がわかる、というわけではなく、色々の検査データを打込んで始めて診断結果が出てくるものらしい。宅急便の荷札をみて行先別に分別するシステムとあまり程度は変わらないのではなからうか。

今後注目に値するのは翻訳システムである。言葉を覚えること、同一概念を別の言葉で表現することは人智そのものである。しかし単なる言葉の置換操作だけを行うシステムならば、とても「知能」とはいえまい。「grand father」は決して「おじいさん」や「祖父」ではない。「偉大なる」という尊敬の念が込められた「父」なのである。言葉には民族の歴史や思想が反映している。したがって、その点を考慮しないシステムは、高々迷路に置かれたネズミの知能程度のものである。

化学分野の「人工知能」には、まず臭い、毒性の識別が要請される。物質の化学反応性はフロンティア電子論でわかるし、臭いの感知も中毒するのも、所詮は化学反応の結果であるから、システムをつくることは可能ではあろう。しかし感知だけではせいぜい犬の知能である。定量的評価ができることが望まれる。

近頃はシステムを開発すると、矢鱈人工知能と言いたがるようである。一般常識に欠ける人達のものなせりわざではあるが、誇大広告的言葉使いは世を惑わすものである。

知識獲得のための人工知能を！

(名大工) 服部 忠

筆者は、愛工大鬼頭氏と共同して2、3のエキスパートシステムの開発を試みている。人工知能のキャッチフレーズを色々聞かされ、その気になって(氏の表現を借りれば、たぶらかされて)共同研究を始めたのであるが、あの時の氏の言葉は実に説得力に富んでいた。最大のキャッチフレーズは、「従来のコンピューター言語にくらば柔軟性に富み、表現力も豊かで、非論理的・経験的な知識や思考法を記述するのに適しており、アルゴリズム的でない推論も可能になる」というものであった。PROLOG に関しては、これは事実の

ようである。機械語から FORTRAN を経て BASIC へと墮落一方の筆者の言語能力の延長線よりさらに簡便な側にあるらしい。

しかし、人工知能となると話は別である。知識がどのような形で頭の中に納まっているかは定かではないが、必要に応じて自在に形を変えて現れてくる（願望に過ぎないかもしれないが）。プロダクションシステムを例にとれば、変幻自在とも思われる知識をすべて If <条件部>, Then <結論部> の形で表現しなければならないのでは、とても柔軟とは言えない。また、一見無関係な事象（知識）を結び付けることにより、飛躍的な進歩が遂げられることがあるが、そのような飛躍的な発想を IF-THEN 形式で表わしうとは思えない。AND/OR トリーを丹念にたどっていけば、無関係に見える知識がいずれは結び付くかもしれない。しかし、そのためには、すべての知識を AND/OR トリーでつないでおく必要があるので、頭の中の知識をすべて IF-THEN 形式に整理してコンピューターに教え込まねばならない（考え過ぎであろうか？）。別の知識表現の方法をと思つて本をめくると、フレームシステムのところには、「全体の知識構造を把握する必要がある」などと書いてある。これでは、人工知能に合わせて頭の中を系統だてて整理し直すようなものであり、従来のアルゴリズム的方法と五十歩百歩の感がある（少々言い過ぎではあるが）。

素人考えかも知れないが、エキスパートシステムの研究は、知識の獲得よりも限られた知識表現の枠内での効率的な推論に重点が置かれているような気がする。効率は犠牲にしてもよいから、もっともっと多様な知識表現を認める人工知能システムを望むのは無理であろうか。さらには、対話的に知識を獲得するための人工知能は実現出来ないものであろうか。などとつぶやくと、鬼頭氏があわてて新しいシステムを PROLOG で作り始めることになる。どうやら、たぶらかされたのは筆者一人ではなさそうである。

人工知能・エキスパートシステムは創造科学の旗頭と成り得るか？

化学技術研究所 新 重光

近年あちこちで“人工知能・エキスパートシステム”など、コンピュータと真面目に会話をしたことのない人間にとっては、何やら得体の知れない、それでいて何か天才的な事をしでかすのではないかという期待に満ちたシステムが蠢き始めている。一方で、高度経済成長期に入った我が国の科学技術政策にいま真に求められているものは、欧米礼讃の物真似ではない日本独自の“創造的”基礎研究である。ここまで語れば前置きとして十分であろう。そう、私がコンピュータのソフト・ハード屋さんに聞きたいのは、最も人間的な、それでいて並の人間では一生かかっても産み出せない真に創造的な仕事を、人間が造ったコンピュータシステムが本当に肩代りしてくれるだろうかという素朴な疑問である。

人間はある困難にぶつかった時是非の判断を永年の体験・学習に基いて一瞬の中に行うと言う。しかし、これは過去の体験や学習が生かせる事象——たとえばyes・noのはっきりした推論エンジンが稼働できるイベントキューから成る機器の故障診断や医療診断（これらとて高度な診断は無理と思われるが）など——に限られ、人類が未だ経験したことの無い全く新しい事象に対しては想像すら及ばぬことだろう。科学における真に創造的な研究成果とは正にこの後者の事象であって、少なくとも私の如き凡人には、将来永きに亘ってコンピュータの頭脳は決して人間の創造力を超えるものではあり得ないと確信しているが、コンピュータプロの諸氏には如何お考えのことでしょうか。

朝旭リサーチセンター 田中 一雄

最近、新聞紙上を賑わせた見出しに「シナジェティックコンピュータ」という言葉がある。直観と類推を並列処理し、認知、記憶、思考など生体の情報処理機能の特徴を工学的に結びつけた全く新しいタイプのコンピュータのことらしい。

現在の人工知能システムは、第四世代コンピュータ上でのソフトウェア技術の最大限の成果と見ることができようが、実際の応用面で見ると計算やデータ検索の延長線上に位置すると思われる特定分野のいわゆるエキスパート・システムがほとんどを占め、実用に耐え得るシステムもごく少数にとどまっているようである。

現在のコンピュータの流れの最終目標に近いとされる第五世代コンピュータにしても、本格的な並列処理を大胆に取り入れることで、より高速な推論が可能にはなるが、演繹推論機能にとどまり、機能推論も含めた、より高速な推論を行う場合にはシステムを構成する上で工学的負担が大きすぎる点に問題があるように思う。三代先前のコンピュータと言われるシナジェティック・コンピュータが誕生してはじめて、ロジック型のコンピュータと組み合わせることにより人間の脳の特徴とコンピュータの高速計算能力を合わせ持ったより完全な成長、進化する人工知能システムが出現するはずである。そのためには今後、電子、機械工学、数学に加えて心理学、大脳生理学、社会学など広範囲な研究が不可欠であり、生体の情報処理機能や生体分子の工学的利用で、まず、シナジェティック・コンピュータのような新しい情報処理システムが生み出され、次に分子レベルでの分子素子、バイオ素子等が実現されることになるだろう。

全く知らないもの事について書くという経験は初めてだが、新聞雑誌などでかいま見た記事から得たうすばんやりとした知識を頼りに、AIについての感想文を苦吟の末に産み出すことにしたい。

AIと言えばチェスマシンを連想する位のものだったが最近ではロボットもAIの一具体化物であるらしい。よく考えてみれば、天気予報マシンや国鉄の運転運行整理システムも実際に使われているようだし、病名診断マシンも精力的に研究されているとのことであって、知識工学の将来は計り知れないものがある。化学者に直接関わりのあるAIは1978年に完成されたという化学構造決定マシン「デンドラル」だが、筆者は不幸にしてまだそれにお世話になったことがないし、お世話になったという人にお目に掛かったこともない。だとすると、化学者にとってAIはまだ自分達の外の世界のもののようにも思える。しかし、鉄砲の普及はあっという間の出来事であったし、若干の潜伏期間の後の新しいものの伝播は何事につれ以外なほど早く進行するのが日本の常であるから、AIの一般化も思ったより早く進むかも知れない。

AI以前の機械は、すべて与えられた仕事のみを遂行するようになっている。AIは自ら考えることのできる機械というわけだが、目的物質の最良の合成経路を考え出したり、最良の医薬・農薬・機能物質の化学構造を特定したりできるAIが実用化されれば、これは化学者にとって便利には違いない。それどころか、戦争すべきかどうか・農産物の輸入を自由化すべきかどうか・政権担当政党をどこにすればよいか・減税すべきかどうか・どの人物を教授に選任すればよいかなど、もろもろの問題につき適確な判断を与えてくれるAIができればこれにこしたことはない。

しかし、判断とか認識とかいう概念はもともと哲学的思考の対象である。国語が苦手、英語が嫌い、社会はどうもなどとぶつぶつ言う理系技術者に真に役立つAIを開発できるだろうか。私には甚だ疑問である。AIの開発者はたとえば文学博士の学位をとった人が更に勉学して理学博士の学位をとった後（その逆でもよい）始めて可能となると考える。コンピューターのみ専門家にはAIは開発できそうにもない。だからといって、歴史学者や文学者やセマンティクス専門家にもAIは開発できないと思う。まさにAIは総合科学中の総合科学であり、また学際中の学際であろう。流行を追う人・名誉を望む人・利益を追究する人・パワーを欲しい人・知識をひけらかす人にはAI開発は不向きである。知能とは世俗的興味を越えた奥深いものであり、手軽にパターン化できる代物ではない。理想的AIは徹底的な哲学的思考の前途にあるものだというのが筆者の感想である。

筆者は薬学領域において有機合成化学にたずさわっている者で、人工知能ということについては全くの素人である。大変恥ずかしい話であるが、“人工知能”という言葉すら、工藤先生から原稿の御依頼を受けて始めて知った次第である。従って以下は全くの素人のたわごとと思って頂きたい。

有機合成化学の領域においても御多分にもれず、コンピューターの導入、利用が始まっている。ダイアログ、CASオンラインなどの文献検索に始まって、ドラッグデザイン、そして有機合成反応の経路設計などに利用されつつある。

そこで人工知能であるが、知能というからには当然コンピューターに人間同様に考えさせるわけであろう。そこで私なりに人工知能に活躍してもらいたい場面を考えると、有機合成反応の経路設計、有機化合物の構造解析、そして有機合成反応の実験条件の設定がある。

合成反応の経路設計については、CoreyのLHASAを始めとして種々のプログラムが発表されているが、大体対話形式で有機合成についてかなりわかっていないと使いこなせないものようである。そこで人工知能に期待したいことは、対話などせずにはずばり反応経路を提示してくれたら大変素晴らしいし、初学者にも使えるようになるかと思う次第である。

次に有機化合物の構造解析であるが、X線結晶解析は別格として、現在では一般にIR、NMR、Mass、場合によってはUV、キラルな化合物ではORD、CDなどのスペクトルをとって構造をきめる。そこで例えば、HPLC装置にIR、NMR、そしてMassの機械を連続的にドッキングして、分離して来た化合物を自動的にそれぞれのスペクトルがとれるようにし、そのデータを人工知能に自動的に読みこませ、構造を考えさせ、構造式をさっとディスプレイに出させるようにしたら便利この上もなかるう。

ところで有機合成において最も時間を要するのは、反応条件の最適化であろう。これは最もtrial and errorを行わないといけない極めて経験的な領域である。そこで人工知能にすでに知られている種々の合成反応の反応条件をしっかりと覚えておいてもらい、合成反応を行う時、この反応において反応剤は何がいいのか、溶媒は何が適当なのか、反応温度はどれ位がいいか、何時間反応させたらいいのかなど、最適の反応条件を人工知能に考えさせるというのは如何なものだろうか。

以上のようなことが人工知能を駆使してかなり容易に行えるようになると、我々有機合成を行っている者は、もっと“何のために、何を創るのか”、つまり有機合成におけるwhyとwhatについて哲学する時間が出来てくると同時に、また新反応、新反応剤の開発をじっくりと考える余裕が出来て来よう。

合成化学から人工知能に期待すること

豊橋技科大学 伊藤 健児

筆者は今迄コンピューターにかかわることは、スペクトルの測定、構造解析、文献調査とワープロ位のものであり、現状も正しく認識していない。しかしほとんどの有機化学者がそうであるように、LHASA以来の合成設計の進歩については意識が高まっており、この傾向はますます強まって行くと考えられる。合成というのは一つの物質生産システムであるから、原理的には全てコンピューターで処理できるはずである。ただ困難なことは解が一つではなくかつ絶対的な解が存在しない点である。その原因の一つは有機化学者にとってすらもはや的確な判断を下すことができないほど膨大な変換反応に関する情報量の多さとその不明瞭さである。ある目的のためにすばらしい新反応が見つかったとき、その反応の持っている潜在的なポテンシャル（例えば他の合成標的に対する適用の可否）の判定はきわめて困難である。発見者の提出しているデータ数には限界があるうえに必ずしも必要とされる適用限度判定のためのデータがふくまれていないことは当然であり、人工知能が論理的に変換反応の適用限界を的確に判断してくれることが期待される。その基礎としては量子化学や分子力場の計算が有力な手段として組み込まれていることが不可欠であろうが、それでも十分ではない。それに加えて分子間相互作用のエナジエティックス、標的分子と反応剤との相互関係、特に立体化学的な動的挙動や溶液内でのコンホメーション変化、とを的確に認識できる機能を付加した人工知能が望まれる。すなわち実験結果として与えられた事実のみ基礎をおくデータベースでなく、変化と多様性に対応できるシステムが方向として正しいのではないであろうか。

エキスパート・システム雑感

日本油脂(株)筑波研究所 木坂 一彦

我々にとって、すぐ気になるのが他社の動向であるというのも、企業人としての宿命であろうか。あるエキスパート・システムに類するようなものを、既にライバル企業が導入しているという不確定情報でも耳にしようものなら、何となく不安を感じ、世の中の趨勢や流行から取残されはしまいかという錯覚に陥りがちなのは、私一人のみではあるまい。最近のこの道の権威者の言によっても、今の段階ではこの種のシステムそのものがまだ模索の域を出ておらず、今のところはこの情勢に遅れぬよう勉強し、充分注意を払ってれば充分であり、ましてやこのシステムを導入する段階では決してないという。こういう言葉は我々に大いに希望と安心感を与えてくれるに充分で、有難くすぐに受入れてしまうところが又我々素人の甘さであろう。

現段階では我々企業人は、種々のエキスパート・システムの何をどう使っていけば良いのかという最も基本的なところで大いに迷っている。これをどう使うことが最適であるかということを確認に示唆し、判断してくれるエキスパート・システムの開発を最も待ち望んでいるということも又本音である。こういった人工知能、エキスパート・システムを結局は最終的に使われる羽目に陥る猜疑心の強い、いわゆる研究者群に一刻も早くこの種のシステムを普及させるためには、彼らの頭脳をぱっと転換させるような強力な説得力を内蔵する洗脳ソフトといったものの開発が是非必要なのではあるまいか。エキスパート・システムに関しては、こんなことを夢想している今日此頃である。

東京都立大学名誉教授 山崎 康男

本年3月をもって現役を引退した者として、また「人工知能」については全く知識のない者として、意見、感想を申し上げるのはいかがかと思うが、あえて愚見を記してみる。

有機合成化学にかずさわっている研究者にとって、最も重要なことは、対象反応の反応機構の解明と、適用範囲をあきらかにすることである。筆者が経験した芳香族化合物の反応のうち、電子供与性置換基によっても、また電子吸引性置換基によっても反応速度が増大するものがあった。この現象の説明としては、電子供与性置換基をもつ基質と、電子吸引性置換基をもつ基質とで、反応機構が異なるという想定が成り立つ。しかし、未だ充分納得出来る結論には達していない。

このような場合に、すべての考え得る機構を提示し、それぞれの機構が成り立つための前提条件を提案してくれると有難い。

しかし、コンピューターの判断能力の基礎は、人間がインプットするベーシックなデータであろう。したがって、まず必要なことは人間の思考能力の解析、多様性、限界、さらには伸長などであろうと考える。

いずれにしても完璧なデータベースをつくるのが先決であろう。

エキスパートシステム、人工知能の1つの利用場面

出光興産(株)中央研究所 小川 秀昭

コンピュータケミストリー分野を身近に知り得たのはおよそ3年前である。以降、本分野における用語を耳にしてきたが「エキスパートシステム」「AI」もその1つである。この様に知識に乏しい私にとって本稿は冷汗ものである。ただコンピュータにはずぶの素人として、こんな利用場面はというものを以下2点述べてみたい。

組成認知の高分子の熱分解で生ずる分解物を、高分子の組成比を変えて検討し、どのようなメカニズムで熱分解が起るか調べ、あるモノマーはある条件下ではこの様に分解するというデータを蓄積し、未知のモノマーについても分解機構、分解物の予測ができれば大変役立つ。何故なら、この方式をとれば従来組成のわからなかった合成高分子の組成を知る手がかりとなるからである。

熱分解機構がモノマーの組成によって異なるということは、実際の同定には困難さを与えているが、このことは高分子の物性ともかかわっており、逆に言えば、高分子物性研究の一助になるかもしれない。

ポリマーの分野に於ても、単なるファクトデータベースによる検索では十分な成果は上らない。知識データベースをまじえた推論型のシステムが望まれる。

パソコン・合成デザイン・人口知能

信州大学工学部合成化学科 小山 菊彦

日頃数式の取り扱いと縁の遠い有機合成化学の分野に属する筆者が、熟年と呼ばれる年代に入って、パソコンながらコンピュータと名の付くものと付き合いを始め、四年は過ぎた。その間、BASICとFORTRAN言語を学び、拙いながら作成したプログラムは赤外吸収スペクトルの解析プログラム、 ^{13}C NMR 化学シフト値の推算プログラム、LAOCOON III パソコン(BASIC)版などである。これら有機化合物の構造解析用プログラムはスペクトルの解析書を片手に、額に汗を流しながら吸収の帰属や化合物の同定に悪戦苦闘する惨めさから逃れるための窮余の策として作ったものであり、余り自慢できるものではない。

一方、筆者は複雑な構造の有機物を合成する戦略と方法論に強い関心を持ち、E. J. Corey, D. A. Evans, D. Seebach, 野村, S. Warren 等の考え方をヒントにして有機分子合成デザインの方法を模索してきた。比較的簡単な有機分子の合成でさえ、多数の可能な合成経路があるのに驚いたり、また予想できなかった可能な合成ルートを発見できて悦んだりするうちに、凡人は凡人として自己のサイズに合ったコンピュータ支援有機合成プログラムを作ってみたいと思うようになった。もちろん、パソコン相手に一人で細々プログラミングするのだから、E. J. Corey グループの LHASA における膨大な合成反応データベースの構築などは到底手に負える代物ではない。これに対し、J. B. Hendrickson のアプローチでは比較的少数の炭素結合造成反応に類型集約化できる利点を持っており、現在この方向からプログラミングを進めている。

筆者は「人工知能・エキスパートシステム」についてよく知っている訳ではない。ただ、上記の構造解析プログラムや作ってみたい有機合成デザインプログラムがこれらのカテゴリーに属するプログラムだとすれば、筆者以外に、多くの有機化学者が「人工知能・エキスパートシステム」の具体的展開をこれら構造解析や合成デザインの領域で期待しているのではなからうか。

人工知能は人間知を超えることができるか。

東京農工大学工学部 安川民男

人工知能に関心を持つものにとって最も基本的な問いの一つは表記のものである。

電算機が出現した初期のころにはその可能性について楽観的な見通しが多く、事実現在の電算機は、数値計算や単純な情報検索では現在の電算機は人間より数桁上の能力を示すようになってきている。しかしパターン認識や意味理解などでははるかに低い能力しか示さず、その可能性についての再検討が行われるようになった。その理由として、“電算機は細部までその動作を規定したプログラムにより動くものであり、それを人間が作る以上電算機の知的水準が人間を超えることはありえない”との主張があげられそれなりに説得力のあるものといえる。

しかし近年これまでの処理の細部までを直接人間が記述する必要のある手続型言語に替って、複雑な論理演算について非手続型言語が用いられるようになり、例えばそれを用いて書かれたチェスのゲームプログラムに人間が勝てなくなってくるにつれ表題のような質問が改めて問い直されることになってきた。いま世界的に第二次人工知能ブームをむかえていると言われている。ここで中心になっているのはエキスパートシステムであり、これは専門家がすでに獲得している知識を整理しマニュアル化したものの電算機による運用と言うことができ原理的に言って人間知を超えるものとはいえない。科学技術研究についてみれば人工知能が人間知を超えたと明確に言えるようになるのは、それが演えきの推論の枠を超えて帰納的推論や新しい概念の導入をもとにした法則性の発見が可能になった段階と言ってよいであろう。

人工知能による知識獲得や定理発見はまだ研究がはじまったばかりの段階であるが、電算機にとって帰納的推論は最も不得意なものの一つであるところから、仮説検定による推論 (abduction) が有力な方法とみなされている。このさい仮説をどのようにしてたてるかが大きな問題であり、試行錯誤的、ユースツテックスあるいはしらみつぶしのものなど種々の方法が試みられている。人間での新発見にしばしば重要な役割を果たしている“インスピレーション”はある程度までは無意識下での試行錯誤的仮説検定によっていることは広く知られていることであるが、人間の脳での情報処理が現今の電算機のようなシリアルなものではなく多数の脳細胞の協同作業によるものであり、また学習による脳組織の構造的再組織化が効率的な情報処理の一因と考えられていることからみると表題の問いにたいして全面的に肯定的な答えが得られるためにはハードウェアやアーキテクチャに飛躍的な進歩があることが前提となりバイオコンピュータの実現を待たなければならないのかもしれない。

参考書

- 甘利俊一 "バイオコンピュータ" 岩波書店
塚原伸 "脳の情報処理" 朝倉書店
R.Davis and D.G.Lenat, " Knowledge-Based Systems in Artificial Intelligence ", McGraw-Hill , 1982.
M.L.Brodie et al. (Editors), " On Conceptual Modelling ", Springer , 1984.

Shell, Lisp or Prolog ?

(愛知工業大学 鬼頭繁治)

我々は触媒設計支援システムおよび赤外分光データ解釈システムという2種のエキスパートシステムを開発中である。ここではこれらの経験に基づいて知識工学の化学への応用の際の留意点について考察を試みる。

化学関連のと言うよりは工学一般のエキスパートシステムの開発の場合に直面する問題は、知識工学の教科書等に見られるケースと異なって使用する知識の抽象化レベルが高い点であろう。このことを説明するために、例としてエキスパートシステム構築に広く用いられているプロダクションシステムを考える。プロダクションシステムでは人間(専門家)の有する知識を宣言的知識として次のようなルール形式で表現する。

IF <条件部> THEN <結論部>

これらの知識を使用してワーキングメモリ(短期記憶)内の内容を変化させて問題解決を行うわけであるが、「人工知能」に忠実な観点からは結論部は記号の書き込み、消去および書き換えの3種の基本操作からなる。実際、教科書等においてはこの線にそってプロダクションシステムが解説されている。また、最近商業ベースでも多く提供されはじめたエキスパートシステム開発ツール(エキスパートシステムシェル)もこの3操作が基本となっているようである。この種のプロダクションシステムは診断システムなどの開発には有効であり、現実には多くのシステムが構築されている。しかし、化学技術者は電卓が必須であるくらい日常かなりの数値計算をしながら問題解決を行っている例からもわかるように、専門技術者の知識には人工知能的な記号計算以外のものの割合が多いと言える。したがってそのエキスパートシステムの構築に際してはこのような抽象化レベルの高い知識を表現できるようなソフトウェア環境が必要である。上で述べたエキスパートシステムシェルで

はこのような知識の表現は、ユーザがLisp等の(外部)言語でプログラムしてシェルにリンクするためのインターフェースを提供することによって、シェルを使用してエキスパートシステムを開発してみたら、結果的に推論エンジン以外のほとんどがLispのプログラムになっていたような経験をした人も多いと思う。より広範囲に「人工知能」システムを利用していくためにはこのような「非人工知能的」な知識の表現能力は不可欠であり、さらにこれらは一般にad hocであることから、情報化学に携わる者にとって当面はLispあるいはPrologによる記号処理プログラムの作成は避けては通れないであろう。

エキスパートシステム開発支援ツールに想う

学習院大学計算機センター 今井 賢

エキスパートシステムを、prolog或いはLispなどの言語処理系で一から開発するのが面倒なユーザーのために、シェルと呼ばれている、実に簡単にエキスパートシステムを構築できる、パーソナルコンピュータ用ツールが、安価に入手できるようになった。確かに、本格的なエキスパートシステムを構築するためには、ファイル管理・グラフィックス操作・外部処理系との連結など、細部に渡るサポート機能が備った開発環境が要求される。しかし、そのような充分な開発環境は未だ一般的に贅沢品である。本格的なエキスパートシステム構築計画の積極的推進派も、またエキスパートシステムの将来に不安を抱いている消極派も、まず自らプロトタイプを作ることをお勧めする。それにはパソコン用の市販のシェルがお手ごろではないだろうか。市販のシェルは、誰でも一日もあれば簡単なシステムを実際に構築することができる。それらのシェルは、本格的な開発環境(ハード及びソフト)に比べて価格は約1/10でありながら、機能は7割以上を備えている。(勿論、残りの3割の部分が実用品とおもちゃとの違いを決定付けるのであるが。)

そこでNEC9800シリーズで稼働するルールベース系のシェルを3つ紹介させて頂く。まず一番目は、Cで記述されている"EXSYS"である。推論は後ろ向きであるが、最近リリースされたversion3.1は、前向き推論もサポートされ、また外部プログラムとのデータの受け渡しに関してもその機能が強化された。

次の"apes"はmicro-PROLOG上で稼働し、ルールやファクトをプログラム実行中に補いながら問題解決を行なうシステムを開発するためのプログラムモジュールである。

最後に"Shell-KABA"は、Prolog-KABA上で動く、前向き推論を装備したシェルである。上記の2つとの大きな違いは、マウスによるマルチウインドウシステムやメニュー方式を採用し、あたかもAIワークステーションの環境を実現(?)しようとしている点である。

以上がルールベース系のパソコン用シェルの例であるが、例えば"COMEX"のようなフレーム系或いはハイブリッド（ルールベース+フレーム）系のパソコン用シェルが今後望まれよう。一方、ワークステーション又はミニコンクラス以上のハードウェアで稼働するツールなら、フレーム系：KEE, LOOPS, ルールベース系：OPSS, ハイブリッド系：ESHELL, EXCORE, ART など、一部出荷予定も含めて、豊富に出回っている。

筆者はこういったツールが次々と出現してくるのを歓迎している一人である。冒頭で述べたように現在のこれらのツールには、かゆい所に手が届くようなシステム作りは期待できない。しかしながら、個性的なエキスパートシステムを構築するとき、コンピュータと専門家との仲介役であるKE(Knowledge Engineer)が、これから益々必要となってくるであろうという予測には賛成しかねる。なぜなら、開発ツールがより充実し、コンピュータがより人間に近づき、専門家にとってエキスパートシステムが手軽に開発できるようになると考えるからである。従って、充実したツール（つまりこれは、エキスパートシステム開発のためのエキスパートシステム）がKEの役割を果たして、これから脚光を浴びようとしているKEも不必要になるのではないだろうか。

★ AI理解のための専門家からの助言

AIに何が期待できるか

山形大学工学部 情報工学科 原尾 政輝

最近雑誌や新聞でAIやエキスパートシステムという言葉をよく見かける。それも「創造する機械」とか、「知能を持った機械」、あるいは「未来知性派のためのAI」といった風に、すこぶる好奇心をあおるものが多い。その受け止め方もAI不可能論からAI万能論までいろいろのようである。しかしAI研究の本質を正しく認識し、各研究分野の研究ツールとして取り入れて行く事は今後の研究の重要なポイントのようである。私自身はリオのカーニバルよろしくフィーバーしているAIを少し距離を置いて眺めている者の一人であるが、私の知識の範囲内で少し私見を述べてみたいと思う。

AIの定義を一言で言うのは難しいが、大雑把には知的な情報処理を計算機上に実現する事であろう。1950年代にはもうAI研究のはしりがあり、これまでの研究の流れの中で案外視された時代やゲームの様に成功したのも幾つかあるが、一般につい最近まで悲観的であった。研究は米国、英国を中心に行なわれて来たが、その研究者達の多くはTシャツにジーパン姿の研究者ロンペン、変人奇人の集まりと皮肉られたりもしていた。それが急にネクタイ姿の紳士研究者がAIの重要性と必要性を説き、天道説から地道説に変わった時の様にかAIは未来の学問の筆頭のように祭り上げられてしまった。頃も良く日本でも第5世代コンピュータプロジェクト

がスタートし、若い研究者を中心に予想通りの成果を上げている。又この4月には日本でも人工知能学会が設立された。AIフィーバーの起った一つの要因には、VLSI技術に代表されるハードウェアの進歩とソフトウェアの充実によって高性能の安価な計算機の使用環境が整った事があげられる。又AIソフトが商売になり始め、メーカーが力を入れ始めた事もある。その様子は、'85、'86人工知能展の盛況ぶりに良く表われている。

さて少し真面目な話しましょう。理論計算学の中に計算可能性の理論というのがある。その概要は計算機で計算できる関数は帰納的関数あるいは計算可能関数と呼ばれる限定されたクラスだけで、一般にはどんな計算機を用いても計算出来ない計算不能関数が存在するというものである。実際人工知能で基本的な定理証明や問題解決の本質的なアルゴリズムは計算不能(決定不能)の問題にひっかかってしまう。そして計算機は単に計算可能関数をプログラムとして与えたものしか計算出来ない事になる。これらの事実が、人工知能等どだい不可能なのだという論拠の1つになっている。これは確かに説得力のあるもっともな説であるが、次の事に注意しよう。この理論の本質はGödelの符号化やCantorの対角線論法に基づいており、最初から無限の世界での議論になっている点である。我々の問題にする人工知能は、幾らでも大きくて良いが、有限である世界なのである。

人工知能システムは、大まかに言えば対象とする問題の記述データ(知識表現)と $A \rightarrow B$ 、 $B \rightarrow C$ より $A \rightarrow C$ を導く、いわゆる推論機能を持つ処理系(エンジン)より構成される。初期のAIでは推論アルゴリズムとその制御戦略に多くの労力が払われたが、計算量の爆発的増大の問題を解決できず失敗した。このように現実の人工知能で問題になるのはむしろ大量のデータを用いて処理する際の爆発的に増大する計算量をいかに押さえ、意味のある時間内に実行するかという点である。

以上のような考え方から提案されたのが、問題を医療、教育、設計、……等限定された分野に絞り効率的な処理が可能な階層構造あるいはフレーム等の形にデータを蓄積し、問題に適した形で推論するいわゆる知識工学、エキスパートシステムである。現在実用になりそうだと、もてはやされているのは万能型AIではなくて、このような各専門家の知識を持ったエキスパートシステムである。

このエキスパートシステムに対しても、そのような単純な三段論法の組合せだけで果して知的処理と言えるものが出来るのかという疑問が起るのは当然であろう。確かに計算機上に実現できるのは推論の量的組合せの強化だけである。量的な違いは質的な違いをもたらしてくれるであろうか。私はある意味ではそれが可能だと思っている。

生物の脳は神経細胞が複雑に組み合わさって構成されている。アメーバのような原生動物から人間に至るまで原理的には同じ機能の神経細胞とすると、アメーバの単純な情報処理と人間の高度な処理との質的な違いは何に起因するのであろうか。その理由の1つは神経細胞の量、それも有限の量の違いからくるものではなからうか。こう考えると大量のデータを効率良く処理する事が可能になれば人工知能の可能性も否定出来ない様に思える。ゲームやある種のエキスパートシステムのように限られた範囲ではあるが、人間の知力をはるかに超えたものが実現されているのも確かである。

現在の人工知能の研究は、アメーバやクラゲのような原生動物のレベルから一歩抜け出そうとしている段階ではなからうか。ハードウェアについて言えば、VLSI技術の進歩が目覚しく、 1mm^2 の面積に $10^3 \sim 10^4$ ものゲートが集積可能になって来ている。ミツバチの脳では 1mm^2 上に 10^4 ニューロンがあると言われているからまだまだ及ばないが、集積度は生物にどんどん近づいて行くであろう。生物の情報処理のように、量的に増えた情報を統合・活用するシステムアーキテクチャやソフトが開発されれば限りなく知能に近い機械がシリコン上に実現できるかもしれない。人間のようにバランスのとれた高度の情報処理は望むべくもないが、鳥と飛行機の関係のように、推論という限定された能力であっても、それを強化して行く事によって、ある面で人間を超える能力も実現できるであろう。

さて次に我々の研究にどのようにAIを取り込んで行けるのかという点について考えてみよう。現在AI用の汎用型言語にはLisp, Prologといったものがある。ただこれらは関数型、論理型の言語というものですぐにAIに結びつくのではなく、基本ツールであると考えた方がよいであろう。最近パソコンでも殆ど使える状況にあり、プロトタイプを作成するにはパソコンの方が良いかもしれない。40過ぎたらPrologという言葉があるが、記号処理や定理証明的プログラムの方法は理解し易い。

本格的プロダクションシステム、フレームシステムといったAIツールはミニコンやワークステーション用のものが多く、未だちょっと高価な感じがする。最近パソコン上のLispやPrologをベースにしたものも出回って来ている。それらの情報は別稿に詳しい様なので省略するが、やっと手近に、安価で使い勝手の良いAIツールが使える環境が揃って来たという所であろうか。

さて現在のAIツールはバカチョンカメラの様にボタンを押せば何でも出来るという訳には行かない。バカとハサミは使い用の諺ど通りに使いこなして行く技術が必要である。それには知識の獲得の方法、推論やデータの構成等工夫しなければいけない重要な問題が沢山ある。又開発者はそれぞれ対象分野の知識に習熟している必要があり、単にKE (Knowledge Engineer) にまかせるのではなく、各分野の研究者が開発技術を身につける必要があると思われる。

自転車に乗るのに、物理学の知識を必要としないのと同様に、現在エキスパートシステムを構築するにはAI理論を必要とはしない。しかし飛行機を作ったり人工衛星を打ち上げ宇宙に進出するには物理学が本質的だった様に、未来のAIを開発するためには計算機科学、医学、心理学等を含めた総合的な立場から検討する必要がある。その様な意識を持った研究者ルンペンも未だ多数いる事はいるのである。

★ 特集や解説の目録 (宮原資料集より)

- 1 「知識工学応用人工知能」、数理科学(1981.4)。
1981年当時の知識工学の動向解析
- 2 「第5世代計算機」、数理科学(1982.4)。
第5世代コンピュータ計画と知的プログラミングの関係と概説
- 3 「知能情報処理とロボット特集」、電子通信学会雑誌(1982.4)
知能情報処理全般にわたっての各分野での開発状況の解説
- 4 「人工知能」、日経エレクトロニクス(1982.9.27)。
- 5 「知識工学」、オペレーションズリサーチ(1983.6)
第5世代コンピュータプロジェクトの概観、役割、知識ベースシステムの有用性
- 6 「人工知能」、日経エレクトロニクス、日経コンピュータ(1983.4)
記事の中から人工知能関連の記事をまとめたもの
- 7 「実用化に進む人工知能」、日経エレクトロニクス(1984.4.9)
- 8 「オブジェクト指向プログラミング」、日経エレクトロニクス(1984.8)
Smalltalkをベースにした機能と例の紹介
- 9 「人工知能」、理想(1984.10)
人工知能、認知科学、哲学等の専門家による評論
- 10 「知識工学」、計測と制御(1984.9)
知識工学誕生6年後の日本の現状
- 11 「ロボットシステムの知能化を探ぐる」、オートメーション、Vol.29、No.9(1985.9)
- 12 「知識工学の基礎と応用」、計測と制御、Vol.24、Nos.2-9(1985.2-9)
理論、方法、技術の体系的解説
- 13 「AI実践の時代」日経コンピュータ(1985.3.15)
企業(大成建設、三洋証券、三菱電気、川鉄)での応用
- 14 「人工知能をつかまえろ」、コンピュータピア(1985.4)
人工知能ビジネスの状況と概観
- 15 「人工知能の進歩と適用へのアプローチ」、オートメーション、Vol.30、No.15
(1985.5)
- 16 「LISPの最近の動向」、情報処理、Vol.26、No.27(1985.7)
- 17 「人工知能」、日経バイト(1985.9)
- 18 「脳とコンピューター——脳のソフトウェアを求めて——」、Computer

Today, (1985. 9)

- 19 「機械翻訳」、情報処理、Vol. 26, No. 10 (1985. 10)
機械翻訳の技術の現状と、今後の研究課題
- 20 「人工知能ビジネスの扉を開く」、コンピュータピア、(1985. 10)
- 21 「エキスパートシステム—実用化と課題」、エレクトロニクス (1985. 12)
応用の方法
- 22 「知識工学」、情報処理、 Vol. 26、 No. 10 (1985. 12)
基礎概念の体系的な解説
- 23 「人工知能ウォーズ。フィーバーするAIビジネス戦略」、NK-Mook 31
(1985. 11)
AIビジネスの総まとめ。いろいろな観点からの簡単な報告
- 24 「人工知能：実用化の夜明け」、日経コンピュータ (1985. 11)
1985年の総まとめ、解説
- 25 「パソコンAIの可能性」、プロンプト (1986. 1)
パソコンAI関連の情報の総まとめ
- 26 「人工知能」、富士通ジャーナル (1986. 1)
富士通の方針と今後の展開
- 27 「知識工学とその産業分野への応用」、日立評論 (1985. 12)
日立の研究状況
- 28 「エキスパートシステムズ」、Computer Today (1986. 1)
- 29 「人工知能に関する参考文献」、ドクメン研究、36(1)、9-17(1986)
- 30 日本機械工業連合会、新世代コンピュータ材料開発機構、「開発目的への人工知能
技術の導入—化学分野への応用」、昭和60年度新世代コンピュータに関する
技術開発動向及び適用分野等の調査報告書。昭和61. 3. p. 118
- 31 「人工知能」、日本の科学と技術、Vol. 27、No. 238 (1986. 3)
- 32 「化学と生物におけるコンピュータ」、化学と生物、24、No. 4 (1986. 4)
- 33 「エキスパートシステム構築ツール」、Computer Today (1986.5)

★ 学会講演発表 (官原資料集より)

- 1 内山喜久子 (CSK総研) : 「知識工学システムの現状について」、
Molecular Design, 6, No. 52 (1985)
- 2 R. Banares-Alcantara et al. : 「Development
of an expert system for physical
property predictions」, Comput. Chem.
Eng., 9, No. 2, 127 (1985)

- 3 J. Chowdhury, 「Thinking machined and the CPI」, Chem. Eng., Sept 20, 1982, p 45.
- 4 Mark Lipowicz, 「Expert systems」, Chem. Eng. June 10, 1985, p 93.
- 5 J. Chowdhury, 「Process controllers for "expert" guises」, Chem. Eng. June 24, 1985, p14.
- 6 J. Chowdhury, 「Expert systems gears up for process synthesis jobs」, Chem. Eng. August 19, 1985, p 17.
- 7 花熊克友ら(出光石油化学)、「知識工学的手法によるプロセス異常診断へのアプローチ」、オートメーション、30、No. 9、74
- 8 梅田富雄(千代田化工)、「応用人工知能——プロセス工業における最近の動向——」、PETROTECH、9、No. 3211(1986)
- 9 鬼頭繁治ら(愛工大)、「人工知能を利用した赤外吸収スペクトル解析システム」、日化第52春季年会 4006(1986)
- 10 藤井良彦ら、「分子設計のための人工知能システムANALOGS の試作(2)」, 日化第52春季年会、4007(1986)
- 11 大江修造(東海大)、「気液平衡推算法の知識データベースによる選択」、化学工学協会第51年会、D203(1986)
- 12 鬼頭繁治ら、「触媒設計における知識工学の応用(2)」, 化学工学協会第51年会、G301(1986)
- 13 江上誠一、「大規模なプラントの異常診断法および異常診断システムの開発システムの開発支援ツールについて」、化学工学協会第51年会、H103(1986)
- 14 松山久義(九大)、「(研究講演)化学プラントの異常診断」、化学工学協会第51年会、P305(1986)。
- 15 山口兆ら(阪大)、「知識工学(3)——重項目酸素化学反応各種不安定中間体の反応様式とPDルール」、化学工学協会第19秋季年会、C108(1986)
- 16 小西勝ら(鐘紡)、「知識ベースを用いた離散形システムのシミュレーション」、化学工学協会第19秋季年会、C111(1986)
- 17 富田重幸(東工大)、「経験的知識主導型の化学プラント故障源探索システムの開発」、化学工学協会第19秋季年会、SC112(1986)
- 18 鬼頭繁治ら、「触媒設計における知識工学の応用(1)」, 化学工学協会第19秋季年会、SJ101(1986)
- 19 William R. Nelson, 「Expert system for operator problem solving in process control」, CEP Dec 1985, p 25
- 20 P. E. Lehner et al, 「Expert system on micro computers」, Expert systems, 2, No. 4, 198(1985)

- 21 R. Banares-Alcantara et al, 「Knowledge-based expert systems for CAD」, CEP Sept 1985, p. 25
- 22 B. G. Buchanan, 「Expert systems: working systems and the research literature」, Expert systems 3, No. 1, 32 (1986)

★ ニュースから (宮原資料集より)

昭和60年

8. 6 コンピュータケミストリー・大沢映二 (一8、日経産)
8. 19 通産、DB基盤整備へ (日刊工)
8. 22 解析データ集発売、有機化合物分析に一助、旭リサーチセンター (日経)、
(日刊工)
8. 19 通産、DB基盤整備へ (日刊工)
8. 24 蛋白質デザイン (日刊工)
9. 13 化学大手各社、化学DB構築へ (日経産)
9. 27 通産、新素材のDB構築へ (日刊工)
10. 15 BSがゴム分子設計技術 (日本工)
11. 8 LA分野の品揃え強化 (日本工)
11. 19 計算機実験・片岡洋右 (一21) (日経産)
12. 6 三菱化成、武田、東レなど5社、蛋白質活用未来技術 (日経産)
12. 7 蛋白質工学の研究推進、母体に中核5社 (日刊工)
12. 18 蛋白質工学ソフト、日本DEC20億投入 (日経)
12. 27 研究データ蓄積新システム導入。大正製薬 (日経産)

昭和61年

1. 17 作図作業をOA化、日産化学、サイエンスグラフ (化工日)
2. 5 インターロイキン2、新ベクターで誘導体 (日経産)
2. 27 3次元分子設計支援システム発売、富士通、呉羽 (日本工)
3. 3 東亜燃料工業、プラント用の生産計画エキスパートシステムを開発
(日経AI)
3. 3 三井東圧化学、方程式解法ソフトEQUATRAN-Mに数式処理拡張へ
(日経AI)
3. 10 蛋白質ハイブリッド研発足 (化工日)
3. 10 GE蛋白質解明に新手法 (日経産)
3. 10 コンピュータケミストリー総合システム完成、住化、日電 (化工日)
3. 13 近く蛋白質工学研設定 (化工日)
3. 13 ディスプレイ上で分子設計、理経、バイオグラフ販売 (化工日)

- 3. 31 研究開発効率化の切り札 (化工日)
- 3. 31 花王、エキスパートシステムやソフト開発支援の研究を本格化 (日経AI)
- 3. 31 科技厅、化学物質設計支援の知識ベースシステム開発に着手 (日経AI)

- 4. 4 ファインケミ分野のR&D 電算機活用が急ピッチ (日刊工)
- 4. 4 光メモリー用新機能性有機色素設計法を確立。大府大 (化工日)
- 4. 11 富士写真、化合物構造処理システムを開発 (石油化学)
- 4. 14 対話型3次元設計プログラム (Biograf) (日経コンピュータ)
- 4. 14 英ケミカルデザイン社の分子設計総合ソフトウェア (Chem-X) (日経コンピュータ)
- 4. 21 通産、高分子のDB構築へ (石油化学)
- 4. 26 コンピュータケミストリーシステム参入、ダイキン (化工日)
- 4. 24 蛋白工学研究所、正式に発足 (石油化学)
- 4. 28 米Eaton社、射出成型機械の操作を助けるエキスパートシステムを開発中 (日経AI)
- 4. 28 米Amoco社とIntel Corp社、AIと分子生物学の合併会社を設立 (日経AI)

- 5. 12 米3M社、高分子化合物の開発支援エキスパートシステムを実用化 (日経AI)
- 5. 12 富士電気化学、独自のAIツールによる材料設計シミュレータを今秋実用化へ (日経AI)
- 5. 17 コンピュータケミストリーシステム分野、異業種間提携が活発化 (化工日)
- 5. 17 分子構造を立体表示 (GDPS598) (化工日)
- 5. 20 蛋白工学、米の研究体制づくり着々 (日経)
- 5. 21 夢広がる蛋白工学 (日経産)
- 5. 21 米のDNA蛋白情報 CD1枚に集録、日立ソフト (日経産)
- 5. 28 電算機で分子設計 (東農工大)

- 6. 9 英ICIのエトキシ化合物工場向け品質管理エキスパートシステム完成 (日経AI)
- 6. 20 蛋白質の改質に新手法 (日刊工)
- 6. 22 コンピュータケミストリーシステム (化工日)

★ 会社研究所紹介

花王知識情報科学研究所における 計算機化学

花 王 株式会社

山 下 修

花王(株)知識情報科学研究所は、昨年(昭和57)の4月に発足致しました。化学に関連する日用雑貨品メーカーが、なぜこの一見遠いイメージの研究に取り組もうと決意したかは、以下の様であると私なりに想像します。良い品物をより安く提供することには限界があるのです。たとえ、非常に良い商品を開発したとしても、その性能に見合った効果的な宣伝をしないと良い商品として消費者に定着しません。従って、この宣伝費が商品のコストへの上乗せとなるのです。ここで言う宣伝とは、テレビ・新聞・雑誌等でのコマーシャルのことですが、この種の流しっぱなしの宣伝では、訴える情報としても希薄で、消費者のある層に的を絞りたいと思っても無理なのです。今後、少量多品種生産の時代に入るとこの種の宣伝ではもう限界が目前なのです。そこで発想されたのが、消費者の要求に最も合った商品を店頭で選び出してお勧めするための支援システムです。日本全国の小売店主に全商品に関する相当深い知識を持って戴くのは無理ですが、コンピュータなら簡単にやってくれるでしょう。この発想が次世代のコンピュータ・プログラミング技術、人工知能の一つの分野である知識工学に結びつくことは、容易に理解して戴けると思います。

前置きが長くなってしまいましたが、これから紹介致しますのは、知識情報科学研究所の中でも知識工学研究室のことで、他に、商品を提供するときのイメージとして大切なボトルのデザインから製造までをシステム化することを現在の仕事としているコンピュータ・グラフィックス研究室、界面活性剤製造プラントの効率的操業を目的とするシステムを開発している情報通信研究室、そして、マーケティング情報の解析を研究とする社会学研究室がありますが紹介はまたの機会に譲りたいと思います。

知識工学研究室には、今お話しました商品をより知的に提供するためのシステムを開発するグループ(商品エキスパート・システムと呼んでいる)と、研究開発支援システムを研究するグループとに分けられます。なお、我々のComputational Chemistryグループは後者に属しています。

知識工学的手法をシステム開発に取り入れているのは商品エキスパート・システムのグループです。取り扱わなければならない情報が多く、知識の体系化もなかなかの難問で、しかも利用できる知識表現法さらに推論エンジンがまだまだ未熟なため、かなりの苦戦を強いられています。しかしながら、人工知能的手法もエキスパート・システムとして仕上

げるためのひとつの要素でしかなく、他に取り入れておくべき要素技術は多くあります。例えば、知的ユーザー・インターフェイス、商品知識のデータ・ベース化、情報通信等があります。目的とするシステムが実用となるためには、これらの要素のどれひとつも欠かせないのです。このことは、我々のComputational Chemistryにも当てはまることです。たとえ優秀な分子力場法、分子軌道法のプログラムが有っても、データを入力する方法と出力結果を解釈する能力が無ければ、ただのブラック・ボックスでしかありません。現在開発しているシステムは、少数の計算機化学者のためのものではなく、一般の有機化学者のためのシステムです。いわゆる化学情報管理システムではなく、分子モデリング・システムの範疇に属するものと考えております。すなわち、入力として分子の3次元原子座標が必要で、これは一般の有機化学者にとって馴染みの薄いものです。先ずシステム開発の目標として、3次元構造インターフェイスの充実を掲げました。出来上がったシステムは、分子計算と計算結果の蓄積のためのデータベース管理を行うVAX 8600と、3次元構造入力と分子構造その他の情報の表示を行うPC-98シリーズより構成されています。ターミナルとしてパソコンを選んだのは、より多くの人にシステムを利用していただくことと、ローカルな処理では決して大型コンピュータに引けをとらないマイクロ・プロセッサの今後の発展に期待したからです。現在の水準でも3次元構造の入力とその表示・操作に関して言えば、ホスト経由でこれらの図形処理をするより、ターミナルだけで実行した方がずっと効果的で速いのです。ちなみに、パソコン側のプログラムは全てBASICで書いてありますが、充分待てる速度で絵を返してくれます。本システムでは、各種の分子計算入力ファイルの転送、バッチ計算の起動、計算結果の返送以外は、全てパソコンで行っています。もし、ホストが他の機種に変更されても存続でき、また、ホストから遠い人でもターミナルさえあれば入力ファイルを記録したフロッピー・ディスクのやりとりで計算結果が手元に届くのです。結果的には、パソコンを利用したことでより良いユーザー環境を創り得たと考えています。

知識工学とは、あまり関係ないことを述べてしまいましたが、今後このシステムを発展させるためには、この技術は必要なものと考えています。分子計算の結果はどんどん蓄積されていきます。それらのデータの間には、分子骨格が同じであるとか、異性体であるとかという関連が必ず有るはずなのに、コンピュータの世界では何の関連付けも成されていません。ここにパターン・マッチングを最も得意とする人工知能言語を利用して、過去の計算結果を利用できるようなシステムに仕上げたいと夢見ております。他のグループの者が人工知能の勉強をしていますので、環境は良いと思います。

蛋白質工学研究所は、昨年来化学関連5社（協和醗酵、武田薬品、東亜燃料、東レ及び三菱化成）が設立準備を進め、本年4月23日に設立されたばかりの共同研究所であります。所要研究資金約170億円の70%を基盤技術研究促進センターから出資を受け、残り30%を民間企業から負担することになっております。民間企業としては、上記5社以外に近く9社が参画することになっております。

研究者は当面約50名を予定しており、事務、企画を含め60数名の世帯になります。研究所は、大阪・吹田市に約7000㎡の建物を建てる計画を進めており、昭和63年春に完成の予定であります。

蛋白質工学（Protein Engineering）は、蛋白質の構造と機能の關係の解析を基に、新しい機能の蛋白質を設計し、さらにそれを製造する所までの一貫した総合技術であり、蛋白質工学研究所の主要目的は、このための基盤技術を確立することにあります。

このためには、各種の分野の専門家と、高度な測定機器・試作機器・コンピュータ等が必要であります。即ち、分子生物学、生化学、薬学、有機化学、物理化学、理論化学、生物物理、物理、情報科学、計算科学、などの専門家とX線単結晶回折装置、核磁気共鳴装置、電子顕微鏡、DNAシーケンサー、アミノ酸シーケンサー、DNA合成装置、ペプチド合成装置、培養装置、分離・精製用機器等の他、汎用コンピュータ、スーパーコンピュータ、3次元グラフィックスと、各種ソフトウェア（構造解析・推定、分子力学、分子動力学、分子表示、操作、遺伝情報解析等）及び各種データベース（DNA配列データ、アミノ酸配列データ、蛋白質立体構造データ、蛋白質機能・活性データ等）が必要となります。

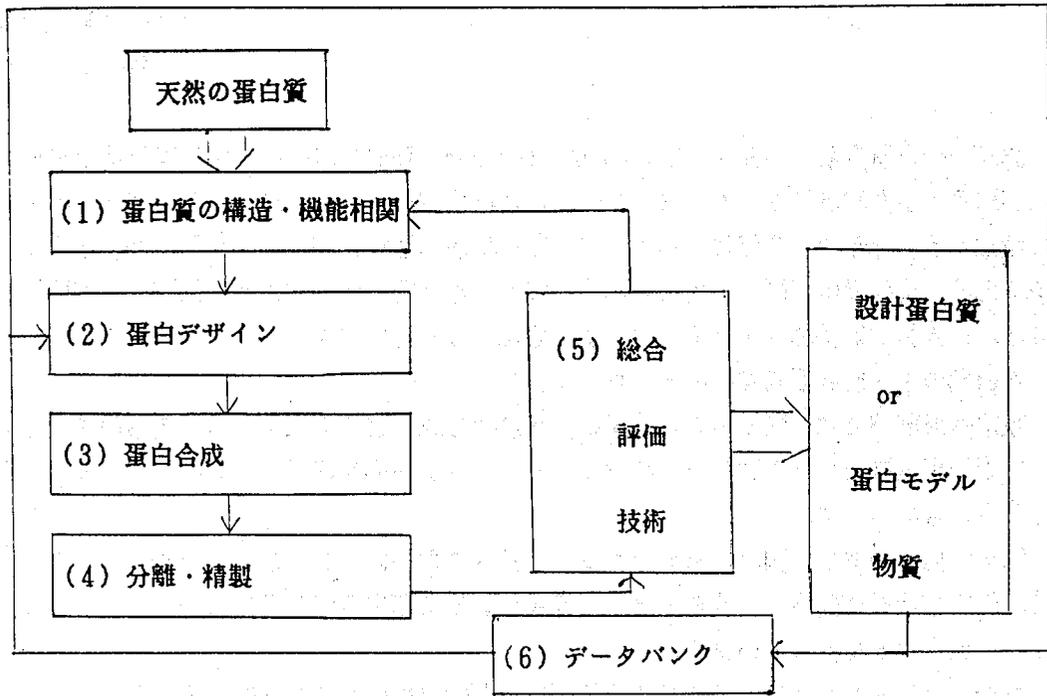
これらすべてを一社一機関でそろえることは大変難しいことなので、ここに産官学協力した形でこの研究所が設立されたわけであり、ここには参加各社からのスタッフと、学会からの専門家が集まって、研究を始めることにしております。又、必要に応じ、内外の研究機関・企業との共同研究や委託研究も進めます。

当研究所には、池原所長の下、以下の5つの研究部と研究企画部が置かれております。

- 第1研究部 蛋白質の構造
- 第2研究部 蛋白質の設計
- 第3研究部 蛋白質の合成
- 第4研究部 分離・精製、機能評価
- 第5研究部 コンピュータ、データベース

研究の進め方は、上記各研究部の基盤技術研究と並行して、いくつかのモデル蛋白質によるプロジェクトチーム研究も想定しております。即ち、蛋白質工学の応用分野として、化学工業、エレクトロニクス、生理活性物質、食糧などが想定されているので、それらに見合う適切なモデル蛋白質を選び、下記体系図に沿い、各部門研究を総合して蛋白質デザインシステムの開発を進めることにしております。

研究開発の体系図



以上、簡単に当研究所の概要をご説明致しましたが、発足したばかりの当研究所の動きについて、すでに活発な研究を進めている欧米の各機関・大学・研究者から、大きな関心が寄せられています。当研究所としましては、蛋白質工学の面で、学問的にも産業的にも、国際的に役立つ成果を挙げることを大きな理想とし、国際的に開かれた研究所になりたいと念願しております。

情報化学分野の皆様の大いなる関心とご協力・ご指導を今後是非よろしくお願い申し上げます。

三菱総合研究所紹介

社会情報システム部

美馬 勝

㈱三菱総合研究所 (MRI ; Mitsubishi Research Institute) は、(株)三菱経済研究所、三菱原子力工業(株)計算センターおよび(株)技術経済情報センターが統合する形で1970年5月に設立され、今年で17年目を迎えます。組織は政治経済部門、社会開発部門、社会システム部門、情報通信部門、応用工学部門、情報処理部門、サービス業務部門の7部門構成であり、人員は総勢約570名(内、研究職は460名)です。

各部門の主な研究活動は次のとおりです。

政治経済部門では、国や地方自治体の政策理念形成に資する調査研究、企業戦略立案のための新事業探索などの調査およびバイオテクノロジーや新素材等の先端技術の動向分析などを行っています。

社会開発部門では、国際技術協力プロジェクトの調査研究およびコンサルティングを始め、都市や地域に関連した開発・環境整備等に関する調査や消費環境の分析、マーケティング調査などを行っています。

社会システム部門では、社会基盤施設や交通・物流に関する諸問題の調査研究や防災・宇宙・航空・防衛等を対象とした情報化プロジェクトの開発などを行っています。さらに、社会・公共・企業システムなどへの応用を目的とした人工知能を始めとする高度情報処理技術の研究開発を併せて行っています。

情報通信部門では、人工知能分野における幅広い技術調査や方法論の研究、知識システム構築支援ツールの開発を行っています。また、LANやVANに代表されるコンピュータ・ネットワークに関する開発も行っています。

応用工学部門では、原子力プラントの安全解析などの原子力工学分野の研究や構造解析・熱・流体解析などの工学系シミュレーションなどを行っており、診断システムなどのエキスパート・システムの当分野への応用も研究しています。

情報処理部門では、スーパー・コンピュータCRAY-1と超大型計算機 IBM3081を擁し、リモート・コンピューティング・サービスおよびこれに付帯するソフトウェア・サービスやベーシック・ソフトウェアの開発を行っています。

サービス業務部門では、MRI会会員各社に対する各種予測データの提供やNTIS、JAPAN/MARKなどのデータベースのオンライン提供サービスなどを行っています。

当研究所の活動概要は以上のとおりですが、以下で人工知能に関連する活動のいくつかを御紹介します。

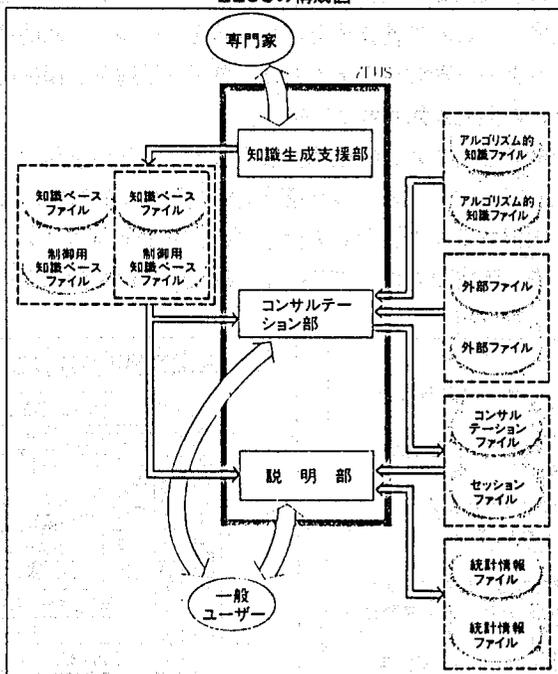
当研究所では、プロジェクト参加企業を広く一般から求め調査研究を実施するマルチクライアント方式に研究をしばしば実施いたしておりますが、昭和59年から60年にかけて「人工知能革命」と題して知識情報処理技術の全容調査と今後の動向分析を実施いたし

ました。本調査では、約250社の企業に御参加頂き、約1000頁に及ぶ報告書を作成いたしました。さらに、本調査の1つの応用としてエキスパート・システム構築支援ツール「ZEUS（ゼウス）」を開発しました。ZEUSは次図に示すように知識生成支援部、コンサルテーション部および説明部から成り立っています。ZEUSでは知識に確信因子を設けることで、曖昧な知識も取り扱えるように工夫されています。さらに、知識相互間の矛盾の検査も自動的に行います。

この他、自然言語処理システムの研究開発、逐次型推論マシンのOSの開発なども行っております。

今後、当研究所では知識情報処理技術を社会システムや各種分野における工学システムの問題解決のための有力な手段と位置づけ、その応用技術の研究を行って参る予定でございます。

ZEUSの構成図



CSK総合研究所

CSK総合研究所 (CRI : CSK Research Institute) は「コンピュータ科学と知識工学 (Computer Science and Knowledge engineering)」に関する応用技術開発を通じて社会に貢献することを目的に、昭和58年10月に設立された知識情報研究開発総合機構です。

コンピュータ関連分野における技術革新がますますテンポを速めている中で、CRIは近い将来重要な位置を占めると予想される人工知能 (AI : Artificial Intelligence) とその関連分野における基礎研究および応用技術開発を着実に実践しています。

AIの応用研究・開発においてはエキスパートシステムの構築法に関する研究、機械翻訳システムの開発、知的OA、知的HA、知的CAIシステムの研究などを行っています。また、AIの基礎研究としては、言語情報、生物情報などの研究に着手し、さらに知能機械、視覚情報、音声情報に関する基礎研究の着手についても現在検討しています。

私たちは、AIソフトウェア体系を図2のように考えています。まず、核となるものは知識ベースであり、これを記述するための言語としてLISPやPROLOGなどのAI言語があります。

さらにその上のレベルでは、大別して問題解決型のエキスパートシステムとパターン理解システムがあります。また現在では、これを基幹技術とする開発ツールや、知的通信、知的検索システムが考えられています。パターン理解システムでは、自然言語理解、画像認識など、より人間に近い機能を有したシステムの開発が急がれています。

CRIでは、AI言語の開発をはじめ、各種基幹技術および、その応用であるプロトタイプシステムの開発に重点的に取り組み、一歩先じた業務実績を挙げています。そして人工知能のひとつの究極的な目的である知能ロボット、さらに他方では、トップマネジメントのための意思決定支援システムを、近い将来、現実のものとするべく、積極的な研究開発を行っています。

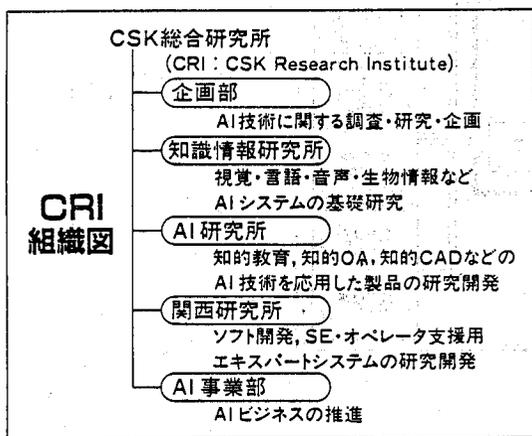


図1

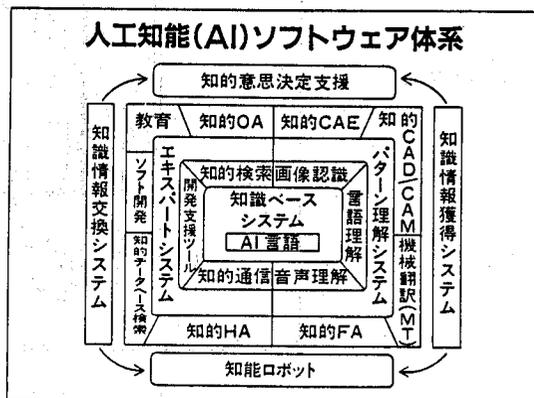


図2

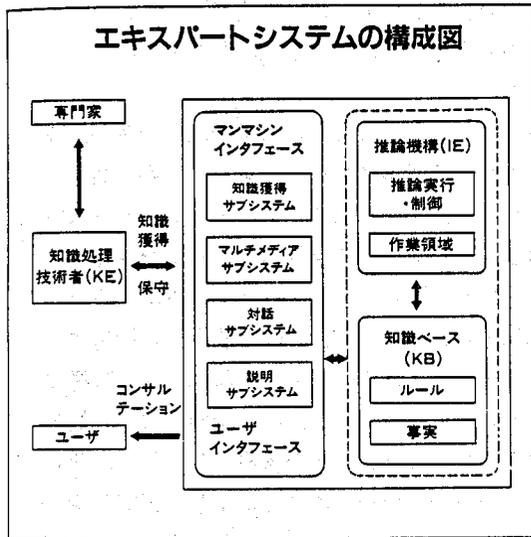


図 3

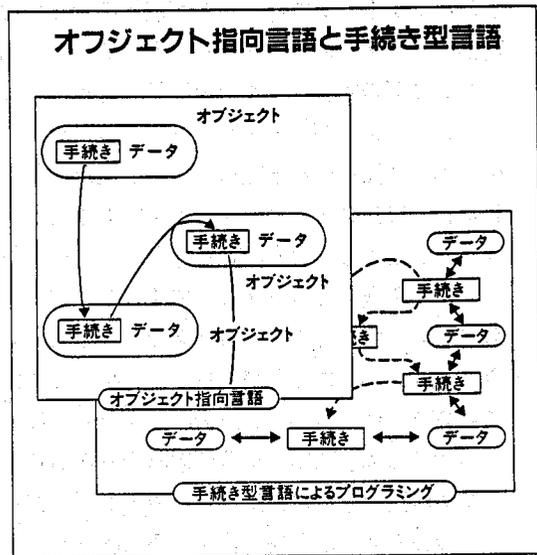


図 4

◎エキスパートシステム

1950年代に始まった人工知能研究は、まず定理の証明やチェスのプログラムなど、限られた範囲の問題探索や推論方法に研究の焦点が当てられていました。これらに行き詰まりを感じていた研究者は、専門家の知識を活用するエキスパートシステムを考え出しました。

エキスパートシステムとは、専門家のもつ経験的知識をコンピュータ上に移植し、その知識を操作するための推論能力を組み合わせることにより、複雑な問題を解決するシステムのことをいいます。

エキスパートシステムは、これまでに、医学、工学、化学、数学、地質学などの分野を中心に発展してきました。これらのエキスパートシステムを構築する際に問題となるのは、種々雑多で未整理の専門家の知識をどのようにコンピュータ上で表現し、どのように利用するかということです。

エキスパートシステムでは、知識ベースが重要な役割を果たします。この知識ベースの構築法も、知識の整理や表現によって、さまざまな方法がありますが、その中のひとつにオブジェクト指向という新しい考え方があります。従来のプログラムは、操作手順を克明に記述し、手順を制御する“手続き型”といわれていました。それに対して、オブジェクト指向は、手続きとデータを組み合わせ、オブジェクトというひとつの単位で扱うソフトウェア開発手法です。

このオブジェクト指向では、手順変更がすべてひとつのオブジェクト内で完結し、他に影響が波及しないので、各オブジェクト間の独立性が保て、必要に応じて手順変更が容易に行なえます。

これはソフトウェア部品化の可能性を示しており、近い将来ソフトウェアの生産性を高めるには画期的なシステムとなるでしょう。CRIでは、この考え方を大幅に取り入れたエキスパートシステムの開発支援ツールの開発研究を行っております。

ここで、化学関係のエキスパートシステムについて触れてみましょう。人工知能の研究が推論中心から知識中心へと転換し始める契機となったものが、1965年にスタンフォード大学で開始されたDENDRALプロジェクトであります。このDENDRALはエキスパートシステムと呼ばれる最初のもので、DENDRALは分子式のみ知られている化合物の分子構造を質量スペクトルから推定するシステムです。このプロジェクトは更に核磁気共鳴スペクトルも取込み現在も続けられています。そもそもDENDRALは1964年にJoshua Lederbergが開発した構造式決定アルゴリズムにもとづくもので、与えられた分子式を満足するすべての非環状構造式を列挙するものでした。しかし、完全な解を出すのに多大な時間と費用を要するため、専門家の経験的知識の活用により時間と費用の短縮をはかることを目指してプロジェクトが編成されました。そして幾多の試行錯誤の結果、知識表現をプロダクションルールに統一することにより、理解しやすく、変更や拡張が容易に行なえる柔軟なシステムが実現できるようになりました。また、推論制御も化学者の経験則を組み込み、早期にありそうもない部分構造を消去することで探索範囲を狭めることができました。しかし、質量スペクトルの理論はいまだ不完全なため、経験豊かな化学者にも不確実な解裂規制を定式化させようとするのは困難な作業でした。そこで、このような規制を、構造が正確に知られている化合物集合を用いて自動生成するMETA-DENDRALが開発されました。

その後、種々の化学関連のエキスパートシステムが開発されていますが、最近では、分子設計のための人工知能システムが話題を集めています。

CRIでは、知的画像エディターを応用した、分子設計と分子グラフィックスについて検討中です。今後、人工知能は化学の世界でも一つのアプローチとして発展していくことでしょう。

野村総合研究所におけるA I 研究開発状況

野村総合研究所

システムコンサルティング部

A I システムコンサルティング室

室 長 中林 三平

1. A I 研究開発の体制

野村総合研究所におけるA I 研究開発は、外部からの委託研究開発を主な対象とする「鎌倉研究本部」内のシステムコンサルティング部A I システムコンサルティング室が中核となっていて行っている。システムコンサルティング部のオリエンテーションは、「情報システムのトータルコーディネーションとインテリジェント化」であり、A I システムコンサルティング室は、①既存システムのインテリジェント化と、②新しい知的なシステムの開発を行うことを目的としている。

A I システムコンサルティング室が、組織として設立されたのは昭和60年7月であり、まだ一年程度の歴史しか持たない。しかし、実際には昭和58年度頃から、研究所内の各部門でA I に関する調査研究が分散して行われていた。それを統合して研究効率を高め、より積極的に実際のシステム開発を推進しようという主旨で現在の体制が整えられた。しかし、いまでも図形・画像・音声などのパターン認識に関連する分野や、自然言語処理などについては、研究所内の「技術産業研究部」を中心として研究員が分散している。

その意味で、A I システムコンサルティング室が主として研究開発対象としているのは、人工知能技術の一部を構成する「知識処理」に関係する分野に当面のターゲットを絞っている。

2. 研究開発テーマの方向性

A I システムコンサルティング室が現在研究開発を行っているのは、基礎研究に該当する部分を除いて、すべてがエキスパートシステム、またはより広い概念である「知識ベースシステム」であり、現在は11のシステムを平行的に

開発している。これらの研究開発テーマは、民間企業からの委託によるものであり、非常にストレートに企業におけるAIの応用可能な分野を示すものであると考えている。

委託研究であるため、どのようなテーマでのシステム開発が進行しているかを公表することはできない。しかし、エキスパートシステムといえばすぐ事例に出される「病気の診断」や「故障診断」とは、領域としても、知識処理技法としても全く異なった分野のテーマが選択されている。ただし、診断システムとある程度対置されていわれる「経営意思決定支援システム」のように、対象が明確になっていないシステムでもない。完全に主流となっているのは、企業の中の「現場」で利用しうる類のシステムである。このときの「現場」とは、生産現場だけではなく、事務部門や販売部門も含んでいる。

開発中のシステムの過半数は、「プロトタイプ」とよばれるものであり、実用化に至る以前に、どの程度まで知的な振舞いを示すシステムが開発可能なのかを検証することが目的となっている。したがって、当面は「孤立した」システムの形態をとり、既存の情報システムとの接続やリアルタイムでのセンサー信号との接続などはまだ検討されていない。しかし、とくにリアルタイム性を重視したシステムについては強い要求が出ており、プロセス異常の発見・診断という分野で、非常に高速の推論を行いうるシステムの開発もスタートしている。

企業の中で、どのような分野にエキスパートシステムが利用できるかを実際のプロトタイプの形成を通じて検証してみようと言う動きは、61年度から62年度のあたりでピークを迎えるであろう。62年度の後半あたりからは、当初から実用化を狙ったシステムの開発が盛んになるという見通しをたてている。エキスパートシステムの実用化のために当然開発しなければならない技術は、次のようなものであり、当研究所の中でも継続的に研究が続けられている。

- ① 既存のシステム・データベースと密接な連携を取る。
- ② リアルタイム性の要求に応えられる。
- ③ 複数の知識源を制御しながら協調的な推論を行う。

3. 開発に携わる人材

知識ベースシステムの開発に際しては、KE（知識工学技術者）というものの存在が重要であるとよくいわれる。野村総合研究所ではKEとはどのような人材かを定義していないし、それに該当する人材育成方針を特別に取ってはいない。現在、当室で研究開発に携わっている研究員のバックグラウンドは、計算機工学・情報工学、機械系エンジニア、社会・経営工学の各分野が1/3程度づつを占めている。（そのうち半数程度が、AIの分野と学生の頃からまたは10年以上かかわりをもっていったものである）。

システムの開発に当たっては、これらの人材を組み合わせるチームを編成する。通常KEに要求されているスキルとは、非常に多様なものであり、問題の明確な解析・定義から、知識処理・管理の詳細な技法の適用までである。これらを、それぞれプロフェッショナル・レベルで身につけるのは至難の技であり、チームにより対応するのがもっとも現実的なアプローチである。

また、システム開発に当たっては、研究開発委託者側とのかなり密接な共同作業を行うケースが極めて多い。これは、将来、システムが保守・拡張可能であることを保証するために、強く要求されることである。この共同作業を通じて、我々の蓄積してきたシステム構築ノウハウが委託者側に徐々に移転することを願っている。

4. AIの発展方向

AIの技術、とくにエキスパートシステムに代表されるような知識処理技術は、現在ではやや特殊なものとみられているような気がする。しかし、実際のシステムを構築してみると、これは決して特殊なものではなく、これまでの情報処理技術の限界を一回り拡張したものであるということが実感できる。極端な言い方をすれば、新しい高級言語ができたという感覚に近い。このような立場からすれば、AI技術の応用の広がり単に一時期のブーム過ぎ去るのではないかという見方はとりえない。むしろ、基礎的な技術要素として、様々に応用形態を変化させながら、深く浸透していく性格を持っているといえる。

関 連 行 事

第 9 回 情報化学討論会

主催 日本化学会情報化学部会

共催 日本化学会・日本分析化学会・日本薬学会・日本農芸化学会

連 J 会場 (名古屋工業大学鶴舞キャンパス共通講義棟) で一般講演

連 K 会場 (名古屋工業大学鶴舞キャンパス共通講義棟) でポスターセッション

[10月17日(金)、18日(土)、19日(日)]

講演時間 25分 (講演18分, 討論7分)

10月17日 午前

8:50開会

一般講演

座長 今井 賢 (9:00~10:15)

2連J01 三次元分子構造間の共通幾何パターンの自動認識に関する研究 (豊橋技科大)

○高橋由雅・前田重徳・佐々木慎一

2連J02 モンテカルロ法による分子容, 分子表面積の計算 (藤沢薬品) 加藤一孝・大

前敏宏 (富士通) ○湯田浩太郎

2連J03 オクタノール/水分配係数自動推算システム (CPAC) の開発 (富士写真

フィルム) ○宮川正美・花井荘輔

座長 花井荘輔 (10:15~11:55)

2連J04 薬物-受容体間の疎水相関等の評価; 均一性素面モデル (キッセイ薬品) 赤

羽健司 (キッセイコムテック) ○永野泰夫 (北里大薬) 梅山秀明

2連J05 蛋白質モデリングプログラム-ALPHA-の構築 (旭化成) 戸潤一孔

2連J06 ペプチド, 蛋白質のエキSPORTシステムの開発 (蛋白質研究奨励会) ○瀬戸保彦・野崎佳子・榊原俊平

2連J07 Laboratory Computer Network System
の試み (I) (福井大工) 古村徹・市橋直樹・早水満喜雄・寺川佳代子・大海康弘・滝が浦良成・水野和子・○神藤洋爾

(11:55~13:00) 休憩

10月17日 午後

ポスターセッション

(13:00~17:00)

ただし、ポスターの説明は、Aグループが13:00~15:00、Bグループが15:00~17:00に行ってください。

Aグループ (13:00~15:00)

2連K01 分子力場パラメータの最適化 (第5報) アミド用パラメータの決定 (化技研)
○田辺和俊・都築誠二 (北大理) 大沢映二

2連K02 コバルト-59 NMRスペクトルデータのパーソナルコンピュータによるデータベース化 (電気通信大) 園分信英・○山崎昶・白木洋也・原嶋信明

2連K03 触媒データベースの検討 (化技研) ○桑原靖・浜田秀昭・金田一嘉昭・若林勝彦・伊藤建彦

2連K04 データファイルの変換を容易にするための一工夫 ○大崎健次 (東大理) 武田弘 (姫路工大) 安岡則武

2連K05 タンパク質解析システムの開発 (住友製薬) ○諸岡茂昭 (住友化学) 金岡昌治・上田明 (日本電気) 曾根田雄一・滝中徹 (北里大薬) 梅山秀明

2連K06 薬物-受容体理論に基づく薬物設計システムの開発 (キッセイ薬品) ○赤羽健

司・飯塚欣二（キッセイコムテック）永野泰夫（日本電気）横田彰男（日本電気ソフトウェア）柴田浄児（北里大薬）梅山秀明

2連K07 構造活性相関の為の部分構造記述子の自動生成（豊橋技科大）○中西弘幸・高橋由雅・佐々木慎一

2連K08 分子構造の概念的クラスタリングシステムCLUSMOL (U.C.Santa Cruz) ○岡田孝・W. Todd Wipke

2連K09 グラフィック作画入力構造図に基づく3次元座標の自動生成（豊橋技科大）○吉田文隆・高橋由雅・佐々木慎一

2連K10 パーソナルコンピュータによるProtein Data Bankの図示システムの開発（姫路工大）○中野英彦・三軒齊

2連K11 マイクロコンピュータシステム上での大容量MSDB操作の高速化—MSDOS上でのBASIC言語による場合—（電総研）六車裕孝・前田浩五郎

Bグループ（15:00~17:00）

2連K12 拡張SPIRESの開発【II】データ入力の実際と化学構造式データベースへの登録（豊橋技科大）○奥山徹・山浦一友・阿部英次・佐々木慎一

2連K13 自動構造推定システムCHEMICSの最近のスペクトル解析（豊橋技科大）○船津公人・太田好人・江口晃史・須々田寛・Carlos A. Del Carpio・佐々木慎一

2連K14 分子軌道、電子密度の図形表示システム（中京大）○秦野甯世（愛知工大）秦野和郎（分子研計セ）柏木浩

2連K15 水分子集団による非電解質溶質の分子認識（京大工・分子研）○中西浩一郎（分子研）田中秀樹・長嶋雲兵

2連K16 格子空間における最小規模分子構造設計の応用（学習院大計セ）○今井賢（学習院大理）菅忠義（群馬大教育）飯塚健

2連K17 4結合3次元ネットワーク上の置換分配(3)実在3次元フレームワーク上での置換分配(群馬大工)○佐藤満雄・山口慶和

2連K18 プロダクションルールによる触媒設計のための知識表現(愛知工大)○鬼頭繁治(名大工)服部忠・村上雄一

2連K19 コンピュータグラフィックスによる塩化ナトリウム構造結晶のエッチピットの構造表示(東工大総合理工)山崎陽太郎

2連K20 Laboratory Computer Network Systemの試み(Ⅱ)(福井大工)古村徹・市橋直樹・早水満喜男・寺川佳代子・○大海康弘・滝が浦良成・水野和子・神藤洋爾

2連K21 TASMACシステムにおけるNMRの機能及び特長(阪大産研)○高井嘉雄・山田等・福田房子・田中高紀・沢田正実・花房昭静

10月18日 午前

一般講演

座長 宮下芳勝 (9:00~10:15)

3連J01 マイクロコンピュータによる分子設計用システムMMHSの開発(群馬大教養)中田吉郎

3連J02 分子設計システム拡張のためのインターフェースプログラムの開発。第1報MM2'のTRIBBLEへの組込みを例として。(味の素中研)○石島知恵子・渡辺信弘(日本DEC)笠原由美子(大鵬薬品)多田幸雄(臨床研)鈴木勇(北大理)大沢映二(臨床研)神沼二真

3連J03 分子設計支援用データベース管理システムの開発と適用-三次元構造データの管理-(三井東圧化学)岡野清久・○三戸邦郎・小田研悟

座長 山崎昶 (10:15~11:55)

3連J04 分子設計のための人工知能システムANALOGSの試作(第3報) (東京農工大) 藤井良彦・川原淳次・○安川民男(東大理) 岡崎廉治

3連J05 化合物設計システムにおける要求解析(国際科学振興財団) ○中山堯(筑波大) 藤原譲

3連J06 赤外分光データ解析エキスパートシステムの開発(愛知工大) ○鬼頭繁治(日本分光) 金内芙美子(名大工) 服部忠・村上雄一

3連J07 パターン認識を用いた¹³C-NMRスペクトルデータベースによる定性分析の試み(日立計測) 橋本正雄・○田中保子(日立那珂) 服部忠鉄

(11:55~13:00) 休憩

10月18日 午後

座長 阿部英次 (13:00~14:00)

特別講演 人工知能とその動向(東京電機大) 上野春樹

一般講演

座長 船津公人 (14:00~15:15)

3連J08 液晶分子設計支援システム・システム概要と知識の表現方法(東芝総研) 前田真理子

3連J09 パーソナルコンピュータ制御による金属錯化合物の合成の試み(電気通信大) 國分信英・山崎昶・○白木洋也

3連J10 虚遷移構造の三節および四節部分グラフト有機反応の新しい記述子(富士写真フイルム) 藤田眞作

(15:15~15:35) 休憩

座長 岡田孝 (15:35~16:50)

3連J11 C₃植物における光呼吸のシミュレーション(大阪府立大農) 和田野晃・富永光則・三浦一夫・横田明穂・北岡正三郎

3連J12 阪大産研材料解析総合スーパーミニコンピューターシステム”TASMAC”の構築(阪大産研)○沢田正実・高井嘉雄・山田等・福田房子・田中高紀・石丸寿保・三角荘一・花房昭静

3連J13 化合物名から構造式の自動発生の試み(東京理科大理工)鈴木隆弘・○増子和典・下井田宏雄(電総研)前田浩五郎

10月19(日) 午前

一般講演

座長 工藤喜弘 (9:00~10:15)

4連J01 計算機立体化学(3) Axial Chirality 及び Planer Chirality の処理(東工大資源研)内野正弘

4連J02 Generic化学グラフ間の意味関係とネットワーク化(U.C.Santa Cruz)○岡田孝・W.Todd Wipke

座長 大沢映二 (10:15~11:55)

4連J03 ポリセコドデカヘドランからドデカヘドランが生成する可能性の検討(群馬大教育)○飯塚健(北大理)大沢映二(学習院大計セ)今井賢(学習院大理)田中伸英

4連J04 化技研スペクトル・データベース(SDBS)のトータルシステムについて(化技研)○山本修・染野和雄・和佐田宣英・早水紀久子・田辺和俊・田村禎夫・柳沢勝・平石次郎

4連J05 マイクロコンピュータによるプロトンNMRデータの蓄積と検索(国立衛生試験所)○叶多謙蔵(三菱レイヨン)片桐禪

4連J06 スペクトルデータベース作製用チャートリーダーの開発(住友化学)吉田元二・近石一弘・重永均・○増井秀行(日本電気)横田彰男

4連J07 パソコンによる情報化学教育用ネットワークシステム(都立大教養)○生田茂・石川甲子男(東芝)長谷川孝行・下谷誠

(11:55~13:00) 休憩

10月19日 午後

座長 岩村 徹 (13:00~14:00)

特別講演 タンパク質の立体構造と分子設計 (姫路工大) 安岡則武

一般講演

座長 内野正弘 (14:00~15:15)

4連J08 「化審法既存化学物質ハンドブック」の高分子表現の解析 (山形大工) 工藤喜弘

4連J09 モレキュラーメカニクスのパラメータ最適化プログラムの作成 (東大工・北大理) ○宮島隆・平野恒夫・大沢映二

4連J10 分子軌道大規模計算の現状 (分子研計セ) ○柏木浩・長嶋雲兵・山本茂義 (名大理) 斎藤稔

懇親会 10月18日(土) 17時30分から第一浩養園 (電話741-0211、会場から徒歩5分) で、第14回構造活性相関シンポジウムと合同で行います。会費4000円 (予定) は当日受付でお支払い下さい。

参加登録方法 日本化学会第53秋季年会への参加登録をお願いします。

連絡先 440 豊橋市天伯町字雲雀ヶ丘1-1 豊橋技術科学大学 佐々木慎一 (電話(0532) 47-0111)

第14回構造活性相関シンポジウム

共催 日本化学会・日本農芸化学会・日本薬学会・日本農薬学会・構造活性相関懇話会
講演時間25分（講演18分、討論7分）

3連H会場（名古屋工業大学共通講義棟）〔10月18日（土）、19日（日）〕

10月18日 午前

座長 寺田 弘（9:00～10:15）

3連H01 ガスクロマトグラフィーによる絶対エントロピーの推算（阪大薬）○村上
亨・藤井志保・高木達也・佐々木喜男

3連H02 置換基エントロピー定数 σ_s^* と立体置換基数 E_s との比較（近大薬）○川木
秀子（阪大薬）小野道也・高木達也・佐々木喜男

3連H03 置換基エントロピー定数 σ_s^* と van der Waals体積 V_w 及び STERIMOL パラメ
ータとの比較（阪大薬）○小野道也・高木達也・佐々木喜男（近大薬）川木秀子

座長 山川真透（10:15～11:55）

3連H04 ジアジンの分配係数の解析（その2） 多置換ピラジン分配係数に及ぼす置
換基効果（神戸女薬大）○山上知佐子・高尾梢雄（京大農）藤田稔夫

3連H05 オルソ効果の解析による立体置換基数の決定と応用（京大農化）○外松朋
子・藤田稔夫

3連H06 アミノ酸及びペプチドの疎水性と構造との関係（京大農化）○赤松美紀・藤
田稔夫

3連H07 Hill 反応阻害活性を示すS-トリアジンおよびアニリド類の定量的構造活性
相関解析（京大農化）○清水 良・岩村 俣・岡谷純子・光武賢一郎・藤田稔夫

10月18日 午後

座長 阿部英次（13:00～14:00）

特別講演 I 人工知能とその動向（東京電機大）上野晴樹

座長 吉本昌文（14:00～15:15）

3連H08 オキシムエーテル型昆虫幼若ホルモン活性物質のデザインと定量的構造活性
相関解析（京大農化）○丹羽 淳・岩村 俣・中川好秋・藤田稔夫

3連H09 フェノキシアルキルアミン誘導体の構造活性相関（北陸製薬中研）○見谷一
也・鈴木利広・森川宏二・岩永裕氏・越中栄一・加藤日出夫・伊藤安夫（京大農化）
藤田稔夫

3 連 H10 脳血管拡張作用を有するベンジルピペラジン誘導体の構造活性相関 (鐘紡薬品研) ○大高 博・塚本悟郎

座長 岩村 俣 (15:35 ~ 16:50)

3 連 H11 各種ニトロソ尿素誘導体の構造・抗 瘍活性相関とその作用機作について (国立衛試) ○宮原美知子・神谷庄造

3 連 H12 N-phenylcarbamate 誘導体における構造活性相関 - Benzimidazole 系殺菌剤耐性の灰色カビ病菌に対する抗菌活性について (住化宝塚総研) ○高橋淳也・中村成子・野口裕志・高山千代蔵・加藤寿郎・嶋下克三

3 連 H13 N-ベンジルブタンアミド系化合物の殺菌および除草活性における定量的構造活性相関 (住化宝塚総研) ○桐野 修・高山千代蔵・井上 悟

10月19日 午前

座長 高山千代蔵 (9:00 ~ 10:40)

4 連 H01 パターン認識によるアミノ酸の構造 - 味質相関 (豊橋技科大) ○宮下芳勝・勝見広幸・角 一雄・佐々木慎一

4 連 H02 抗キユウリベと病活性を有する N-methyl-3-置換 benzanilide 誘導体の定量的構造活性相関 (ケイ・アイ研究所) ○田丸雅敏・伊東茂寿 (クミアイ化学) 藤森邦彦・小嶋芳幸 (豊橋技科大) 高橋由雅・佐々木慎一

4 連 H03 写真用化合物の構造活性相関: 4- (1-ピラゾリル) - 5-ピラズロン類の構造変化と感度との関係 (富士写真フィルム足柄研) ○市嶋靖司・山田耕三郎・御林慶司

4 連 H04 分子の動的構造と活性発現の相関 (徳島大薬) ○篠原康雄・小池晴彦・寺田弘 (徳島文理大薬) 平良全栄

座長 高橋由雅 (10:40 ~ 11:55)

4 連 H05 CLUSMOL による抗生物質の構造活性相関 (U.C. Santa Cruz) ○岡田 孝・W. Todd Wipke

4 連 H06 エラスターゼ基質のコンフォメーション解析と構造活性相関 (キリンビール) ○野水基義・岩城孝則・丸山浩一郎・稲垣好昌・浅野克彦 (京大農化) 藤田稔夫・赤松美紀 (臨床研) 鈴木 勇・神沼二真

4 連 H07 Lead化合物検索(1) (富士通) ○湯田浩太郎

10月19日 午後

座長 西岡孝明 (13:00 ~ 14:00)

特別講演II タンパク質の立体構造と分子設計 (姫路工大) 安岡則武

座長 梅山秀明 (14:00 ~ 15:15)

4連H08 タンパク質のアミノ酸配列と機能、立体構造の相関に基づいたドラッグデザインの可能性について (京大化研) ○西岡孝明・小田順一

4連H09 プロスタサイクリン及び誘導体の立体配座解析 (三共化研) ○宮本秀一・栗原英志・吉本昌文・小島孝一

4連H10 薬物-受容体相互作用の構造活性相関パラメータの開発: ジヒドロ葉酸還元酵素系における分子軌道分布の相関インデックス (北里大薬) ○久保寺英夫・梅山秀明

座長 板井昭子 (15:35 ~ 17:15)

4連H11 格子場における相関を利用したレセプタマッピングと構造活性相関への応用 (北里大薬) 梅沢洋二○小松克一郎・久保寺英夫・梅山秀明

4連H12 発がんプロモーターの構造活性相関 (東大薬) ○板井昭子・加藤祐一・富岡伸夫・遠藤泰之・首藤絢一

4連H13 分子動力学と構造活性相関 (1) (興羽化学技術情報開発室) ○中馬寛

4連H14 分子動力学と構造活性相関 (2) (興羽化学技術情報開発室) ○中馬寛

懇親会 10月18日午後 5時30分から第1 浩養園 (シンポジウム会場より徒歩5分) で第9回情報化学討論会と合同で行ないます。会費 4,000円 (予定) は当日受付でお支払い下さい。参加登録方法日本化学会第53回秋季年会への参加登録をお願いします。

連絡先 〒440 豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1 豊橋技術科学大学 佐々木慎一 (電話 0532-47-0111 (内) 202)

WORLD CONGRESS III OF CHEMICAL ENGINEERING

KEIO PLAZA HOTEL,
TOKYO, JAPAN

SEPT.21(SUN)-25(THUR), 1986

SPONSORED BY: THE ASIAN PACIFIC CONFEDERATION OF CHEMICAL ENGINEERING
THE INTERAMERICAN CONFEDERATION OF CHEMICAL ENGINEERING
THE EUROPEAN FEDERATION OF CHEMICAL ENGINEERING
ORGANIZED BY: THE SOCIETY OF CHEMICAL ENGINEERS, JAPAN

- SESSION 1-a: Marketing
- SESSION 1-b: Manufacturing Productivity in the Chemical Industry
- SESSION 1-c: Management and Uncertainty Analysis
- SESSION 2-a: International Cooperation in the Field of Chemical Engineering
- SESSION 2-b: Technology Transfer
- SESSION 3 : Economic and Technological Outlook for Chemical Industry in the 1990s(I)
- SESSION 4-a: University Education, Continuing Education and In-House Training Programs(I)
- SESSION 4-b: The Impact of Computer Developments on Chemical engineering Education
- SESSION 5-a: New Material Processing (I)
- SESSION 5-b: Novel Processes in Chemical Industry (I)
- SESSION 5-c: Robotics in Chemical Industry
- SESSION 6-a: Energy Conservation and Analysis (I)
- SESSION 6-b: Coal and Oil Utilization (I)

SESSION 6-c: Renewable and Alternative Energy (II)

SESSION 6-d: Thermal Energy Storage (I)

SESSION 6-e: Topics in Nuclear Industry (I)

SESSION 6-f: Energy Efficient Chemical Processes (I)

SESSION 7-a: Physical Properties, Phase Equilibria and Thermodynamics (I)

SESSION 7-b: Rheology and Flow Fluids (I)

SESSION 7-c: Heat Transfer (I)

SESSION 7-d: Mass Transfer (I)

SESSION 8-a: Evaporation (I)

SESSION 8-b: Drying (I)

SESSION 8-c: Distillation (I)

SESSION 8-d: Gas Absorption (I)

SESSION 8-e: Extraction and Leaching (I)

SESSION 8-f: Adsorption and Ion Exchange (I)

SESSION 8-g: Crystallization (I)

SESSION 8-h: Powders and Aerosol Properties and Powder Technology (I)

SESSION 8-i: Solid-Liquid Separation (I)

SESSION 8-j: Membrane Technology (I)

SESSION 8-k: Mixing and Agitation (I)

SESSION 8-l: Fluidization (I)

SESSION 9-a: Reaction Kinetics (I)

SESSION 9-b: Reactor Design (I)

SESSION 9-c: Catalysis (I)

SESSION 10-a: Bioengineering and Bioreactor Design (I)

SESSION 10-b: Food Processing

SESSION 10-c: Biomedical Engineering

SESSION 11-a: Materials and their Applications(I)

SESSION 11-b: Polymer Processing (I)

SESSION 12 : Computer Applications in Chemical Engineering(I)

1. Knowledge-Based Systems for Process Synthesis, *C. D. Mehta and L. T. Fan (Kansas State University, KS, U.S.A.)*
2. An Expert System for Optimization in Chemical Engineering, *S. Stoyanov, J. Tellalyan and R. Pavlova (Higher Institute of Chemical Technology, Sofia, Bulgaria)*
3. A Knowledge Engineering Approach to Oxygenation Reactions-- Production Rules for Singlet Oxygen Reactions, *K. Yamaguchi, Y. Ikeda, H. Fukuji and T. Fueno (Osaka University, Osaka, Japan)*
4. Distillation Control System Synthesis by Expert System, *K. Niida and T. Umeda (Chiyoda Chemical Engineering & Construction Co., Ltd., Yokohama, Japan)*
5. A Knowledge-Based Consultation System for Designing Distillation Process, *S. Ohe (Tokai University, Hiratsuka, Japan)*
6. Expert System Based Fault Diagnoses in Fluid Catalytic Cracking Processes, *D. Q. Qian and Y. Z. Lu (Zhejiang University, Hangzhou, China)*
7. A Consultant System for the Operation at the Emergency of the Chemical Plant, *H. Matsuyama, H. Kayano and K. Tano (Kyushu University, Fukuoka, Japan)*

SESSION 13 : Environmental Chemical Engineering (I)

SESSION 14 : Safety in Chemical Plants (I)

* 部会会員管理事務の一本化について *
* * * * *
* 従来、日本化学会会員管理とは別に行なっていました部会の会員管理を、今秋より一本化 *
* 致します。 *
* これに伴い、昭和62年分の部会費請求は、本年11月初旬、日本化学会会費請求と一緒に行 *
* ないますので、予めご了承下さい。 *
* なお、会費自動引落しを申し込まれている方は、部会費も含めて引落されることになりま *
* す。 *

NEWSLETTER

Division of Chemical Information and Computer Science
The Chemical Society of Japan

日本化学会
情報化学部会

Vol. 4
No. 5

(September 1986)



目 次

海外動向

- 192 nd ACS National Meeting 1
Second Symposium on Chemical Information 11

国際会議

- Scientific Computing and Automation 13
Automated Reasoning in Chemistry 14
International Conference on Graph Theory and
Topology in Chemistry 15

文献紹介

- Journal of Chemical Information and Computer Sciences 17
Computers & Chemistry (Vol. 10, No. 2) 17
Journal of Chemical Education 18

最近のニュースから

- Future ACS Meetings 20
Journal of Mathematical Chemistry 発刊についてのニュース 22

関連行事 23

企画案内 24

法人部会員リスト 25

192ND ACS NATIONAL MEETING

ANAHEIM, CALIFORNIA

SEPT. 7-12, 1986

DIVISION OF COMPUTERS IN CHEMISTRY

Tuesday Afternoon

Tenth Anniversary of the Division of Computers in Chemistry:
Symposium on the History of Computing In Chemistry--III Numerical
Applications

1. History of Computational Quantum Chemistry, *H.F.Schaefer*
2. Evolution of Monte Carlo and Molecular Dynamics Calculations,
B.J.Alder
3. Computational Chemical Dynamics, *D.G.Truhlar*
4. Molecular Mechanics 1930-86, *N.A.Allinger*
5. History of Computers in Crystallography, *W.R.Busing*
6. Digital Computers in Analytical Chemistry, *T.L.Isenhour, J.C.
Marshall*

Wednesday Morning

7. Optimization Algorithms for HPLC/NMR, *D.A.Laude, Jr., C.L.Wilkins*
8. Algorithms for Interpretation of GC/FTIR/MS Data, *J.R.Cooper,
R.S.Brown, C.L.Wilkins, I.C.Bowater*
9. Cornell Analysis of Guggenheim Treated Data, *R. Bartsatt*
10. Computer Application in Clinical Research, *G.P.Shragg*

Wednesday Afternoon

General

11. Generation of Molecular Structures from Spectral Inferences
by Reduction-A New Method for Computer-Assisted Structure Elu-
cidation, *B.D.Christie, M.E.Munk*
12. CONCORD: Rapid Generation of High Quality Approximate 3-Dimen-
sional Molecular Coordinates, *A. Rushinko III, J.M.Skell, R.
Balducci, R.S.Pearlman*
13. Molecular Structure Analysis: Quantitation of "Idealized"
Symmetry, *S.F.Watkins*
14. Chemical Structure Searching on the IBM-PC from a 5 1/4" Floppy
Disk, *S. Gould*

15. Searching with Data Translated from PC Plot Files, *S. Gould*
16. Computation of Boiling Points of O-Heterocyclic Compounds, *M.A. AbuEighth, M.A. Makhyoun*
17. FFTUTOR-A Real-Time Look at Fourier Transforms, *M.D. Johnston, JR.*
18. Implementing a Coupled Contaminant Transport Model on the Intel iPSC/d6 Hypercube Computer, *J.B. Drake, V.S. Tripathi, G.T. Yeh*
19. Proper Scaling Improves the Levenbert-Marquardt Method Employed in Sulfur Plant Simulation, *Z. Saleem, D.H. Chen*
20. Pilot Plant Inventory and Purchase Requisitions on a Micro-computer Network, *J.A. Hofmann, Jr., E.R. Fluck, E.J. Watson, T.R. Brunner*

DIVISION OF THE HISTORY OF CHEMISTRY と共催

Tenth Anniversary of COMP Division:
Symposium on the History of Computing In Chemistry,
cosponsored with Division of Computers in Chemistry

1. ACS Computer Secretariat: Functions and History, *D. Edelson, R.J. Marcus*
2. Federal Funding for Computing in Chemistry, *E.F. Hayes*
3. History of the Quantum Chemistry Program Exchange (QCPE), *R.W. Counts*
4. NRCC-Long Gestation and Short Life, *P. Lykos*
5. Impact of Computers on Chemical Literature, *W.V. Metanomski*
6. Molecular Graphics Since 1964, *R. Langridge*
7. Evolution of the Chemical Database, *J.D. Dill, J.G. Nourse*
8. Elucidating Organic Chemicals with Computers, *C.A. Shelley*
9. Synthesis Planning: the Computer's Role, *W.T. Wipke*
10. History of Computers in Instruction, *S.S. Smith*

DIVISION OF SMALL CHEMICAL BUSINESS と共催

1. Data Acquisition and Analyses Software in Third-Generation PCs, *M. Goldstein*
2. PC Graphics: from Data Analysis to Presentations, *G. Ouichi*
3. Scientific Document Preparation Using Personal and Mainframe Computers, *J.W. Root*
4. Sales Lead Management, *D.D. Ritson*
5. Mazer Chemicals Software Solutions, *J.A. Lambert*
6. Financial Management Applications with LOTUS I, II, III, *F. Shipley*
7. Data Processing Decisions of a Small Chemical Company, *F. Mattes III*

DIVISION OF CHEMICAL EDUCATION と共催

Symposium on Computer-Assisted Instruction in Chemistry

1. CHEMCIL, MOLDISP, AND SCRIPTWRITER: Three Software Tools for Incorporation of 3D Molecular Graphics into CAI for Medical Chemistry, *M.B.Boiger*
2. ChemSmart: a Compound/Reaction Database, *S.Gould*
3. Chemistry Authoring System and Interactive Testing (CASIT): Customized CAI Software, *S.S.Zimmerman*
4. Effective, Inexpensive Laboratory Computing: SERAPHIM Laboratory Modules, *J.W.Moore, P.P.Miles, K.Hart, am, P.Barker, J.K. Estell, M.Rasmussen*
5. Computer vs. the Student: Who is in Control?, *R.Cornelius, D.Cabrol, C.Cachet*
6. Chemistry on a Spreadsheet, *J.Van Houten*
7. CAI in Crystallography and Structural Chemistry, *S.F.Watkins, F.R.Fronczek*

COMPUTER SECRETARIAT PROGRAM と共催

Thursday, September 11, 1986

Chemists Workstations

Applications of Personal Computers in Chemical Research

1. The Chemist's Workstation, *R.E.Dessy*
2. An IBM PC Based Robotics System for the Laboratory, *P.Barrett, B.J.Mcgrattan*
3. Molecular Modeling in the Personal Computer Environment, *W.E. Brugger*
4. Applications of the Chemist's Personal Software Series in the Chemist's Workstation, *D.L.del Rey*
5. Defining the Chemist's Workstation at Eastman Kodak, *S.M.Newmann*
6. The Personal Computer and the Mainframe, *R.L.Swann*
7. An Electronic Notebook for Chemists, *J.Figuera*
8. Comparison of Micro-Based Chemical Structure Management Software for Chemists, *D.E.Meyer*

DIVISION OF CHEMICAL INFORMATION

1. END USER TRAINING AND SEARCH STATION FOR FACULTY AT HUMBOLDT STATE UNIVERSITY. *Sharon S. Chadwick*, Library, Humboldt State University, Arcata, CA 95521.

IN ORDER TO FACILITATE BIBLIOGRAPHIC RESEARCH, LIBRARY BEGAN OFFERING A COURSE FOR FACULTY AND USERS. THE COURSE IS TEAM TAUGHT BY FOUR ONLINE SEARCHERS. THE ORGANIZATION OF THE COURSE AND MICROCOMPUTER SEARCH STATION WILL BE DISCUSSED.

2. CHEMICAL GRAPHICS—BRINGING CHEMISTS INTO THE PICTURE. *Trisha M. Johns, G.D. Searle & Co., 4711 Searle Parkway, Skokie, IL 60077.*

NOW WE HAVE GOOD CHEMICAL STRUCTURE GRAPHICS SYSTEMS AND INEXPENSIVE GRAPHICS TERMINALS. THE COMPUTER BREAKTHROUGH FOR CHEMISTS CAME WITH MACCS, SYNLIB, AND MACINTOSH.

3. A CD-ROM APPLICATION IN OCCUPATIONAL HEALTH AND SAFETY. *Roger L. Cockerline, Irwin, A. Rodin, Robert Whiting, Canadian Centre for Occupational Health and Safety, 250 Main Street East, Hamilton, Ontario L8N 1H6, Canada.*

ON-LINE FILE OF MATERIAL SAFETY DATA SHEETS HAS BEEN FORMATTED ON CD ROM.

4. AN ONLINE, INTERACTIVE SYSTEM TO TRACE, INVENTORY, AND STORE DATA ON RESEARCH AND COMMERCIAL CHEMICALS AT THE PHILIP MORRIS RESEARCH CENTER, *Charity E. McDonald, Research and Development Department, Philip Morris USA, P.O. Box 26583, Richmond, VA 23261.*

TRACK IS AN ONLINE, INTERACTIVE CHEMICAL INFORMATION SYSTEM WHICH RESIDES ON DECsystem-2060. THE OBJECTIVES OF TRACK ARE TO BE ABLE TO DETERMINE TYPES AND QUANTITIES OF LABORATORY CHEMICALS THAT HAVE POTENTIAL HAZARDS.

5. A COMPARISON OF AVAILABLE MICROCOMPUTER BIBLIOGRAPHIC SEARCHING SOFTWARE. *Judith M. Hushon and Thomas J. Conry, Bolt Beranek & Newman, 1300 N. 17th Street, Arlington, VA 22209.*

SCI-MATE, IN-SERACH, SEARCH-MASTER, PC/NET LINK AND MICRO-CSIN ARE EVALUATE.

6. CRITICAL ISSUES IN MICROCOMPUTER GATEWAY DESIGN: THE MICRO-CSIN EXPERIENCE, *Thomas J. Conry and Judith M. Hushon, Bolt Beranek & Newman, 1300 N. 17th Street, Arlington, VA 22209.*

MICROCOMPUTER GATEWAY TECHNOLOGY HAS BEEN DISCUSSED.

7. RECRUITING CHEMISTS FOR AN ABSTRACTING AND INFORMATION SERVICE. J.T. Dickman, G.O. Platau, Chemical Abstracts Service, P.O. Box 3012, Columbus, OH 43210.

FOUR PRINCIPAL APPROACHES WHICH CAS FOLLOWS IN RECRUITING HAVE BEEN DESCRIBED.

8. DEVELOPMENT OF A TOPOLOGICAL-TO-FRAGMENTATION CONVERSION PROGRAM. Michael L. Langdon, Kathleen E. Shenton, Peter Norton, Edgar A. Ferns, Derwent Publications, 128 Theobalds Road, London WC1X 8RP, Great Britain.

DERWENT PUBLICATION HAS CREATED A TOPOLOGICAL-TO-FRAGMENTATION CONVERSION PROGRAM FOR PRODUCING FRAGMENTATION CODE SEARCH STRATEGIES FROM A GRAPHICAL STRUCTURE INPUT.

9. INORGANIC CHEMICAL STRUCTURE SEARCHING, Peter F. Rusch, Ph.D., Dialog Information Services, Inc., 3460 Hillview Avenue, Palo Alto, CA 94304.

COMPUTER BASED SEARCHES OF INORGANIC COMPOUNDS, POLYMERS AND THEIR ASSOCIATE STEREOCHEMISTRY CAN BE ACHIEVED USING TEXT SEARCH METHODS.

10. STEREOISOMER REPRESENTATION IN STRUCTURE DATABASES. Jean P. Gay, Michel Petitjean, Telesystems-Questel, 83-85, Boulevard Vincent Auriol, 75013 Paris, France.

THE DARC STRUCTURE SEARCH SYSTEM HAS THE CAPABILITY OF STORING AND SEARCHING STEREOCHEMISTRY USING CONNECTION TABLES.

11. THE CAS REGISTRY SYSTEM: IMPROVED TREATMENT OF POLYMERS, BIOLOGICAL MACROMOLECULES AND STEREOCHEMISTRY, William Fisanick, Patton M. Giles, and Karen A. Sanderson, Chemical Abstracts Service, P.O. Box 3012, Columbus, OH 43210.

A COMPLETE REVIEW OF ALL ASPECTS OF THE CAS REGISTRY SYSTEM IS BEING UNDERTAKEN IN ORDER TO DETERMINE WHERE CHANGES SHOULD BE MADE TO PROVIDE THE BASIS FOR GROWTH.

12. WHY CHEMISTS NEED THREE-DIMENSIONAL REPRESENTATIONS OF CHEMICAL STRUCTURES. Deborah A. Dunn, Chemical Design Ltd., Inc., Suite 120, 200 Route 17 South, Mahwah, NJ 07430, and E. Keith Davies, Clive E. Briant, Chemical Design Ltd., Unit 12, 7 West Way, Oxford OX2 OJB, U.K.

COMPUTER AIDED MOLECULAR MODELING AS A RESEARCH TOOL AND THE NEED FOR THREE -DIMENSIONAL REPRESENTATIONS OF STRUCTURES WILL BE DISCUSSED.

13. INTRODUCTION TO THE SYMPOSIUM ON GENERIC STRUCTURE SEARCHING, *John M. Barnard*. Barnard Chemical Information Ltd., 43 Nethergreen Road, Sheffield S11 7EH, United Kingdom.

AN OVERVIEW IS GIVEN OF RESEARCH ON GENERIC STRUCTURE STORAGE AND RETRIEVAL.

14. CHEMICAL ABSTRACTS SERVICE MARKUSH (GENERIC) STRUCTURE SYSTEM: I. STRUCTURE REPRESENTATION AND SEARCH CAPABILITIES. *W. Fisanick*, Chemical Abstracts Service, P.O. Box 3012, Columbus, OH 43210.

CAS IS DEVELOPPING A TOPOLOGICALLY-BASED SYSTEM FOR THE STORAGE AND RETRIEVAL OF MARKUSH STRUCTURES.

15. HANDLING MARKUSH FORMULAE IN PATENTS WITH THE DARC PMS SOFTWARE. *Jean-Claude Roussel*, Peter Norton, Kathleen E. Shenton, Catherine Roesch. Telesystemes DARC, 83-85 Boulevard Vincent Auriol, 75013 Paris, France.

TELESYSTEMES IS DEVELOPPING A NEW SYSTEM FOR MARKUSH FORMULAE BASED ON A CONTRACT WITH DERWENT AND FRENCH PATENT OFFICE. A FORMULA IS DESCRIBED BY A CONNECTION TABLE IN WHICH EACH GROUP ARE SEPARATELY GIVEN.

16. DEVELOPMENT OF THE DERWENT MARKUSH GRAPHICS DATABASE FOR PATENTS, *Edgar A. Ferns, Kathleen E. Shenton, Peter Norton, Michael L. Langdon*. Derwent Publications, 128 Theobalds Road, London WC1X 8RP, Great Britain.

WE HAVE ARRIVED AT PRAGMATIC SOLUTIONS TO PROBLEMS OF DATABASES COMPRISING MARKUSH STRUCTURES, BY INTRODUCING SUPERATOM CONCEPTS.

17. GENERATION OF THE GREMAS CODE FROM GRAPHICAL INPUT OF GENERIC STRUCTURES. *A.G. Kolb, G. Stiegler*. IDC Internationale Dokumentationsgesellschaft für Chemie mbH, Otto-Volger Strasse 19, 6231 Sulzbach (Taunus), Federal Republic of Germany.

LYNCH'S GENSA(L(GRAPHICAL INPUT SYSTEM FOR GENERIC STRUCTURES) WILL BE APPLIED AT IDC FOR GRAPHICAL INPUT OF GENERICS, FOLLOWED BY MACHINE-GENERATIO OF GREMAS-CODE.

18. **REDUCED CHEMICAL GRAPHS, AND THEIR APPLICATION IN GENERIC CHEMICAL STRUCTURE**, W. Dethlefsen, G.M. Downs, V.J. Gillet, M.F. Lynch, P. Venkataram, J.V. Wood. Department of Information Studies, University of Sheffield, Western Bank, Sheffield S10 2TN, United Kingdom.

CONCEPT OF REDUCED GRAPH HAS BEEN APPLIED TO GENERIC STRUCTURE.

19. **USE OF REACTION DATABASES TO SUPPORT ORGANIC SYNTHESIS PROGRAMS**, P.E. Blower, Jr., Chemical Abstracts Service, P.O. Box 3012, Columbus, OH 43210.

COMING CAS REACTIONS DATABASE MAY BE USED IN THE PROCESS OF PREPARING KNOWLEDGE BASES NEEDED BY SYNTHESIS PROGRAMS.

20. **ORAC: AN INTELLIGENT DATABASE SYSTEM FOR INDEXING AND RETRIEVAL OF REACTION DATA**, A.P. Johnson, C. Marshall, A.P.F. Cook, K.M. Higgins and G.A. Hopkinson, Department of Organic Chemistry, University of Leeds, Leeds LS2 9JT, England.

THE ORAC SYSTEM STORES KEYWORDS OF VARIOUS TYPES, REACTION CONDITIONS, YIELDS, STRUCTURAL INFORMATION ON PRODUCTS AND REACTANTS, AND THE EXACT ATOM-TO-ATOM CORRESPONDENCES IN GOING FROM REACTANTS TO PRODUCTS.

21. **THE PLANNING OF SYNTHESSES WITH THE AID OF SYNLIB**. M. Bersohn, Department of Chemistry, University of Toronto, Toronto, Canada M5S 1A1.

THE USERS WOULD NOT WANT TO ATTEMPT ANY SYNTHESIS IN THE FUTURE WITHOUT FIRST CONSULTING SYNLIB. THERE WERE NO REACTIONS RETRIEVED FOR WHICH UNACCEPTABLE YIELDS WERE REPORTED.

22. **THE CURRENT LITERATURE FILE (CLF): A DATABASE OF RECENT CHEMICAL REACTIONS FOR USE WITH REACCS™**, M. Gall, W. Thaisrivongs, J. Torrado and M. Weinschelbaum, The Upjohn Company, Kalamazoo, MI 49001, and MDL, 2132 Farallon Drive, San Leandro, CA 94577.

THE FIRST RELEASE OF CLF HAS BEEN COMPLETED. WHILE THE DATABASE CONTAINS REACTIONS FROM DOZENS OF JOURNAL COVERING A 35 YEARS PERIOD, OVER 90 % OF REACTIONS WERE ORIGINALLY PUBLISHED DURING THE PERIOD 1983-1985.

- 23. INNOVATIVE APPLICATIONS OF REACCS IN SYNTHESIS PLANNING.** *W. Todd Wipke, G. Grethe, T. Mook, J. Nourse, D. Grier, Molecular Design Ltd., 2132 Farallon Drive, San Leandro, CA 94577.*

WE WILL DESCRIBE HOW REACCS ALLOWS CHEMIST FULL ACCESS TO THE RESOURCE TO SOLVE SYNTHESIS PROBLEMS AND HOW REACCS CAN ASSIST THE CHEMIST IN DISCOVERING NEW RELATIONSHIPS.

- 24. BIOSYNTHESIS—METABOLIC PATHWAYS DATABASE,** *S. Barcza, L.A. Kelly, C.D. Lenz, Sandoz Research Institute, Route 10, East Hanover, NJ 07936.*

A PROTOTYPE BIOSYNTHESIS—METABOLIC PATHWAYS DATABASE WAS DESIGNED EMPLOYING THE MACCS. THE DATABASE, CONTAINING (SUB)STRUCTURE-SEARCHABLE STEREOSTRUCTURES, WAS IMPLEMENTED BY LINKING REGISTRY NUMBERS OF PRODUCTS WITH SUBSTRATES, COFACTORS, BY-PRODUCTS, ETC.

- 25. IMAGINARY TRANSITION STRUCTURES (ITS). UNITARY REPRESENTATION OF ORGANIC REACTIONS.** *Shinsaku Fujita, Research Laboratories, Ashigara, Fuji Photo Film Co., Ltd., Minami-Ashigara, Kanagawa, Japan 250-01.*

THE ITS OF A REACTION IS AN EXTENDED STRUCTURE FORMULA IN WHICH REACTANTS ARE SUPERPOSED TOPOLOGICALLY UPON PRODUCTS. IN THIS SYSTEM, RETRIEVAL OF AN ORGANIC REACTION IS REPLACED BY SUBSTRUCTURE-SEARCH OF ITS'S.

- 26. COMBINING CHEMICAL STRUCTURES WITH DATA AND TEXT ON A MICROCOMPUTER,** *William G. Town, Hampden Data Services Ltd, Hampden Cottage, Abingdon Road, Clifton Hampton, Abingdon, Oxon, England OX14 3EG.*

THE PERSONAL CHEMICAL INFORMATION SYSTEM WILL BE DISCUSSED.

- 27. DESIGN AND DEVELOPMENT OF AN INTERACTIVE CHEMICAL STRUCTURE EDITOR.** *J.R. McDaniel and A.E. Fein, Fein-Marquart Associates, Inc., 7215 York Road, Baltimore, MD 21212.*

AN INTERACTIVE, GRAPHICALLY ORIENTED MICROCOMPUTER-BASED STRUCTURE EDITOR WILL BE DESCRIBED.

- 28. MOLMOUSE, A UNIVERSAL INPUT PROGRAM FOR CHEMICAL STRUCTURES.** *Christa Ditschke, Jean-Pierre Lentz and Clemens Jochum, Bellstein-Institut, Varrentrappstr. 40-42, D-6000 Frankfurt 90, West Germany.*

TO BUILD THE STRUCTURE FILE FROM THE BEILSTEIN-HANDBOOK AND BEILSTEIN-ABSTRACT, MORE THAN 4 MILLION CHEMICAL STRUCTURES HAVE TO BE ENTERED MANUALLY. THE MICROCOMPUTER BASED GRAPHICS STRUCTURE INPUT PROGRAM MOLMOUSE HAS BEEN DEVELOPED.

29. SANDRA: STRUCTURE GRAPH IN / POINTERS TO BEILSTEIN OUT. *Alexander Lawson, Beilstein-Institute, Varrentrappstr. 40-42, D-6000 Frankfurt 90, West Germany.*

SANDRA WAS DESIGNED TO REVOLUTIONIZE ACCESS TO BEILSTEIN. THE PROGRAM INCORPORATES AN AUTOMATIC ALGORITHM BASED ON THE BEILSTEIN SYSTEM AND DELIVERS POINTERS TO THE HANDBOOK FROM A GRAPHIC INPUT.

30. THE NCI DRUG INFORMATION SYSTEM. A SYSTEM WHICH RELIES HEAVILY ON GRAPHICS. *G.W.A. Milne, Landow Bldg., Room 5A04, NIH, Bethesda, MD 20892.*

THE NCI DRUG INFORMATION SYSTEM PROVIDES INTERACTIVE ACCESS TO ALL THE DATA THAT HAVE BEEN ACCUMULATED DURING THE 30 YEARS OF THE NCI ANTITUMOR SCREENING PROGRAM. HALF A MILLION COMPOUNDS CONTAINED AND THE SIZE IS APPROACHING 4 BILLION BYTES.

31. COMPUTER GRAPHICS AT THE ACS. *J.M. Sanderson and D.L. Dayton, Chemical Abstracts Service Columbus, OH 43210.*

THE COMPUTER SYSTEMS TO PROVIDE CHEMICAL STRUCTURES FOR ACS PUBLICATIONS AND FOR STN INTERNATIONAL VIA MESSENGER SOFTWARE ARE DESCRIBED. THE ACS IS ALSO INVOLVED WITH THE DEVELOPMENT OF COMPUTER GRAPHICS SOFTWARE TO AUTOMATE THE U.S. PATENT OFFICE AND TO LOAD A FILE OF GERMAN PATENTS ON STN INTERNATIONAL.

32. USE OF SDC ONLINE FILES FOR INSTRUCTION IN CHEMICAL INFORMATION AND END-USER TRAINING. *R.E. Buntrock, Amoco Corp., Amoco Research Center, Naperville, IL 60566.*

FILES LOADED ON SDC HAVE BEEN USED PRIMARILY. REASONS FOR THESE CHOICES PLUS EVOLUTION AND FUTURE OF THE PROGRAMS WILL BE DESCRIBED.

33. USE OF ORBIT SEARCHMASTER IN A RESEARCH INFORMATION DEPARTMENT. *M.K. Gall, L.M. Minkiewicz, Mobil R&D Corporation, Research Department, Paulsboro, NJ 08066.*

WE WILL DISCUSS THE USE OF ORBIT SEARCHMASTER SOFTWARE TO BUILD SCRIPT FOR SEARCHES.

34. THE END-USER IN ANALYTICAL CHEMISTRY: A PROBLEM SOLVED. *P. Read*, Royal Society of Chemistry, The University, Nottingham, NG7 2RD United Kingdom.

THE RSC'S DATABASE ANALYTICAL ABSTRACT ONLINE IS NOW AVAILABLE TO ASSIST IN LITERATURE SEARCHING. IT ENABLES SIMPLE SEARCH STRATEGIES TO RECOVER THE REQUIRED INFORMATION WITHOUT RETRIEVING UNWANTED MATERIAL.

35. CROSSFILE SEARCHING IN COMPLEMENTARY CHEMICAL DATABASES. *B.R. Weckend*, ORBIT Search Service, 2525 Colorado Avenue, Santa Monica, CA 90406.

LIMITING A SUBJECT SEARCH TO ONE OR TWO FAMILIAR DATABASE CAN RESULT IN SIGNIFICANT LOSS OF RELEVANT INFORMATION. THE ANALYSIS OF THE RESULTS OF A SAMPLE SEARCH PERFORMED IN SEVERAL DATABASES WILL BE A MODEL OF FOR FUTURE DATABASE CHOICE DECISIONS.

36. EVERY MAN FOR HIMSELF: END-USERS KNOW WHAT THEY WANT—BUT, DO THEY KNOW WHAT THEY'LL GET? *Steven F. Read*, Chemical Marketing Research Center, SRI International, 333 Ravenswood Ave., Menlo Park, CA 94025.

SRI'S CHEMICAL ECONOMICS HANDBOOK PROGRAM HAS RECENTLY COMPLETED A TWO YEAR PROJECT TO CONVERT ITS 6000 RECORD DATA BASE TO AN ONLINE-COMPATIBLE FULL TEXT FORMAT. THE ALREADY FLEXIBLE ORBIT INFORMATION RETRIEVAL SYSTEM WAS CUSTOMIZED TO ACCOMMODATE BOTH THE UNUSUAL REQUIREMENTS OF FULL TEXT CEH DATA AND OUR GOAL OF PAINLESS AND LOGICAL ACCESS.

37. NEW FEATURES ON ORBIT. *J.A. Chuck*, ORBIT Search Service, 2525 Colorado Avenue, Santa Monica, CA 90406.

A NUMBER OF NEW AND ENHANCED FEATURES ON ORBIT WILL BE DISCUSSED. NEW DATABASES (JAPIO, CLAIMS, ANALYTICAL ABSTRACT) WILL BE PRESENTED.

SECOND SYMPOSIUM ON CHEMICAL INFORMATION

LYON

NOVEMBER 13-14, 1986

THURSDAY NOVEMBER 13, 1986

OPENING SESSION.

First round-table.

USAGE OF INFORMATION RELATED TO PATENTS

President : Dr A. KOLB, I.D.C., FRANKFURT (RFA).

Rapporteur : C. DUTHEUIL, CNIC (France).

Introductory papers :

J.-P. GAY, Télé systèmes-Questel (France) and

K. SHENTON, Derwent Publications (U.K.)

"The processing of Markush formulae".

N. FARMER, C.A.S. (USA).

"C.A.S. patent information services : past, present and future".

M. MOUREAU and A. GIRARD, I.F.P. (France)

"Statistical analysis of patents".

U. SCHOCH-GRUBLER, BASF (RFA)

"Impact of patent law on documentation - Report on the PDG working group Impact".

M. GAUMONT, Rhône-Poulenc (France)

"The use of documentation by the patent specialist".

Second round-table.

SAFETY, TOXICITY - REGULATIONS AND STANDARDS

President : Pr. J.-M. ROUZIQUX, Edouard-Herriot Hospital (France).

Rapporteur : J. PERSOZ, UIC (France).

Introductory papers :

M. LAFOREST, INRS (France)

"Chemical safety forecasts".

M. GOVAERT-LEPICARD and M. MOSTIN, Centre Belge Anti-Poisons (Belgique)

"Emergency toxicological information : the needs and the possibilities to answer".

J.-C. AUBRUN, Rhône-Poulenc (France)

"The application of the toxicological data in the industry".

D. LAHEYNE, Elf-Aquitaine (France)

"Regulations concerning chemicals".

Third round-table.

FROM RAW INFORMATION TO REFINED INFORMATION

President : Dr A. HAYGARTH-JACKSON, I.C.I., Macclefield (U.K.).

Rapporteur : F. JAKOBIK, ATOCHEM (France).

Introductory papers :

H. MLODZICK, CIBA GEIGY (CH)

"Use of the microcomputer for online searching".

Ch. GRUZON, GUERBET (France)

"The information specialist role in a medium size company".

B. VANDEGINSTE, Catholic University of NIJMEGEN (Netherlands)

"Chemometrics for the extraction of information from large datasets".

J. MORIN, EUREQUIP (France)

"Information and management".

FRIDAY, NOVEMBER 14, 1986

The program for this second day is organized in such a way to leave time to attendees to visit the databanks producers and online vendors to have presentations and demonstrations. This is the reason why the 4th and the 5th round table will be held at the same time.

The last round table will be at 3:30 p.m. Several distinguished persons from France and foreign countries will take part in the debate. At the end, a general synthesis and conclusion of the symposium will be presented.

Fourth round-table.

BUSINESS INFORMATION CONCERNING CHEMISTRY

President : J. LUCAS, Director General of Informations Chimie (France).

Rapporteur : Ph. CLIMENT, DIXIT (France).

Introductory papers :

B. CARRÈRE, U.I.C. (France)

"Business information : Forecast or guess ?".

M.-F. MAZIÈRES, ATOCHEM (France)

"Business information databanks and their limits".

G.-E. VAILLANT, TGI (France)

"Provided information to small and medium size companies - What the ARIST offer".

Y. FUJIWARA, JICST (Japan)

"Chemical information produced and/or used in Japan".

Fifth round-table.

**COMPUTER ASSISTED SYNTHESIS,
CHEMICAL REACTIONS AND RELATIONAL STUDIES**

President : G. KAUFMANN, CNRS, Université of Strasbourg I (France).

Rapporteur : R. PICCHIOTTINO, NEIMAN (France).

Introductory papers :

J. BARNARD, Barnard Chemical Information Ltd (U.K.)

"Problems and solutions for retrieval of chemical reaction information".

S. NORTH, GLAXO (U.K.)

"Chemical reaction information : What are the user needs ?".

G. SICOURI, ITODYS (France)

"Use of chemical reaction databanks in computer assisted synthesis".

M. CHASTRETTE, University Claude-Bernard in Lyon (France)

"Multivariate analysis of data for the identification of structures and study of structure activity relationships".

なお、詳しいプログラムが化学情報協会にございますので、ご希望の方は、下記にお問い合わせ下さい。

化学情報協会 (113 文京区弥生2-4-16 学会センタービル 電話 03-816-3462)

SCIENTIFIC COMPUTING AND AUTOMATION
(EUROPE)

CONFERENCE (AND EXHIBITION)

RAI CONGRESS CENTRE,
AMSTERDAM, THE NETHERLANDS

13-15 MAY 1987

This will be Europe's first conference and exhibition specifically for computing and automation in the sciences.

Scientific Computing and Automation (Europe) will be the European counterpart to its successful sister meeting in the USA carrying the same name.

SCA Europe will be supported by a number of European societies, among the Royal Society of Chemistry, and will be held at the RAI Congress Centre in Amsterdam, between 13-15th May, 1987. A full scientific program will form the backbone of the meeting. The program will be set up by a distinguished scientific board under the chairmanship of Prof. D.L. Massart from the Vrije Universiteit of Brussels, Brussels, Belgium.

A number of workshops and short courses will also be run in conjunction with the conference.

SCA Europe will devote both its interdisciplinary and scientific parallel sessions to the latest advances in computing and automation in the scientific environment.

These include chemistry (pharmaceutical, analytical, clinical, synthesis), the life sciences (clinical, microbiological), engineering and technology (bio, materials, chemical) and physics (mainly applied geophysics).

Within the framework of these three specialist fields, the international scientific community will be able to share their experiences in:

Computing (Artificial Intelligence, expert systems, image analysis, Computer Aided Learning (CAL), pattern recognition, molecular graphics, databases, simulation and off-the-shelf software, etc.)

Automation (LIMS, networking, data acquisition, sensors, process control, etc.)

Robotics (Laboratory products)

CALL FOR PAPERS

All the plenary and disciplinary sessions will be chaired by specialists in their own field who will also sit on the scientific program committee and thus ensure the high quality of submitted papers. You are invited to send you abstracts to

Prof. D.L.Massart,
Vrije Universiteit of Brussels,
Laarbeeklaan 103,
B-1090 Brussels,
Belgium.

AUTOMATED REASONING IN CHEMISTRY (ARCH '87)

BUDAPEST, HUNGARY

27-29 MAY 1987

The Committee for Analytical Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences, The Computer Working Group of the Hungarian Chemical Society and The Institute of Isotopes is pleased to invite you to the conference "Arch '87 Automated Reasoning in Chemistry" to be organised in Budapest between 27-29 May 1987, in order to discuss recent trends and problems of the application of contemporary mathematical techniques in chemistry, especially in analytical chemistry.

The conference is now announced and papers are called for.

MAIN TOPICS

- Automated Structure Elucidation
- Expert Systems
- Handling of Chemical Structures
- Molecular Modelling
- Simulation
- Synthesis Planning

applying the methods of the

- automated reasoning
- applied logic
- combinatorics
- graph theory
- model and set theory
- problem solving
- topology

PARTICIPATION

If you are interested in participation so return the enclosed reply form not later than 30, September 1986. If you suggest to send this announcement to further colleagues please let us know as soon as possible. Second circular and application forms for participation and accommodation will be sent in January 1987.

CONTRIBUTIONS

Besides general reviews on selected fields, contributed papers are planned to be presented in three different forms:

-10-15 minute long oral presentations followed by a short discussion;

-posters;

-in the frame of panel discussions, where some selected papers would be reviewed by a discussion leader and discussed by the participants in more detail.

Arch '87 Conference
Institute of Isotopes
H-1525 Budapest
P.O.B. 77
Hungary

INTERNATIONAL CONFERENCE ON GRAPH THEORY AND TOPOLOGY IN CHEMISTRY

UNIV. OF GEORGIA,
ATHENS, GEORGIA, USA

MARCH 15-20, 1987

This Conference will be held at the Georgia Center for Continuing Education on the campus of the University of Georgia, Athens, Georgia, U.S.A., under the sponsorship of the U.S. Office of Naval Research. The purpose of this conference is the simulation of interactions between chemists and mathematicians. Through such interactions we hope to acquaint chemists with new methods in topology and graph theory and mathematicians with

problems of current chemical interest. Of particular interest is the use of graph-theoretical or topological models for the description of systems of chemical interest, including the prediction of the properties of materials having new or unusual properties.

All the conference activities will be at the Georgia Center for Continuing Education on the campus of the University of Georgia, Athens, Georgia, U.S.A.

Conference Schedule--Participants are expected to arrive in Athens on the evening of Sunday, March 15. Formal sessions will begin on Monday morning, March 16.

Application--Persons interested in participating in this conference should complete and return the attached application form by October 21, 1986. The Conference fee will be \$150.00 for each participant. This fee will include a barbecue on Wednesday night, March 17, as well as four luncheons during the days of the Conference. Further information concerning the arrangements will be sent to you upon receipt of the application form. The deadline for payment of the Conference fee is February 24, 1987.

Conference Presentations--All those wishing to present a paper at the Conference should submit an abstract of the paper to the Conference organizers by October 21, 1986. Participants will be advised whether their presentation should be in the form of a contributed paper (30 minutes) or a short communication (15 minutes). All participants are urged to use transparencies suitable for projection by an overhead projector.

Conference Volume--A book containing papers presented at this Conference will be published by Elsevier Scientific Publishing Company. Ordering information for this book will be provided at the Conference.

連絡先 Prof. R. Bruce King
International Conference on Graph Theory and
Topology In Chemistry
Department of Chemistry
The University of Georgia
Athens, Georgia, 30601
U.S.A.

文 献 紹 介

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1986年5月 第26卷第2号 发表题目、著者、頁

Scientific Communication Pathways: An overview and Introduction to a Symposium, *D. F. Zaye and W. V. Metanowski*, p.43

Primary Journals Today and Tomorrow, *D. H. Michael Bowen*, p.45

Scientometrics with Some Emphasis on Communication at Scientific Meetings and Through the "Invisible College", *W. S. Lyon*, p.47

Two Programs To Further Popular Literacy in Technology, *Carl F. Aten*, p.52

A Least-Squares Digital Filter for Repetitive Data Acquisition, *Scott L. Nickolaisen and Stephen E. Bialkowski*, p.57

Comparison of Manual and Online Searches of Chemical abstracts, *E. Akaho, A. Bandai and M. Fujii*, p.59

IDC Inorganic Chemicals Data Base. 2. Utilization of Chemical Abstracts Service Data Bases for the IDC Inorganic Chemistry Documentation System, *Fritz Ehrhardt and Horst Roschkowski*, p.63

Chemical Graphs. 43. FORTRAN IV Program for Computing the Numbers of General Cubic Graphs on p Vertices, *Alexandru T. Balaban, Romul Vancea, Ioan Motoc, and Stefan Holban*, p.72

Stereo Numbers, Cosets, and the Configuration Symmetry Group, *John W. Meleod*, p.77

ACS Committee on Nomenclature: Annual Report for 1985, *Kurt L. Loening*, p.83

Book Reviews

A Handbook of Computational Chemistry. By Tim Clark Reviewed by *John P. Lowe*, p.86

COMPUTERS & CHEMISTRY

1986年第10卷第2号 論文題目、著者、頁

Computer analysis to produce univocal reaction sets: Possible application to the analysis of complex mixtures, *J.L.Ayme, M. Arbelot and M. Chanon*, p.85

A simple way to calculate the axis of an α -helix, *Johan Åqvist*, p.97

Internal sort modules based on two-way merge algorithms, *C. F. Bunge and G. Cisneros*, p.101

Sorting large lists of small items: A module for scientifically oriented applications, *C. F. Bunge and G. Cisneros*, p.109

Bin sort module to order large list of small items: A module for scientifically oriented applications, *G. Cisneros, E. Poulain and C.F. Bunge*, p.135

A modular package for efficient I/O operations, *G. Cisneros and C.F. Bunge*, p.153

Recent improvements to FANTASIA, a target transformation factor analysis program, *P.K. Hopke and S. Dharmavaram*, p.163

1986年第10卷第3号 論文題目、著者、頁

Implementation of macromolecular mechanics program on a CYBER 205 supercomputer, *S.L. Gallion, R. M. Levy, P.K. Weiner and F. Hirata*, p.165

A spectral matching system for MS/MS data, *K.P. Cross and C.G. Enke*, p.175

Microcomputer based programs for the analysis and simulation of presteady state kinetics, *T. Brittain*, 183

Programmable microcomputer-controlled ramp generator for use in electrochemical experiments, *E. Roldán, M. Domínguez and D. González-Arjona*, p.187

High performance microcomputer molecular modelling, *D.N.J. White, J. Kelvin Tyler and M.R. Lindley*, p.193

Improved data processing for electroanalytical measurements, *K. Kalcher and C. Jorde*, p.201

Application Section

Computer graphics with lines of variable thickness, *P. Senn*, p.219

Calculation of NMR spectra of substituted benzenes using a microcomputer, *R. A. Newmark*, p.223

Ewald's method for calculating lattice sums in ionic crystals, *W. K. Winnett and C.P. Nash*, p.229

Comments on papers concerning computer enumeration permutation isomers, *H. Dolhaine, J.S. Garavelli and J.E. Leonard*, p.239

Journal of Chemical Education に掲載されたコンピュータ関連記事

アメリカ化学会の化学教育部会が発行しているこの雑誌には、Computer Series としてほぼ毎号コンピュータに関連した記事が掲載されています。

1985年1月号から12月号までの関連記事の目次を下記に示します。

Journal of Chemical Education. Volume 62 (1985) No.1~12

Computers and the High School Chemistry Teacher: Some Precepts for Their Use, *George Grehold*, p.236

Introducing Chemistry Undergraduate Students to Online Chemical Information Retrieval, *Yechezkel Wolman*, p.315

Computer Series, 59, p. 309

How Learning Theory Can Help Produce Better Software, *J. Dudley Herron*

CAPE: A Computer Program to Assist with Practical Assessment, *Peter M. May, Kevin Murray, and David R. Williams*

Computer Series, 60: Bits and Pieces, 23, p.410

edited by John W. Moore

A Science Fair Display of Chromatography of Inks, *G.L. Breneman and O.J. Parker*

Analytical Chemistry Program Set, *James K. Hardy*

Microcomputer-Assisted Drills in Organic Synthesis, *R. Barone, B. Ribero, B. Gilbert, and R. Meyer*

MOLPIX-A Program for Generating and Displaying Molecular Structures, *Milton D. Johnston, Jr.*

Chemical Arithmetic on a Pocket Computer, *Patrick L. Pollet*

Computer Series, 62: Bits and Pieces, 25, p.687

edited by John W. Moore

A FORTH-Language, Computer-Controlled Potentiometric Titration, *A.A. Verbeek*

Coulometric Titrations Using Computer-Interfaced Potentiometric Endpoint Detection, *Paul D. Greenspan, David E. Burchfield, and Hans Veening*

Interfacing a Scanning Infrared Spectrophotometer to a Microcomputer, *B.M. Mattson, T.R. Shepherd, and J.F. Solsky*

Demonstrations of Signal-to-Noise Enhancement: Digital Filtering, *L. Glasser*

Inexpensive apple II/Photometer Interfacing, *Thomas Russo*

Computer Series, 63:, p.791

edited by John W. Moore

One Run Kinetics-A Computer Program, *Richard T. O'Neill, Robert A. Lodder, and Steven M. Scheifers*

An Undergraduate Program on Computer Interfacing, *Robert J. Anderson and Paul H. Woodworth*

Computer Series, 64, p.866

edited by John W. Moore

Experiments in Software Data Handling, *Robert Q. Thompson*

Computer-Assisted Quantitative Infrared Conformational Analysis α, β -Unsaturated Ketones, *P. Tisnes and M. Perry*

edited by John W. Moore

A Microcomputer-Based System for Filing Test Questions and Assembling Examinations, *George Vogel*

Microcomputer Use in Practical and Simulated Experiments of Gamma Rays Scattering by Outer Shell Electrons, *D. Cabrol, G. Mallet, and T. Chauvet*

An Interactive, Screen-Oriented, General Linear Regression Program, *Bhairav D. Joshi*

Graphics Drill and Game Programs for Benzene Synthesis, *Patrick J. Flash*

最近のニュースから

FUTURE ACS MEETINGS

ACSのMeeting は次のような開催予定です。

Denver, April 5-10, 1987

5 copies of 150 words abstract (original on ACS Abstract Form) by Nov. 15, 1986. For General Papers only, 1 copy of draft 150-word abstract by Oct. 1, 1986; 5 copies of final abstract for accepted General Papers by Nov. 15, 1986.

General Papers. J.L.Witiak, Rohm & Haas Co., 727 Norristown Rd., Spring House, PA 19477, (215)641-7820

End-Users Speak: What End-Users Want, Like, and Dislike and How They Obtain Information. R.R.Duelstgen, Information Services, 3M, 201-2S-09 3M Center, St. Paul, MN 55144-1000, (612)733-5857

Data/Information Resource Management(DRM/IRM). M.K. Landsberg, Exxon Research & Engineering Co., PO Box 101, Florham Park, NJ 07932, (201)765-2856

Personal Computer Information Software and Communication Packages. L.R.Garson, American Chemical Society, 1155 Sixteenth St., N.W., Washington, D.C.20036, (202)872-4541

Laboratory Information Management: (Information Storage and Retrieval Aspects of Laboratory Automation.(Chair and speakers sought.)

New Orleans, August 30-September 4, 1987

5 copies of 150-word abstract (original on ACS abstract Form) by April 1, 1987. For General Papers only, 1 copy of draft 150-word abstract by March 1, 1987; 5 copies of final abstract for accepted General Papers by April 1, 1987.

General Papers. J.L.Witiak, Rohm & Haas Co., 727 Norristown Rd., Spring House, PA 19477, (215)614-7820

Methods for the Electronic Submission of Manuscripts for Publication. M. Brogan, American Chemical Society, PO Box 3330, Columbus, OH 43210, (614)421-3660

Ergonomics-Human Factors. L. Normore, Chemical Abstracts Service, PO Box 3012, Columbus, OH 43210, (614)421-3600

Chemical-Emergency Response. B. Vasta, National Library of Medicine, 8600 Rockville Pike, Bethesda, MD 20209, (301)496-1131

Selecting In-House Indexing and Retrieval Software. M.D. Rosenberg, Philip Morris Research Center, PO Box 26583, Richmond, VA 23261, (804)274-2000

Herman Skolnik Award Symposium. (Invited Papers Only) W.V. Metanomski, Chemical Abstracts Service. PO Box 3012, Columbus, OH 43210, (614)421-3631

Information Liability and Malpractice. (Chair and speakers sought)

Information Entrepreneurs. (Chair sought)

Noordwijkerhout, The Netherlands, (Leeuwenhorst Conference Center) May 30-June 4, 1987

"Chemical Structures-The International Language of Chemistry," An International Chemical Information Conference, cosponsored by the Division of Chemical Information, The Chemical Structure Association, and the Chemical Information Groups of the Royal Society of Chemistry and the German Chemical Society.

Structure Searching and End-Users: Training, Front-ends and Gateways, Indexing for End-Users, Structure Input and Retrieval Techniques, Ergonomics, Etc. D.K.Johnson, Exxon Research and Engineering Co., PO Box 101, Florham Park, NJ 07932, (201)765-3119

New Technology, Databases, Chemical Reactions, Etc. W.G.Town, Hampden Data Services Ltd., Hampden Cottage, Abingdon Rd., Clifton Hampden, Abingdon, Oxon, OX14 3EG, U.K., 1-011-44-86-730-7273

Toronto, June 5-11, 1988

5 copies of 150-word abstract (original on ACS Abstract Form) by Oct. 15, 1987. For General Papers only, 1 copy of draft 150-word abstract by Sept. 1, 1987; 5 copies of final abstract for accepted General Papers by Oct. 15, 1987.

General Papers. J.L.Witiak, Rohm & Haas Co., 727 Norristown Rd., Spring House, PA 19477, (215)641-7820

The Peer Review Process. D.H.M.Bowen, American Chemical Society, 1155 Sixteenth St., N.W., Washington, D.C.20036, (202)872-4600

A CODATA Symposium on Numerical Data. D.R.Lide, National Bureau of Standards, Gaithersburg, MD 20899, (301)921-2467 and G. Wood, Canada Institute for Scientific and Technical Information, National Research Council, Montreal, Rd., Ottawa, ON K1A 0S2, Canada, (613)993-1600

Management of Technical Reports: Content, Writing and Editing, Capture, Indexing, Storage, and Retrieval. D.K.Johnson, Exxon Research and Engineering Co., PO Box 101, Florham Park, NJ 07932, (201)765-3119

H. Skolnik Award Symposium. (Invited Papers Only) J.L.Witiak

Journal of Mathematical Chemistry 発刊についてのニュース

A new journal to be called the **Journal of Mathematical Chemistry** will commence publication in January, 1987. The publisher of the journal will be the Baltzer Publishing Company of Basel, Switzerland, and its editor will be Dr. D.H. Rouvray of the University of Georgia. The new journal will appear quarterly at the outset and then more frequently if there are sufficient numbers of contributions to warrant this. Each issue will comprise approximately 100 pages which will be devoted to contributions in the form of full papers, reviews, notes, and letters. Sample copies of the new journal will be available in January, 1987.

The first issue of the new journal will contain a review by Professor Sumners and full papers by Professors Balaban, Gutman, Hosoya, King, Ladik, Mezey, Randić, Trinajstić and (in some cases) their coworkers. The topics covered will include the topology of chemical knots, the energies of chemical tree graphs, the Wheland polynomial, the energies of polymer unit cells, chirality and permutation groups, and topological indices with low degeneracy.

Manuscripts for the new journal should be submitted to the Editor at the following address:

Dr. D.H. Rouvray
Chemistry Department
University of Georgia
Athens, Georgia 30602
United States of America

Contributions may be in the form of full papers, reviews, notes (i.e. up to one half a full paper), and letters (i.e. a maximum of six sides of double-spaced typing). At the moment, timely reviews are urgently sought for the new journal; it is anticipated that each issue will contain one review. All contributions will be reviewed by at least two referees before being accepted for publication.

What to publish? Any paper which contains a nontrivial application of mathematics to a problem of chemical interest. The journal is not suitable for the publication of more or less routine results obtained from (say) quantum-chemical calculations, as it is not intended to be a journal of computational chemistry. When to publish? The first two issues of the journal are now complete and are being processed for publication. To make the journal a success, however, contributions are going to be needed from everyone involved in the area of mathematical chemistry. Your contributions are therefore eagerly sought and should be sent NOW!

関 連 行 事

Ronald L. Wigington 博士講演会

科学・技術情報のための国際協力

アメリカ化学会前副専務理事 Wigington 博士が、去る4月15日付で3代目のケミカル・アブストラクツ・サービス (CAS) 所長に就任されました。

Wigington 博士は、CAS 研究開発部長時代に、著増する文献を処理するため、初めてケミカル・アブストラクツ (CA) 製作にコンピュータを導入し、約8カ年をかけて CAS システムを開発されました。

これによって、CA 編集に、CA 印刷版下作成などにコンピュータを多用して、現在の年間約45万件の文献が迅速に処理できるようになったほか、今日の CAS ONLINE の基礎が築かれました。

Wigington 博士は、コンピュータ並びに通信システムの専門家で、NBS (アメリカ合衆国商務省標準局) の標準物質データシステム諮問委員会委員長としても著名な方です。

今度の来日の機会に、下記により CA 製作のコンピュータ化の経緯を伺い、CAS の将来についての抱負を語って頂く予定です。

何卒ふるってご参加下さい。

日 時 昭和61年10月22日 (水) 15時から17時頃まで

場 所 社団法人 日本化学会講堂

(お茶の水駅徒歩5分: 電話03-292-6161)

聴 講 無料-通訳付

申込先 化学情報協会 (113 文京区弥生2-4-16 学会センタービル 電話 03-816-3462)

第21回 Chemical Abstracts 利用法講習会

Chemical Abstracts の効率的な使い方を、「実用ケミカル・アブストラクツの使い方」をテキストとして、実例を挙げながら指導いたします。

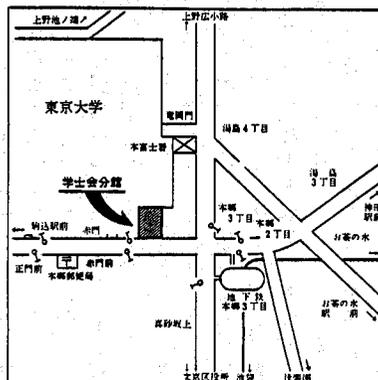
普段 Chemical Abstracts をご利用の方々や司書の方々に最適です。

日時：昭和61年11月28日(金) 10時～16時
場所：学士会東大分館（東大赤門際）
〒113 東京都文京区本郷7-3-1
電話 03(814)5541(代表)
交通・地下鉄(丸の内線)
本郷三丁目(徒歩5分)

・バス

国電お茶の水(お茶の水橋口)
——荒川土手・駒込・王子行
(赤門前下車)

学士会分館案内図



定員：20名

参加費：一般 21,000円(テキスト代を含む)

大学教職員、化学情報協会賛助会員 6,500円

化学情報協会維持会員(1名まで) 6,500円

化学情報協会正会員の学協会会員 14,000円

お申し込み：(社)化学情報協会 講習会係 (Tel. 03-816-3462)

(113 文京区弥生2-4-16 学会センタービル 電話 03-816-3462)

企画案内

当情報化学部会では、来年、化学をご専門にし、パソコンは初心者の方を対象とした、講習会の開催を検討中です。

詳細は追って部会ニュースレター等でお知らせ致します。

NEWSLETTER

日本化学会
情報化学部会

Division of Chemical Information and Computer Science
The Chemical Society of Japan

Vol. 4
No. 6

モレキュラーグラフィックス 特集号

(December 1986)

目 次

計算機化学とグラフィックス	佐々木 慎 一	1
特集：モレキュラーグラフィックス		
化学構造式(図)の入力から表示まで	阿 部 英 次	2
CGのハードウェアについて	田 中 伸 英	5
ベーシックソフトウェアパッケージについて	今 井 賢	7
モレキュラーグラフィックスのゆくえ	安 岡 則 武	9
タンパク質・核酸の分子グラフィックス		
我が国の憂うべき現状と展望	磯 晃二郎	12
パーソナルコンピュータによる分子グラフィックス	中 野 英 彦	14
化学関連パソコンCGソフト	上 山 治 貴	18
学会報告		
分子グラフィックスの組織会議— The Molecular Graphics Society —		
「分子の三次元構造と薬理活性」シンポジウム	中 村 春 木	20
開かれる！	板 井 昭 子	21
Gordon 研究会議「計算化学」に出席して	大 沢 映 二	23
「化学の設計における計算法」国際会議に出席して	田 辺 和 俊	27
第9回情報化学討論会をふりかえって	佐々木 慎 一	28
	船 津 公 人	
第14回構造活性相関シンポジウムを終えて	佐々木 慎 一	29
	高 橋 由 雅	
国際会議		
Chemical Structures : The International Language of Chemistry		
		30
企画案内		31

コンピュータの周辺機能として登場し発展してきたコンピュータグラフィックスはその利用の度合いを益々深め今やこれを欠いて計算機化学研究を継続しえないのではないかと思われるまでになった。

Q S A Rと分子グラフィックス

生理活性をもつ物質は生体内の作用部位でどんな挙動をとるのだろうか。それを模式的にはあっても眼でみることはできないか。コンピュータグラフィックスはこの要求に応えてくれる。X線構造解析で、活性物質のありえそうな構造・形態を求めておき、それが生体内での受入れ物質の作用部位とどのようなかかわり合いをもつか、またその活性物質の形態なるものを系統的に変えていったら作用部位との関係はどう変化するか。即ち眼で画像を追いながら、リガンドの構造を系統的に変化させてリガンドの反応にどのような振動がおきるかを解析し、その解析結果が酵素の活性部位の構造にどう対応するかを直接的に理解できるようにってきた。たとえば、馬尿酸エステルのパピインによる加水分解においてはQ S A R法による種々の考察にもとづき酵素-基質複合体の生成が芳香核置換基Yの疎水性に大きく依存しているとされている。Q S A R研究におけるこの種の研究は歴史的にも長いのでこの結論は十分にたしかなのであろうが、別の手法で傍証してもらえれば更に結構である。ここで分子グラフィックスが登場する。X線結晶解析で求められたパピイン分子内の原子の上に仮想的な小分子として馬尿酸エステルを置いて、コンピュータを使って酵素の座標上に溶媒接近表面を作ってみる。そうするとパピインの中で、チロシン、プロリン、トリプトファン、パリン、アラニン、スレオニン、フェニルアラニンで構成される部分にそれらの側鎖で作られる大きな疎水性の割れ目が観察されるのである。そして馬尿酸エステルの疎水性置換基Yはこの谷間の中にすっぽりとはまりこんでしまうことも眼で視ることができる。リガンドが酵素にとりかこまれる過程ではYは水との接触面を失い、水の溶媒和は完全にたちきられていることがわかる。

化学構造のグラフィックス表現

化学構造のグラフィックス表現は計算機化学の基本である。2次元構造図から3次元座標を発生させることにより人は立体構造図を眺めることができる。このとき使われる手法の一つは分子構造を球とばねから成る2次元力学モデルとして捉えそのひずみエネルギーを計算し、これの極小値によって3次元モデルへと立上げる方法である。2次元から3次元へ立上らせてもらった構造図はこれだけでは困る。座標情報を修正・変更して原子価角や原子間距離が変われば全体の形はどうなるか、或はコンホーメーションを変えたいときはどうしたらよいか。このようなことが座標値、結合角、結合距離、二面角を簡単な手続きで操作することによって可能となった。また3次元図を回転して眺めるためには任意の回転角を与えればそれでよい。ただエネルギーの極小値によって与えられる3次元構造は分子工学の諸手法を駆使してより高度、より精緻な表現を行なうための出発点にすぎないことは銘記しておくべきである。

構造式を自由に描画すればそのままの形で素早くしまいこむことができるのでグラフィックスは化合物辞書づくりに大きな貢献をした。各種化合物の構造と名前、性質、必要な属性を自分流に盛りこんだ化合物辞書は種々の場面で要求されるが特に分子設計システムにはなくてはならぬコンポーネントであり、グラフィックスが地味ではあるが貢献度高く用いられる一つの事例である。

化学グラフィックスはきわめて高級、精密なものが市販されている。それを買って使えばよいようなものであるが、自分の研究に必要なものは極力自分で作るという側面があってはじめて市販の高級品を使いこなすことが可能となる。また売っているものすべて自分の要求をみたせるものではないことに留意すべきである。(参考:佐々木慎一、科学、56, 617(1986))

化学構造式（図）の入力から表示まで

豊橋技術科学大学

阿部 英次

はじめに

化学構造式、特に有機化合物の構造式は化学者の共通言語として広く用いられている。しかし、化学ぎらいの人に共通しているのもまた「亀の甲が苦手」ということで、彼等にとっては〇〇〇の隠語と同様のものらしい。

さて、今回の特集が「モレキュラーグラフィックス」であり中心は当然構造式の表示ということになるが、ここではその裏方としての入力法と格納法すなわち化学構造式の表現法について少し古いところから述べて行きたい。

名称（慣用名、体系名）¹⁾

有機化合物の名称はその構造式とほぼ一対一に対応している。したがって構造式に代わるものとして名称が使えれば、文字入出力しか出来ないコンピュータシステムを使っている場合は好都合である。事実もし完全な体系的名称 (systematic nomenclature)^{*1}であればそれを構造式に変換することは比較的容易であろう。ところが厄介なことに慣用名という歴史を背負った存在があり無視出来ない。したがって世の中には完全な体系的名称は存在せず、名称による網羅的な構造入力システムも残念ながら無理な注文ということになる。勿論、慣用名をすべて含んだデータベースを持ったシステムも考えられなくはないが現実性は薄い。しかしある限定された範囲の構造式だけを取扱うシステムを構築する場合、入力法として名称を使うことは、外註に出すことが容易であることや、校正のし易さなどから一考する価値がある。

線型表記法

同じく文字入力を前提とするものとしてこの線型表記法がある。代表的なものが WLN (Wiswessers Line formula chemical Notation)²⁾ であるがこの他にも Dyson/IUPAC法³⁾ Hayward 法、⁴⁾ Skolnik 法、⁵⁾ 米国によるCHEMO 入力法、⁶⁾ 著者らのCANOST表記法⁷⁾ 等多数が提案されており、それぞれ特徴を持っている。これらのうちで最も広く使われているのはWLN であると思われるのでこれを中心に若干の説明を加えて行く。これらはいずれも構造式を部分構造式の集合と定義し、種々の部分構造式を記号で表現している。この記号を一定の規則で一列（線型）に書き並べることによって対象とする範囲のあらゆる構造式

*1 IUPAC の命名法委員会によれば体系的名称とは構造を正確に表わす音節のみで組立てられた名称のことをいう。例えばoxazole は体系的名称であるがfuran はIUPAC 名だが体系的名称ではない。しかし有機化学者は誰もoxole という名称を使おうとはしない。

が書けるというものである。

例えば、WLN ではアセトンがIV1、フェナントレンがL B666J と表記される。WLN に限って言うなら一つの構造式に対して一つの表記しか無く逆もまた成立するので、表記をそのままコンピュータファイルに格納して構造（部分構造）検索に用いることが出来る。欠点としては表記の文法が難しい（但し IUPAC命名法等に比べるとはるかに簡明である）、任意の大きさの部分構造をファイルから検索することが困難であることなどがあげられよう。コンピュータメモリやグラフィックディスプレイが安価になった現在ではこの線型表記法の影は少々薄くなって来たようである。

結合行列、結合表

化学構造式のトポロジー（平面構造）を表現する方法として結合行列がある。これは下図に示すようなもので各行と列に構造式中の各原子を割り付け行列の各要素には該当する行と列の原子間の結合価数を並べたものである。図に示したのはアセチレンの結合行列であるが、すぐ判るようにこれは正方対称行列であり対角項を除く上三角あるいは下三角に

$$H_1 - C_1 \equiv C_2 - H_2 \longrightarrow \begin{array}{c|cccc} & C_1 & C_2 & H_1 & H_2 \\ \hline C_1 & 0 & 3 & 1 & 0 \\ C_2 & 3 & 0 & 0 & 1 \\ H_1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ H_2 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{array}$$

必要な情報は全部含まれている。また、行列部分だけについて言えば、可能なものが4! すなわち24通りある。実際にはC₁とC₂、H₁とH₂が等価なのでそれぞれ異なった行列はその半分の12通りであるが、いずれにせよこのうちの一つを選択して標準形としないことには多くの目的には役に立たない。この標準形を決める、言い換えれば結合行列の各行または各列に構造式中の原子をどのように一義的に割り付けるかを決定するのがいわゆる番号付けの問題であり、Morgan法⁸⁾がその代表的なアルゴリズムである。Morganは同時にこのアルゴリズムに基づく結合表も提案しており、これが現在でも化学構造式のコンピュータ内部表現として広く使われている。

Morganのアルゴリズムを立体化学を含むように拡張したものがWipke⁹⁾のSEMAである。結合行列、結合表はいずれも構造式のコンピュータ処理には適しているが決して人間向きの表現法ではない。したがって化学構造式の入出力法としては前述の線型表記法の方が数等優れているが、グラフィック入出力を考える場合の内部表現として重要である。

グラフィック入力

化学構造式の多くは二次元の図形として表現できる。この図形の各頂点（原子）のX,Y座標および頂点を結ぶ線分（結合）の種類をグラフィック装置のマウス等を入力し画面上に構造式を描くプログラムは比較的容易に出来る。使い易いプログラムにする為には、使

用頻度の高い基本的な骨格のテンプレートを用意して少ない操作で入力ができるような配慮が必要であろう。また、これらのデータをそのままファイルに格納しておけば構造式のデータベースが出来るわけである。現在のところ結合行列や結合表から化学者の「好み」にあった構造式を描くプログラムの完全なものは無いので、^{10),11)}このような図形をそのまま格納して置くことも表示用としては必要である。但し、このデータベースは図形としてのデータベースであって、(部分)構造検索の目的には適さない。その為には結合行列や結合表に変換して置く必要がある。

この入力法は使用するグラフィックターミナルのハードウェアの機能に依存する部分が多いので、プログラムの移植性は低い。

おわりに

以上 化学構造式のコンピュータ向け表現法について駆け足で概説した。詳しくは末尾の参考文献を参照されたい。

名称、線型表記、結合行列、結合表、グラフィック入力それぞれに得失があり用途によって選択が必要であろう。データベースを構築しようとする場合は特に、構造入力法の選択は重要である。ファイルデータの蓄積、校正、更新等の手続きを化学者が行うか、非化学者が行うかで異なって来るはずである。冒頭に述べたように非化学者にとって「亀の甲」は無意味な図形なのである。

参考文献

- 1) C. H. Davis and J. E. Rush 著、平山、田淵訳、「情報検索の原理と実際」 丸善 (1977)
- 2) E. G. Smith 著、平山、佐々木監訳、「WLN-化学構造式の線型表記法」 南江堂 (1975)
- 3) H. F. Dammers and D. J. Polton, *J. Chem. Doc.*, 8, 150 (1968)
- 4) H. W. Hayward, H. M. S. Sneed, J. H. Turnipseed and S. J. Tauber, *ibid.*, 5, 183 (1965)
- 5) H. Skolnik, *ibid.*, 10, 216 (1970)
- 6) 米田幸夫 「CHEMOGRAM」 丸善 (1972)
- 7) H. Abe, Y. Kudo, T. Yamasaki, M. Sasaki and S. Sasaki, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 24, 212 (1984)
- 8) H. L. Morgan, *J. Chem. Doc.*, 5, 107 (1965)
- 9) W. T. Wipke and T. M. Dyott, *J. Amer. Chem. Soc.*, 96, 4834 (1974)
- 10) R. E. Carhart, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.*, 16, 82 (1976)
- 11) C. A. Shelley, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.*, 23, 61 (1983)

ハードウェアはデータ入力のための装置、入力データを表示するディスプレイ装置、画像を残しておくための印刷装置の3種類に大別できる。現在これらの製品は非常な勢いで機能アップや低価格化が進んでいるのでニュースが出る頃には変化している可能性もある。

a. 入力装置

1. デジタイザ (タブレット) : 四角い板の上に読み取りたい図を置き、カーソルで図の点や線をなぞると座標がデジタル化されて読み取れる。電磁誘導や筆圧を利用して座標を計算している。板の大きさや解像度によって一万円 (EPSON B S-20) くらいから百万円を越えるものまである。パソコン用には10万円前後のものが多く出ている。

2. イメージスキャナ : 写真、印刷物、手書き図や文字など紙に書かれたものをそのままコンピュータに入力する装置である。白黒用はパソコンの入力装置として多数売り出されている、日経バイトの86.10月号にパソコン用イメージスキャナの一覧表がある。例えばNECのPC-IN502は99800円で最大240ドット/インチの解像度がある。カラーはNECのGT-3000の198000円以外はまだ高価である。原理は複写機と同じで、原稿の一行ごとに光を当て反射光をイメージセンサーで捕らえる。イメージセンサーは反射光の強さに従った電圧を出すので、強さに応じて原稿の濃度が分かる。

b. ディスプレイ装置 : 最近まで表示形式にストレージ、ランダム、ラスタ方式があったが、現在のディスプレイはメモリー価格の低下に伴い低価格のものから超高級機までラスタスキャン方式 (TV方式) で画像を表示している。画面を奇数行目だけ、偶数行目だけ交互にスキャンする方法をインターレス方式と言い、リフレッシュ速度が半分でもちらつきがないように出来るのでTVや低価格の装置で使われているが縞模様のような細かい表示に問題がある。図形は点により表現されドットイメージでメモリーに貯えられる。走査ビームがスイープされていく途中でメモリーに従ってその位置の点を明るくするかしないかで図を描いていく。PC-98では640*400=256000ドットで画面が構成されているので白黒の絵を書くのに32Kバイトのフレームバッファを必要とする。この様にメモリーの1ビットが画面の1ドットに対応した表示方式のことをビットマップと呼ぶ。色は赤、緑、青 (RGB) の組合せで表示される、それぞれに256階調の揮度レベルを与えると1680万色を同時表示可能であるが揮度情報用に1ドット当り24ビットのメモ

リーが必要である。パソコンでもアナログRGB端子付のディスプレイ（NECPC-TV452など）と付加装置（ソフト込みで100-1000万円くらい、monolith;FBX24など）で対応できる。高級グラフィック装置（3百万円くらいから）は前述のバッファをディスプレイ側に複数持っていて瞬時に別の絵を表示したり、重ね合わせたり出来る。またデータを数学的（ベクトル、多角形など）にセグメントバッファに持ち図形の回転縮小などをホスト計算機でなくディスプレイ側の専用CPUで行なえるようになってきている。このとき2次元データだけの回転、縮小などの処理が出来るものを2次元ディスプレイ（3次元処理はホスト計算機を使用する。）、3次元データまで扱えるものを3次元ディスプレイと呼ぶ。最近では3次元データを送ると隠面、隠線処理をしライティングまで行って画面に透視射影するディスプレイが登場している。2次元と3次元高性能ディスプレイはLSIの進歩によりディスプレイに大用量メモリを持ったコンピューターとソフトが一体になったもので本質的なハード上の違いはない。

c. 印刷装置

1. プリンター、ハードコピー : ワイヤーピン、インクジェット、熱転写などの方式があるがディスプレイと同じにドットをラスタ方式で印刷する。普及しているのは縦に並んだ24個のピンを使用して文字や図を書くものである。8色以上のカラー印刷が出来るハードコピーはインクジェットと熱転写がある。（セイコー電子工業150万円から）インクの方が柔らかい感じの絵が書ける。これらの方式も基本色はイエロー、マゼンダ、シアン、ブラックをつかい例えば4*4のドット（4096色）を一単位としてこれらの色をこの領域に適当に配置して多くの階調や色を出している。よって細かく点が書けるほどきれいな絵が書ける。
2. レーザープリンター、静電プロッター : コンピュータからの画像情報を複写機的方式で印刷する。高解像度であり1000色以上の多色刷りも可能でハーフトーンや塗りつぶしなど精密な出力を必要とするものに適している。プロッターに比べて複雑な図形ほど早く書けるが値段が高いのが欠点である。パソコンレベルでは白黒でPC98のプリンターとして使用可能なキャノンLBP8（155万円）がある。
3. 写真 : ビデオ信号からポラロイドやネガフィルムにRGBの各々の映像をフィルターを通して3回露光して作る。日本イマプロQCR（498万円）はドット毎に露光し、4096/ラインの解像度を持っているので高品位な画像が作れる。

1. グラフィックス・ベーシックソフトウェアとは

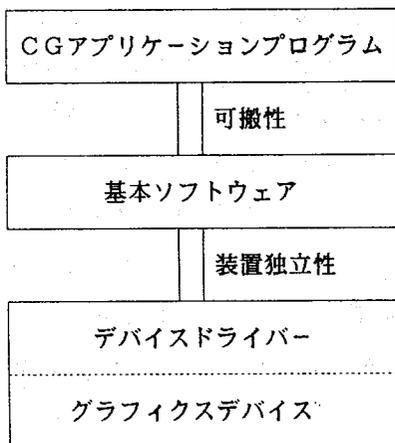
コンピュータグラフィックス（以後CGと略す）のアプリケーションプログラムの記述は、その開発環境に大きく依存している。例えば、あるコンピュータグラフィックスシステムで、分子モデル表示プログラムを開発したとすると、他の研究機関のシステム、あるいは数年後の新しく導入したシステムなどで、そのプログラムを実行させるには、基本ソフトウェアが異なっている場合が多く、そのためそのプログラムを最初から作成しなおさなければならない。これではソフトウェアの生産性は極めて低いと言わざるをえない。そこで図形処理の基本的な機能を有する基本ソフトウェアをハードウェアに依存しないように標準化し、これをパッケージとして提供する。このことによって、CGアプリケーションプログラムは、その基本ソフトウェアパッケージをコールする形となり、CGソフトウェアの生産性は飛躍的に上がる。このCGの標準化は、プログラミング言語の標準化と20年以上遅れていたが、ここ数年でようやく整備されてきた感がある。そこで、現在の主なCGベーシックソフトウェアの簡単な紹介と今後の見通しについて述べよう。

まず確認しておきたいことは、CGとCAD・CAMとは別の分野であるということ、そしてCGの分野でも、大型コンピュータのCG端末およびCGワークステーションと、パーソナルコンピュータのCGでは事情がまったく異なるということの2点である。ここでは編集者の意向に従い大型コンピュータおよびCGワークステーションなどにおけるCG基本ソフトウェアについて述べる。

グラフィックスソフトウェアの標準化は、簡潔に、次の2つの性格を持っていると言えよう。

- (1) ポータビリティ（可搬性）
- (2) デバイスインディペンディンシィ（装置独立性）

図のように可搬性とはアプリケーションプログラムと基本ソフトウェアとの結合を、装置独立性とはデバイスドライバとソフトウェア（ユーザーから見ればアプリケーションとデバイス）との間の仲立ちをそれぞれ意味している。



【図. ベーシックソフトウェアの簡単な概念】

2. GKSとCORE

西ドイツで2次元グラフィックスの標準を目指し開発されたGKS(Graphical Kernel System)は、ヨーロッパ諸国の支持を受け1982年国際標準化機構(ISO)に採用された。その基本的な機能(プリミティブ)は

- | | | |
|-----------------|---------|--------------|
| (1) poly line | 折れ線 | 一連の接続した線分を描く |
| (2) poly marker | マーカ列 | 同じ記号の点列を表示する |
| (3) file area | 領域塗りつぶし | 指定された領域を表示する |
| (4) text | テキスト | 文字列を表示する。 |

である。各々のプリミティブには、更に機能の詳細を定義するための、関連するパラメータ群がある。

一方、米国ACMのSIGGRAPHで、2次元および3次元グラフィックスの標準化を目指して開発されたCOREは、1979年にほぼ現在の形が完成した。GKSとCOREの比較の主なもののみを表に示したので参考にして頂きたい。

[表. GKSとCOREとの主な比較]

項目	GKS	CORE
(1) 現在位置の概念	ある	ない
(2) 基本属性	一括指定ができる (バンドルテーブル)	個別指定のみ
(3) ワークステーションの概念	ある	ない
(4) 次元	2	2, 3
(5) 例外処理	あまり認めていない	認めている

(3)は装置依存性にかかわる項目であり、(5)は可搬性にかかわる項目である。なお、GKSに三次元の機能を加えたソフトウェアにGKS-3Dがある。

他方、我が国では、周知のごとく1973年頃ソニーテクノロジクスが基本的ソフトウェアPLOT10を提供し、グラフィックス業界のリーダーシップをとるようになった。ここで誤解のないようにして頂きたいのは、現在ソニーテクノロジクスが提供しているPLOT10は基本的ソフトウェアの総称であるということである。現在のPLOT10は、CORE準拠のPLOT10-IGL、GKS準拠のPLOT10-GKS、そしてPLOT10-TCS(AG-II)および将来期待されているPLOT-STI等で構成されている。このPLOT-TCSが初期に発表されたPLOT10とほぼ同じものである。若い頃グラフィックスに携わっていた40代以上の方が、PLOT10という名前を口にした時には、このPLOT10-TCSを意味している場合が多い。

3. 新しい動向

米ANSIが標準化の検討を進めているPHIGSは最近米国のワークステーションメーカーが採用し始めているベーシックソフトウェアである。PHIGSの特徴は、図形を階層構造で表現し図形データの編集機能を強化し、又、対話性を考慮したところにある。しかしまだGKSとの互換性の問題を残しているためISOの国際標準になるのはまだ先とみななければならない。一方、GKSとの完全な上位互換性を保ったグラフィックス標準PHI-GKSが西独DINから提案され、ヨーロッパ各国の支持を受け始めている。PHIGSとPHI-GKSとの国際標準化の争いが注目されよう。日本の各メーカーはこの両者の動きを静観しているようである。

4. 終りに

情報化学討論会で既にお馴染みの伊賀、安岡（システム、姫路工大）両氏のタンパク質立体構造表示システムは、他の追随を許さない我が国の本格的グラフィックスシステムであると考えるのは筆者だけではないだろう。大阪で開催された第7回情報化学討論会での両氏の3次元動的表示の（8ミリによる）報告はまさに圧巻で、講演直後、佐々木先生をはじめ多くの聴衆から拍手が沸き起こったのを、筆者は今でも鮮明に憶えている。

我が国でも、このような本格的グラフィックスシステムを構築するための開かれた環境が、ベーシックソフトウェアの充実により整ってきたと言ってよい。”本格的”CG分子表示システム開発報告の今後の増加に対して、新しい情報化学を推進させる研究者の間から大きな期待が寄せられている。

モレキュラーグラフィックスのゆくえ

姫路工業大学工学基礎研究所

安岡 則武

大型計算機やスーパーミニコンピューターに接続されて使用されるグラフィックスシステムの特徴は何と言っても対話的に図形の変更が出来るということであろう。リフレッシュ型のグラフィックスでは30Hzぐらいで画面が更新されている。つまり $1/30 \text{ sec} = 33 \text{ msec}$ の周期で画面が描かれる。ベクトルの始点と終点に関するデータを基本とする形に分解された図形データを記憶するメモリーをセグメントバッファと言うが、これを読み出し、回転・並進、縮小・拡大といった操作をマトリックス演算によって実行したのち、電子ビームをふらせて図形を作る。この間にプロセッサは多くのステップの命令を実行する必要があり、その能力がグラフィックスの能力を決定することになる。メモリーの集積度の向上、プロセッサの処理速度の向上といったLSI技術の近年における発展の恩恵を受けて、グラフィックスの処理能力・処理速度は急速に改善され、進歩しつつある。ちらつきなしで表示できるベクトル数が、グラフィックスの処理能力の目安になるが、十年前には数千本ぐらいであったものが、現在では数万本になっている。セグメントバッファ

に記憶されている図形データを変更することによって、表示される画面を刻々と変えることができ、また、コントロールダイヤルやジョイスティックといった対話用のデバイスによる図形の変更も自由に行うことができる。こうしたハードウェアの機能を前提として分子モデリングシステムが構築されている。つまり、アプリケーションプログラムとハードウェアの性能が非常に密接に結びついている。さらに言えば、グラフィックスを動かすためのコンピューターとの接続の様式やデータ転送速度といったものにも左右される。つまりハードウェアとアプリケーションが一体となったシステムであって、それ故に非常に使い勝手がよいのであるが、反面、プログラムのポータビリティは全くないと言ってよい。以上に述べたベクトルスキャン型のグラフィックスでは、現在のところ世界的に見て、Evans & Sutherland社のPSシリーズが唯一のものと言ってよく、これをドライブするコンピューターもDECのVAXに限られている。この組み合わせに対して、モレキュラーモデリングシステムが開発され、市販されているが、いくつかのものは非常に高価である。

ベクトルスキャン型のグラフィックスは、日本ではほとんど生産されていない。しかしラスタースキャン型のもは多くのメーカーで生産されており、この1、2年で急速に改良され、ベクトルスキャン型に肉薄するような性能をもつ機種が市販されるようになった。そして、これらを利用した分子モデリングシステムがわが国でも開発されているのはまことに喜ばしい。

ラスターグラフィックスは、画面を、たとえば1000×1000の画素(ピクセル)に分割し、それぞれの画素に対応するフレームバッファメモリをもつ。セグメントバッファに記憶された情報はいったんピクセルの情報に変換されて記憶される。このフレームバッファから読み出された情報はテレビと同じ方式でラスタースキャンして図形となる。

この方式の相違から、2種類のグラフィックスの特徴が出てくる。ベクトルスキャン型は、文字どおり線描きの図形の表現に適していて、表示図形を対話的に追加削除を行ったり、回転並進の操作を加えることは容易であるが、ラスタースキャン型ではフレームバッファへの書きこみという操作が余分に加わっているだけに応答速度が遅くなるのは避けられない。複雑な図形をたとえばコントロールダイヤルを用いて回転させるようなばあい、表示図形が滑らかに回転せず、ガクンガクンと動くような印象がある。しかし、ベクトルスキャン型に勝る点も多い。図形がピクセルの集まりから作られるから、面描き・塗りつぶしができる。線だけから作られる図形よりもはるかに表現が豊かになる。半透明表示といって、ふつうなら隠れる図形の裏側を表わしたり、シェーディングによって立体感を増すようなことができる。デブスバッファがあって、図形の重なる部分は見えないところを消すような働きをするプロセッサも備えているものがある。

ラスターグラフィックス性能はさらに改善されるであろうし、32ビット系のプロセッサが導入されるとともに、応答性もよくなることが期待される。しかし価格がますます高くなるということでは普及しないし、モレキュラーモデリングシステムの開発は停滞するであろう。適当な性能のグラフィックスを用いたよいモデリングシステムが開発され、

適切な価格で提供されると、爆発的に利用者が増加し、ハードウェアの価格が下がり、プログラム開発が促進されるのではないかという期待をもっているが如何なものであろうか。

本題に戻る。分子の立体構造の表現法については多くの工夫がなされて、見やすく美しい画面が作られている。ワイヤーモデル、ボールアンドスティックモデル、スペースフィリングモデルといった基本的なものは、どのプログラムにも備わっている機能である。スペースフィリングモデルは、塗りつぶしのできるラスタ型の得意とするところであり、ベクトル型ではドットサーフェスという表現になる。さらに、タンパク質のばあいには、ペプチド主鎖の折りたたみ構造を表現するために、 α 炭素の位置だけをとりだして結び目モデルや、二次構造を表現するためにヘリックスを円筒で描くことなどが行なわれる。これらも、塗りつぶしのできるラスタ型の特徴である。

カラーの使い分けによって表現はさらに広がる。原子をカラーで表現するのは最も基本的である。電荷分布や静電ポテンシャルを表わすことができる。X線解析の結果得られる温度因子の大きさをカラーで表現して熱振動の程度を表わす。タンパク質のばあいには、アミノ酸残基の性質 —— 疎水性・親水性などが表現できる。色々な試みが行なわれそれぞれに効果を挙げていると言えよう。

さて、上述したのは分子の立体構造の表現とグラフィックスに限ったものである。モレキュラーモデリングシステムの問題点は、如何にして立体構造を作りあげるかということにある。グラフィックスが構造を可視化するだけに、モデリングの方法が既に確立しているかのような印象を与えてしまうのは困ったことである。医薬・農業などの分野では分子力学の方法によるコンフォメーション解析はまだ研究の余地がある。タンパク質の立体構造の分野では、予測の方法がいろいろと提出されているが、特定のタンパク質の立体構造をこうだと決定するような予測というのはまだ不可能である。いろんな情報を総合して確立の高いモデルを提出することが、現在で可能なことであろう。しかしこの方向での構造予測は最大の課題であり、いろいろな方面から取りくまれている。

こうした研究は、ニューズレター前号で取り扱われた人工知能システムのもっともよい応用例の一つである。現在までに知られている立体構造に関する各種の情報を知識ベースとして入力しておき、特定の問題に対して推論を行わせるということになる。具体的に実用に耐えるシステムを作ることは並大抵のことではない。タンパク質の立体構造モデリングをめざした研究がいま、世界中でしのぎをけずっている。

タンパク質・核酸の分子グラフィックス 我が国の憂うべき現状と展望

東大名誉教授、東京慈恵医大客員教授 磯 晃二郎

米国を中心とするタンパク質・核酸のコンピュータ・グラフィックスは 1960 年代 C. Levinthal (MIT) に始まり、1970年代苦難の末、R.Langridge (UCSF-CGL, Univ.Calf., Computer Graphic Laboratory)により今日 MIDASと呼ばれる Protein Data Bank format のディスプレイ・ソフトウェアが発展し、ディスプレイとシミュレーション、さらに自在なリアルタイム操作を強化し、VAX に適用、広く各方面に応用され、種々の実効が現われつつある。ここを中心として多くの人材が養成され、かつ各所で強力な基礎研究が展開され、すばらしい成果が続出し、隔絶した優位を誇っている。

一方、我が国の状況を顧みると、全く組織的なものがないばかりか、極く小数の個人ブレイに留まり、一部を除いて研究環境も、予算的にも貧粗で、研究発表の機会も有効な場がなく、他研究分野より冷淡な扱いをさえ受けている。従って外国の動きに比すべくもなく、このまま経緯することは近い将来の要求に満足な対応ができない憂々しい状態にある。

タンパク質・核酸の立体構造解析は着々進歩し、分子種 100種に達する三次元精密座標が Protein Data Bank に登録（データ数 296, '86 年10月現在）され、国際的に流通している。また、欧米におけるタンパク質の分子グラフィックスの進歩により、タンパク質の構造原理探求へのメスも漸くその緒につきつつある。我が国の研究者は上記の環境と予算と組織の貧困から、手をこまねいて見ているに等しい事情にある。

幾つかの課題を拾って見ると、先ず分子生物学的諸要求に対応した構造と機能の解析と操作に関連したモデル描法の改良と開発から、各種タンパク質を見透した構造形成原理の探索の組織的研究、アミノ酸配列から高次構造の推定への諸方策の探求、動的構造のシミュレーションの方途、タンパク質工学の要求に沿ったアミノ酸置換操作に関連したシミュレーションの方法と安定構造の設定、酵素と基質等分子間相互作用の複合系の操作と描写、さらに人工知能的操作処理の開発や、これらの素材を利用した描写やアニメーション等のビデオ化技術の開発、またハードの高度な発展線上での描写速度、記憶容量の増進と改良、またこれら成果の端末間転送から通信転送等、ソフトおよびハードさらにそれらの高度活用等、基礎と応用に跨る多様な重要課題は尽るところを知らないかにみえる。

分子生物学的要請に答え得るタンパク質 X線結晶構造解析学者および分子グラフィックス研究者の研究推進の援護と協力そして後続研究者の養成、さらにこれと関連した量子力学的ないしは分子力学的計算機化学者の育成、そしてパソコンからミニコン、フレームワーク・コンピュータ、さらにスーパーコンピュータに至る各レベルの適応した問題の解決

の推進と相互協調した組織的進展が急務と考えられる。

タンパク質工学の発展に伴う生命科学の広範な分野の多面的要求の提示に対する大学、研究機関の進んだ問題解決の効果的推進がこの分野で主体性を保持するためには必要である。

我が国ではこの面で大企業の積極的取り組みが目立つものの現状の立後れから欧米依存にならざるを得ない傾向にあることはやむおえない状況とはいえ残念である。これは偏に要請に答え得るソフトおよびハードの自主開発と国内供給を受持つ企業（日本電気、富士通など）の努力の推進とそれらの支援の基礎になる大学の研究体制の強化充実、さらにそれを利用する立場にある研究者や企業の協力に期待することの大なるものがあると云えよう。

一方、生命科学の基礎開発を担う生化学者や分子生物学者が近年の三次元的イメージングの重要性の認識とその積極的具体的行使に目覚めることと、それを支援するための啓蒙活動の必要性を痛感する。そのためにも分子グラフィックスの利用が容易であること、その利用になじみ易いこと、高価なハードを用いずに操作できること、レベルの増進と利用設備の高度化への移行にたいする専門家の協調指導が必要であり、またこれらの現場研究者の要請にたいする積極的協力も要請される。

これらの諸情勢を考慮して、当面の難局を克服し、国内体制の整備に時間を稼ぐこと、更に生化学の現場に活躍する研究者の生のセンスを土台として立体構造に日頃なじみ薄い人達に立体構造の魅力を実感して頂き、一部の専門家の協力に依頼し依存してと云うよりは自ら立体構造に慣れ親しむことを支援し、寧ろより多くの生化学者がタンパク質の構造と機能の本質や各種生物システムの解明に進んで強力なタンパク質工学技術を駆使するための道を開く支援をすることを意図した。このため、筆者はタンパク質や核酸の精密分子構造模型の製作キットを開発し（丸善発売）、その設計図の作成を契機として、立体構造の多角的活用を推進、大衆化すること、ソフトとハードを含めて 100万円以内で操作できるを目指して、急速に進歩しつつあるパーソナル・コンピュータの機能を生かしたタンパク質・核酸のパソコン分子グラフィックスシステムの開発を数年前に志し、有能な協力者とNECの協力を得て、各種モデル様式で多面的分子生物学的要請に答え得るソフトウェア“GDP S98”の作成に成功し、'86年 5月市場供給を開始した（発売元：日興通信KK，東京港区芝3-4-16，Tel. 03-454-1066）。結果は好評を博し、現在プロフェッショナル版、複合画像配置加工プログラム、リアルタイム回転プログラム等の供給を計画している。

これらの数年間の諸体験を通じて、タンパク質・核酸の分子グラフィックスおよび分子モデリングに関して研究者間の協力と連係さらに相互扶助や情報交換の場をもつことの努力も必要であると考える今日此頃である。

パーソナルコンピュータによる 分子グラフィックス

姫路工業大学・応用化学教室
中野英彦

はじめに

分子構造をコンピュータによって描くことの意義については、本特集において既に十分に述べられていると思う。本稿では、特にパーソナルコンピュータ（以後パソコンという）に限定した場合について述べる。ここでパソコンというのは、マイクロプロセッサを用いた汎用のコンピュータで、広く一般に市販されているものに限ることにする。つまり、たとえマイクロプロセッサを用いており、能力的に同じ程度のものであっても、分子構造表示専用設計されたものや、特殊な付属装置を必要とするものはパソコンに含めない。このように狭く限定する理由は以下に述べることで御理解いただけると思う。

なぜパソコンか

それでは、パソコンによる分子グラフィックスの意義は何であろうか。その第一は、計算機化学の普及（大衆化といっても良いかも知れない）であろう。結晶学や理論化学等の特定の分野の専門家だけでなく、一般の化学者（例えば有機合成化学者）が、自分の合成しようとする化合物の分子模型を組むかわりに、座標を組み立てて力場計算をし^{1,2}、最適なコンフォメーションを求め、その構造をグラフィック表示して見るというような作業が、ごく日常的に行なわれるようになるのも間近であろう。その際用いられるコンピュータは、そのための専用機ではなく、その時により実験データの処理、ワープロ、データベース検索のための端末等にもなる汎用のパソコン（あるいはワークステーションというような呼び名になるかも知れないが）となろう。

その他にパソコンによる分子グラフィックスが使われるのは、化学教育の分野であろう。これについては、ここで詳しく述べる余裕はないが、専用のシステムではなく汎用的なパソコンが多く用いられるようになることが予想される。

パソコンで何ができるか

それでは現在のパソコンで、どの程度のグラフィック表示が可能であろうか。以下に私共がこれまでに得た結果の一部を紹介し、参考に供したい。ここで用いたパソコンは NEC の PC-9801F であり、特別な付属品は使用していない。

1) どの程度の図形が表示できるか

パソコンによる分子構造表示といえば、原子を円で、また結合を線で表わしたような簡単なものが一般的であったが³、私共が開発したプログラムでは図1および図2に示した様に、陰影を付けた高度な表示が可能である^{4,5}。分子グラフィックスの目的は、分子の立体的構造（あるいはその他分子に関するさまざまな情報）を視覚的に把握しやすくする

ということであり、リアルな表現が必ずしも最善とは限らない。例えば、簡略化した表現の方がより本質をつかみやすい場合もあるし、また表示に要する時間を考慮した場合にも簡略化表示の方が有利な場合もあるであろう。しかし、陰影付けを行なうことにより立体的な構造が把握しやすくなることは事実であり、これは特に教育面において、効果が著しいように思われる（分子構造に精通した専門家ならば、簡略化した表現からイメージをつかめるが、初心者に対してはある程度リアルな表現をしたほうがよい）。

図1および図2は、CPK 模型やHGS 模型として市販されている分子模型をコンピュータによって表示したものであり、立体構造の把握という面からだけみれば実際に手に取ってみられる分子模型にかなわないかも知れないが（もちろん分子科学計算をおこなう際の定量的な取り扱いは、分子模型では得られないことは当然である）、コンピュータグラフィックスを用いれば分子模型では不可能な表現を行なうこともできる。図3に示したのはその一例であり、これは2分子の β -シクロデキストリンに3分子のキシリジンが包接されたものを、内部が見えるように直交する2平面で切断した図である。また、図4はタンパク質（フェレドキシシン）分子の主鎖を曲がりくねった棒で、また鉄とイオウ原子からなるクラスター部分を空間充填模型で表示したものである。

その他、パソコンによるグラフィックスでは、特定の部分（例えば酵素の活性部位など）を明滅させて強調するようなことも可能である。このようなきめの細かい表現方法は、大型のシステムでも不可能とはいえないが、とくにパソコンの得意とする分野であるということができよう。

2) どの程度の大きさの分子まで扱えるか

描くことができる分子の大きさを制限する要因としては、記憶容量、演算速度、グラフィック画面の分解能などが考えられる。この内で最も明確なものは記憶容量であり、そのプログラムにおいて確保される配列の大きさによって、取り扱える分子の大きさが制限される。私共が開発したプログラムでは、主記憶を640kBに増設した場合には5000程度の原子から構成されるタンパク質分子を描く事が可能である（図5）。

演算速度に関しては記憶容量ほど明確な線は引けない。これは使用目的にもよることであり、極端にいえばリアルタイムで回転あるいは移動させる（言い換えれば1秒間に数枚

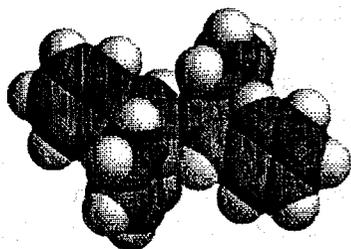


図1. テトラフェニルブタジエン分子の空間充填模型

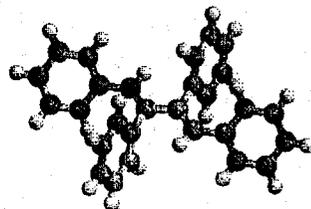


図2. テトラフェニルブタジエン分子の球棒模型

以上の画面を描く)ほどの速度が要求される場合もあれば、何時間かけてもとにかく描くことができればよい場合もあろう。上の例でいえば、5000原子程度でも所要時間は数10分程度であり、これは十分に実用可能な範囲であると考えている。

画面の分解能に関しても、ある意味でどの程度まで「がまん」できるかにかかっていると言うことができる。また、これは描く模型の種類にも依存している。図5のような空間充填模型では、一つひとつの原子の半径が画面のドットに比べて十分に大きいので、この分解能でも十分であるが、同じ分子を球棒模型で描いた場合は原子および結合の半径がドットの大きさに比べて大きく取れないので、もはや分解能の限界を超えると考えられる。

3) 表示に要する時間はどれくらいか

原子数が増加すれば表示に要する時間が増加するのは当然である。表1に上記プログラムにおける原子数と表示に要する時間との関係を示した。この表で分かるように、所要時間は原子数の増加する次数よりも低くなっている(原子数 n の $2/3$ 次程度)。

表1. 作図に要する時間

	原子数	所要時間(分)	
		空間充填	球棒
Ferredoxin	389	3.7	3.7
Insulin(dimer)	780	4.9	5.3
Myoglobin	1277	7.2	8.0
t-RNA(yeast, phe)	1652	4.9	7.1
Hemoglobin	4558	21.1	24.4

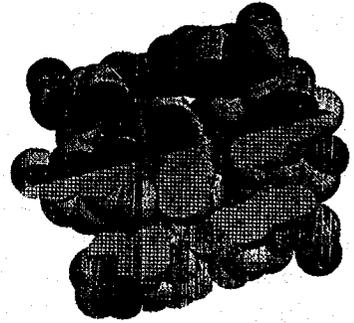


図3. β シクロデキストリンに包接されたキシリジン分子*

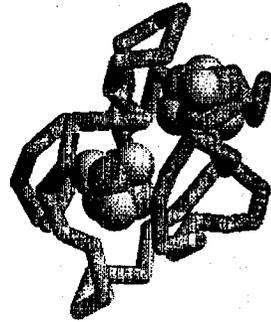


図4. フェレドキシン分子

おわりに

このように、現在広く普及しているパソコンによっても、かなり高度な表示機能を実現できることがお分かりいただけたと思う。最後に、今後の予想について私なりの考えを述べさせていただきたいと思う。

まずハードウェアの進歩についてであるが、いま最も広く普及している NECの PC-9801

シリーズが最初に発売されてからほぼ4年になろうとしている。これは、それまで8ビット機が主流だったパソコンの能力を飛躍的に向上させ、上記のような高度な表示機能もこれによって始めて可能になった（それ以前から他のメーカーから同様の機能を持った機種は発売されていたが、パソコンと呼ばれるほど広く普及しなかった）。同シリーズは以後毎年のように新型が発売されており、部分的な改良はなされているが基本的には最初と変わっていない。これは、それ以後の技術的な進歩が遅いということではなく、ソフトウェアの互換性を確保するためにわざとそうしているものと思われる。このような状態は、ある意味ではソフトウェアの互換性に対する考慮が、ハードウェアの進歩の足を引っ張っているといえないこともないが、ソフトウェアの充実の面からいえばむしろ好ましいといえ

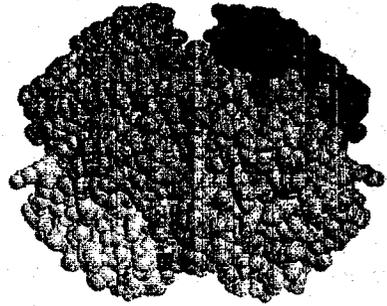


図5. ヘモグロビン分子

よう。今後しばらくはこの状態が続くように思われるが、数年後にはパソコンに対する計算需要が能力を超えるようになり（かつて8ビット機が必要に応じられなくなったように）、その時点で急激な発展が予想される。

そこで「パソコン」と呼ばれるようになるのは、おそらく32ビット機で演算能力は現在よりも数段向上したものとなるであろう。そのようなコンピュータは、現在でも「ワークステーション」などと称して各社より販売されている。しかし、それらは少数の専門家を対象としたものであり、規格も各社まちまちである。これがパソコンと呼ばれるほど普及するには、市販ソフトウェアが充実することが必須であり（ハードウェアの能力が向上すればするほど、ソフトウェアは自分で作るものではなく他人が作ったものを使うだけの利用者が多くなる）、そのためには規格が統一されている事が重要である。なんらかの統一規格が制定されるのか、あるいは現在のパソコンのように特定の会社の製品が事実上の統一規格となるのか、おそらくは後者であろう（大型機を含めてコンピュータにおいて統一規格が成功したためしはない）。しかし、いずれにしても数年後には今よりも格段に能力の向上した「パソコン」が一般的となり、分子グラフィックスにおいても一層高度な表現が身近なものとなるであろう。

参考文献

- 1) 小川桂一郎他, 「分子のモデリング」, サイエンスハウス, (1986)
- 2) 大沢映二他, 化学, 40(No.11), 704 (1985)
- 3) 山本米雄, 「分子の組み立て」, 講談社, (1984)
- 4) 中野英彦, 「分子グラフィックス」, サイエンスハウス, (近刊)
- 5) 中野英彦, Information, 5(No.8), 91 (1986) より連載中

* シクロデキストリンに包接されたキシリジンの座標データは島根大学理学部の藤原隆二教授より提供されたものである。

化学関連パソコンCGソフト

(株) アスキー 上山治貴

近年パーソナルコンピュータの能力も上がり、かつては大型コンピュータでなくては実現不可能であった分子模型のグラフィック処理も可能になってきた。そこでPC-9801で動く化学関連CGソフトを紹介する。

分子表面ポテンシャル表示プログラム ソフトサイエンス 98,000円

分子構造の観察、分子表面の静電ポテンシャル分布の研究のために北里大学の広野修一氏が開発したソフト。メニュー選択方式を採用し、コンピュータの初心者でも扱いやすいようになっている。

分子のx・y・z座標を入力して、分子構造をボールスティック模型、CPKモデルとして任意の向きから表示できる。分子構造をドットの集合で表示するので高速表示を実現している。さらに、原子電荷を同時に入力すれば、分子表面の静電ポテンシャル分布をカラーで表示が出来る。分子表面としては、ファンデルワールス表面だけでなく、溶媒接触可能表面も対象としている。

また、このプログラムの分子構造表示の部分のみのサブセット版(4万5000円)も販売している。

結晶パッキング表示プログラム ソフトサイエンス 45,000円

このプログラムは、東京大学教養学部化学教室・岩本振武教授とポーランド科学アカデミー物理化学研究所・ヤヌシュ＝リプコウスキー博士との包接化合物に関する共同研究により開発されたものである。

結晶構造の記述に必要なイオン半径、金属半径、共有半径などのデータを入力し、任意の切断面で原子のパッキング状態を観察する事ができる。

GDPS 98 <蛋白質、核酸分子構造の表示> 日興通信株式会社 170,000円

東京大学名誉教授・磯見二郎博士の長年の分子グラフィックの研究により完成したパソコンベースでは初の蛋白質、核酸の立体構造表示・分子グラフィックソフトである。

プロテインデータバンク(PDB)の登録座標データをもとに、分子の全体、部分、骨格、側鎖、 α 炭素の流れを任意の方向・大きさで表示できる。表示方としては、針金モデル、豆球モデル、実体積モデル、リボンモデルの4つから選択可能で、希望の場所に多段階の彩色が可能で、立体構造を把握しやすいようになっている。

なお、PDBデータは別売で、PBDと同一形式のデータであれば表示可能になっている。

分子のモデリングパッケージI <GRIMMとMOLDA4> サイエンスハウス 98,000円

東京大学教養学部・小川桂一朗助手が分子力場計算のために開発したソフト。パソコン上で分子模型をいじるのに似た感覚でパソコン上に分子を構築でき、これまでの数値入力方式に比べて容易になっている。その構造データをもとに大型計算機で分子力場計算行い、きわめて精度の高い分子模型に変換させる。ソースリストが別売りの「分子のモデリング」(書籍、2800円)に公開されているので改造も可能である。

研究には直接的には関係無いが、論文やスライド作成等に便利なソフトがあるので以下に紹介する。

ケミグラフィ

ソフトサイエンス 48,000円

このソフトは、化学構造式・グラフなど図形を描く為に開発されたエディターである。特に化学構造式を描くために考慮されており、5員環・6員環・2重結合などは、ワンタッチで作図できるようになっている。置換基や縮合環を描く場合には、カーソルが都合良く動くように設計されている。

プリンタにも出力可能なのでカラースライド、オーバーヘッドプロジェクタシートの作成や報告書、予稿集などの挿図などに便利である。また作図したものをBASICのプログラムに変換可能なので自作のプログラムに組み込む事が可能である。

Thirdy

アスキー 40,000円

直接化学とは関係無いが、パソコン用汎用3Dグラフィックソフトとして最低価格を実現し手軽に3Dグラフィックを利用できる。すべてマウスにより操作しワイヤーフレームによるリアルタイム処理が可能になっている。また3面図の出力も可能なので実験器具等の設計などに応用可能である。表示データをZ'sSTAFF KID (アスキー,28,000円)に取り込みペイント処理が可能である。

問い合わせ先

ソフトサイエンス

160 東京都新宿区西新宿 2-4-1 新宿NSビル 6F 03-342-1471

サイエンスハウス

113 東京都文京区湯島 1-9-7 BY HOUSE 301 03-818-1087

日興通信

105 東京都港区芝 3-4-16 友和ビル 03-454-1066

アスキー

117 東京都港区南青山 6-11-1 スリーエフ南青山ビル 03-486-8080

分子グラフィックスの国際組織—The Molecular Graphics Society—

東大工 物理工学 中村春木

日本国内ではあまり知られていないが、ヨーロッパを中心とした分子グラフィックスの国際組織が活発な活動を続けている。この組織 (The Molecular Graphics Society) は、5年ほど前に、イギリスの国内組織として主にX線解析、薬化学会社、英国IBMなどが中心となって創立され、その後国外にも門戸をひらいて現在に至っている。この学会誌として、Butterwarths社よりThe Journal of Molecular Graphics (J. Mol. Graph.)が出版されている。もともとイギリスで生まれた組織のため、年2-3回のローカルな会合はほとんどロンドンなどでおこなわれているが、1986年より、国外での開催が始まった。ヨーロッパには、フランス、ベルギーの研究者によるGroupe Graphique Moleculaireなる別の組織もあるが、1986年4月にこの2つの組織の合同会議が行なわれている。また、1987年の年会はイギリスのサリー大学で4月10日よりおこなわれるが、1988年には、サンフランシスコでおこなわれる予定と言われている。国際組織なので日本にいても参加することができ、あまり高くない年会費を支払えば会合の知らせと季刊のJ. Mol. Graph.を直接個人宛てに送ってもらえる。(現在の連絡先は、Ms. E. Hubbard (HYDRAを作ったRod Hubbardの奥様) (Membership Secretary, Molecular Graphics Society), Department of Chemistry, University of York, Heslington, York, YO1 4DD, U.K. である。)

私は、1986年4月11-14日に南仏のリゾート地Cap d'Agdeで開かれたMol. Graph. Soc.の年会に出席したので、その報告を行ないたい。フランスとの合同会議だったため、右図に示すように、参加者はヨーロッパにかたよっていたが、登壇者は各国の若い研究者であった。初日は、南仏のおいしいランチの後、Protein Designのセッションがあり、デイナーの後21:00より映画を上映するフィルムセッションとなった。今回は、artでないscienceのフィルムが多く、楽しい会合であった。2日目の午前中には、Molecular Dynamicsと実験を組合せた新しい構造解析法のセッションがあったが、会議全体を通して、graphicsよりはむしろbiochemistry的なレクチャーが多い印象を受けた。つまり、「どう表示するか?」という問題はほぼ出つくして、むしろその技術をどのようにscienceに結びつけるか、に参加者の多くは関心を持っていたようである。その意味で、2日目午後のAIに関するRound Table Sessionは、参加者の期待に対して、speakerはうまく答えられなかったようである。しかし、サンフランシスコのグループの発表が、最も着実にエキスパートシステムの応用を進めている印象を受けた。最終日には、Drug Designの発表が主に製薬会社から行なわれた。同時にポスターセッションと、ハー

国名	人数
フランス	126
イギリス	57
西ドイツ	35
U. S. A.	23
ベルギー	15
スイス	10
スエーデン	8
カナダ	3
デンマーク	3
オランダ	3
オーストラリア	1
フィンランド	1
日本	1

ド及びソフトウェアの展示発表も行なわれており、日本国内より半年ほど情報を早く知ることができたと思っている。

日本国内では、1)分子グラフィックスの技術そのものの立上りが遅れたこと、2)学際的分野であること、などの理由によって、未だに組織ができていない。現在では、関連している研究者も多いと思われるので、せめて連絡会的なものでも作り、国内でどのような研究者がどのようなソフトを作っているか、またどこへ行けば自分の欲している表示や操作をすることができるか、どのような要求を他の研究者が持っているか、などの情報を研究分野を超えてまとめることだけでも大きな意味があると思う。

何時の日にか、日本でもMol. Graph. Soc.の年会を開催したいものである。

「分子の三次元構造と薬理活性」シンポジウム開かれる！

(東京大学薬学部) 板井 昭子

去る9月9、10日、東京・目黒区の駒場エミナースにおいて、「分子の三次元構造と薬理活性」シンポジウム(英文名:Symposium on Three-Dimensional Structures and Drug Action)が開催された。日本結晶学会の主催で、日本薬学会、日本化学会、日本農芸化学会、日本情報処理学会・コンピュータグラフィックス学会の協賛の下に行われた。最近関心の高いテーマとあって、民、官、学から350名を越える参加者があり、終始盛会であった。2日間にわたり、9名の外国人招待者による講演と、24のポスターによる発表が行われた。

筆者は計画段階から準備・実行・事後処理にいたるまで、縁の下の方持ち?として関わった関係上、この一文を書くはめになった。結晶学と薬学を研究している立場から、このシンポジウムの位置づけを述べてみたい。

結晶学の立場から見ると、X線結晶解析の手法の進歩により、低分子化合物は勿論のこと、生体高分子の立体構造の解明も比較的容易になり、その成果は飛躍的に増大しつつある。それらはデータベースとして蓄積され、利用に供されている。三次元グラフィック・ディスプレイをはじめとするコンピュータ・グラフィックスの進歩も著しく、結晶学の成果である分子の三次元座標を手軽に表示し、利用することを可能にし、分子の立体構造や分子間相互作用についての理解を深める役割を果たしている。また、コンピュータの質的・量的発展の目ざましさは言うまでもなく、量子化学計算、分子力場計算などの化学計算が日常的に行われるようになった。これには、方法論の進歩と共に、ソフトウェアの普及という点でプログラム交換システムであるQCPEの貢献が大きい。

薬学の立場から見ると、酵素と阻害剤分子といった複合体の結晶解析がそれまでカギとカギ穴の関係にたとえられて漠然と理解されてきた薬物とその標的受容体である生体高分子との関係に、具体的なイメージを与えた。すなわち、生体における分子識別や分子間相互作用にとって重要なのは分子の平面構造ではなく、立体構造であることが確認された。その結果、コンホメーション解析や三次元グラフィック・ディスプレイによるモデル・ビルディング、結合や反応のシミュレーションといった手法は、薬物の作用機作を解明したり、新しい構造を設計する上で不可欠なtoolとなりつつある。

分子設計とか薬物設計という言葉はかなり前から用いられていたが、ハワイにおいてアメリカ化学会主催で「Computer-Assisted Drug Design」シンポジウムが開催された1979年頃

を境に、その内容が大きく変化したように思われる。それまでは、薬物設計といえば、定量的構造活性相関(QSAR)に代表される統計的な手法で、同一系統の化合物で置換基等を変えて活性を最適化するやり方を指していた。それに対して、新しく展開されつつある分子設計は、コンピュータを用いて、立体構造の情報から分子又は分子系を空間的に記述し、それらのもつ様々な物理的・化学的性質を定量的に取り扱うことで、目的に適った分子を設計する助けにしようというものである。こういった傾向をもたらした原動力は何といっても、前述した諸分野の目ざましい発展であって、この傾向は今後ますます強くなるものと思われる。こうした現状認識のもとに、今回のシンポジウムにおける招待講演には、蛋白結晶学、結晶データベース、分子力場計算とコンホメーション解析、高分子の分子力場及び分子動力学計算、コンピュータ・グラフィックス、量子化学計算による酵素反応機構のシミュレーション、コンピュータ薬物設計の戦略と手法といったテーマを選んだ。

我が国におけるこの分野の研究はまだ始まったばかりといってもいい状態であるが、若干先をいっているはずの欧米においても、新しい手法による薬物設計で公表されているサクセス・ストーリーは実に少ない。

このシンポジウムが良い刺激となって、日本におけるこの分野の研究がますます発展することを願ってやまない。

*
* 情報化学部会部会員増加にご協力を! *
*
*
*
* 【昭和62年部会費】 正部会員 (日本化学会会員) 2,000円 *
* 準部会員 (日本化学会非会員) 3,000円 *
* 法人部会員 一口 30,000円 (一口以上) *
*
* ※ご入会を希望される方は、下記あて入会申込書をご請求下さい。 *
* ㊞101 東京都千代田区神田駿河台1-5 *
* 社団法人 日本化学会 会員部 (電話 (03) 292-6160) *
*

昭和61年8月18-22日にアメリカNew Hampshire州New LondonのColby-Sawyer Collegeで第一回のComputational Chemistryに関するGordon研究会議に出席する機会を得た。Gordon会議に就いては既にかなり良く知られていると思うが念のため概略を先ず簡単に紹介しておこう。1931年にJohns Hopkins大学にいたN.E.Gordonという人が社会及び科学上の緊急なトピックスに就いて世界のエキスパートを集めてインフォーマルな雰囲気の中で徹底的な議論を行う事が出来れば甚だ有益であろうと考えついた。そこで民間企業から当時のお金で千ドルずつの寄付を募ったところ数十社が応じてくれたのでそれを基金として独立の財団を作り、以後毎年おもに化学の重要な複数のトピックスについて合宿形式の会議が持たれるようになった。もう半世紀以上も続いていることになるが、Gordonの提唱した「インフォーマル原則」がよく守られていて、発表済みのデータを持ち出さないこと、印刷などの形で記録を一切残さないこと、ディスカッションに重点を置くこと、講演者や講演題目なども予め公表しないことなどが特徴である。会議は主として夏の間に行われるが、それはNew England地方にある小さなCollegeの学生寮を会場に利用して費用を安く上げるためである。個々の会議の期間は月曜日の朝から金曜日の昼までと決っていて、会費は三食付き一人275ドルである。部屋は決して良いとは言えないが、食事は良質かつ豊富であった。もう一つ面白いことには会議は朝9時から12時迄と夜7時半から9時半迄で午後は自由時間である。

今年は全部で128のトピックスが取り上げられ、New Hampshire州の11のCollegeに分かれて、6月の初めから8月の終わりまで行われた。トピックスは年によって入れ替えがあり、今年は計算化学以外にシウ酸カルシウム、固体イオニックス、物理電気化学等7つが新しく始まった。各トピックスへの参加者は約百人に限られのが原則だが、「計算化学」は非常に人気があり250人も申し込みがあったので特に150人が参加することを認められた。

さて、「計算化学」をGordon会議の新トピックスとして申請したのはK.Lipkowitz(Indiana-Purdue Univ.)とD.Boyd(Eli Lilly Co.)の二人である。今回はこの二人がCochairmenを勤めた。このコンビは1983年にもIndianapolisで「Molecular Mechanics(MM,分子力学)」に関する初の国際シンポジウムを主催したことがあり、今回のGordon会議はその発展的延長である。彼らの努力の結果、幸いにもGordon会議に採択されたのでこれからは2年に一度ずつ開催されることになったのは喜ばしい。ちなみに第二回会議(1988年)のCochairmenはD.BoydとP. Kollman(UCSF)に決まった。

今回の参加者の国別人数は次のようである。

アメリカ	118人
イギリス	8
西ドイツ	5
日本	3
カナダ	3
オランダ	3
イタリー	2
南アフリカ	2
イスラエル、デンマーク、フランス	各1

アメリカとその他の国の比率は約4:1である。2番目の「大国」は、イギリスであったが、ほとんどは製薬会社の研究員であった。日本からは筆者の外に平野恒夫氏（東大工）と柏木浩氏（分子研）が参加したが、僅かに3人と言うのは日本の情報・計算化学の実力から言って少な過ぎる。次回には大挙して参加したいものである。参加者の所属機関は大学及び公的機関と民間企業との比をほぼ1:1に調整したそうである。参加者の専門別の統計を取ることが出来なかったが、頭ぶれを見ただけでMM屋が大半を占めていたことは明らかであった。これは上にも述べたようにCochairmenが本会議をMMシンポジウムの発見的延長と考えているため及び計算機支援ドラッグデザイン(CADD)に携わる民間企業の研究員が多く参加したためであろう。量子化学(MO)者が少なかったが、これはほぼ同じ時期に伝統のある量子化学のシンポジウムがいくつも開かれているためもあるだろう。それでもHouk, Goddard, Allen, Lipscomb, Thiel, McKelvey Brooks, Cremerといった名立たるMOの使い手が顔を揃えていた。さすがにMMの方からは主だった人は殆ど全部参加した---Allinger, DeTar, van de Graaf, White, Gund, Meyer, Liljefors, Carter, Weiner等。MD, MCの方からはJorgensen, Kollman等が出席した。CADDの方は数が多く全部はととも覚えきれなかったが、よく見かける人としてはMartin, McCammonが出ていた。

会議の内容は講演が21件、ポスターが52件で1週間の会議としては適当な量だったと思う。先ずポスターの方は非常に広範囲のテーマが集まって盛況で、特にCADDが多かった。日本ではCADDは始まったばかりなのでまだ勉強に追われているという感じだが、アメリカ、イギリス、西ドイツでは各社で一応それぞれにシステムを作り上げて若い研究者が盛んに使い初めている様子が窺われた。講演を聞いて一番面白かったのはやはりグラフィック関係で、この分野の創始者の一人であるLangridgeがMITの第一号コンピューターから初めて分子モデリングの歴史を話した。彼はCalifornai大学San Francisco分校に強力な計算化学グループを作り上げている。その中で育った若手の一人Connollyは分子表面図に関する独創的な論文を度々発表するので名前を覚えていたが、彼の話も良かった。数種類もの新しい表面表現アルゴリズムをこの席で発表した。仕事の種類が全く新規な分野なので論文を投稿しても適当なレフェリーがないので困るとこぼしていた。

情報関係としてはCambridgeの結晶データセンターからWatsonという人がきていて、彼らのデータベースCSDを利用して有名なSuttonの結合距離表を作り直したという話をした。CSDには既に48,000の化合物が入っているが、そのうち原子間距離に関して特に精度のよい例を10,300選んで結合近傍の環境の影響を考慮にいれつつ広範囲の結合に関して統計的に意味のある距離表を作ったということだった。この新しい距離表は例えばMMの「標準結合距離」を決める際に役立ちそうである。たまたま一週間後に東京で行われた第八回IUPAC物理有機化学国際会議（委員長大木道則教授）に出席した時にSchleyerが特別講演でab initio計算によって多くの元素の組合せに対して結合長を求めたと話していた。WatsonとSchleyerの表を比べてみると面白いだろう。

「古典的」な方法論の講演の中ではやはりAllingerのMMの話が一番活発な議論を巻き起こした。MM2の改良とMM3開発の経過報告であったが、例によってパラメーターの問題が質問に出て紛糾したので翌日の午後特別に時間を取って希望者によるミーティングを開くことになった。結局このミーティングにはほぼ全員が出席して、KollmanとAllingerが進行係を勤めた。一部の人たちがとにかくパラメーターをもっと能率良く沢山作ることを要求し、大学関係のMM屋たちが「パラメーター作りはTechnologyではなくて依然としてScienceだから、そんなに簡単に出来るものではない」と宥めに回ると言ったパターンに終始した。この点に関しては一向に目新しい知識は得られなかったが、この場でBiosym, Polygenといった会社がパラメーター作りを含めて分子力学を道具として商売を始めた或は始めようとしていることを知った。MomanがQCPEの様な機関がパラメーターの評価を行ったらどうかと提案したが、Countsは自分の仕事はプログラムの頒布だけだと言って断わった。

Countsの名前が出たついでに付け加えると、QCPEを創始したこのentrepreneurに初めて合うことが出来たのは大きな収穫だった。と言うのは、彼は手紙を書くのが苦手な日本からでは意志の疎通が旨く行かず、以前から会って話をしたいと思っていたからである。私が日本国内でCCPE(Computational Chemistry Program Exchange)機構を作って主として国産パソコン用分子計算プログラムと日本語マニュアルの実費頒布を本格的に始めたいという話をしたら真面目に賛成してくれた。QCMPプログラムを利用する場合には原著者の了解さえ取れば良いとのことであった。

MMに関する話題はこれくらいにして、半経験的MOの方ではStewartがMOPACに高分子計算機能を取り入れた話などをした。但しこれはFloryの近距離相互作用行列法の拡張に過ぎないことが解ってがっかりした。MOPACプログラムは非常に高いpotentialityを秘めているのだが何分にも虫が多く、我々も随分苦労して最近やっと一応の手直しを終了して分子研のライブラリーに入れて頂いた所だったので、訂正部分をどの様にしてdistributeするかに就いて平野先生にも加わって頂いて後で3人で話し合った。その結果我々の修正点を全部Stewartに渡して改良版をQCPEから出して貰うことにした。彼はGlasgowを引き払ってアメリカ空軍アカデミーに強力な計算グループを作っているようである。ついでに内緒話をする

と最近QCPEから出たAMPACというプログラムはMOPACの旧版の無責任な焼き直しに過ぎないので彼としては極めて不愉快であると言っていた。

~~あまり長くなるのでMOの有機合成支援プログラムの話の紹介は今回は残念ながら省略せざるを得ないが、最後に~~ 柏木氏のスーパーコンピューターに関する講演があった。日本では八月末の時点でパブリックドメインにあるスーパーコンピューターの数が15に達するのに対してアメリカでは僅かに7に過ぎないという事実が披露された。

外国の国際会議に出かけるメリットの一つは不断忙しくてすれ違いばかりの日本人と会えることである。今回も平野、柏木両先生とゆっくり話をすることが出来た。その際にComputational Chemistryに対してよい訳語がないことが問題になった。「計算化学」は日本語として軽過ぎるのももう少し感じのよい言葉が欲しい。漢語の独創的な組合せを発明するのが望ましいと言う点で意見が一致したが、さて良い言葉が見つからない。当部会の皆さんのお知恵を拝借したいものである。

振り返ってみてこのような質実簡素な合宿であればわれわれでも十分に開催できると感じた。日本化学会東北支部の夏のコロキウムもこのGordon会議にヒントを得たと聞いている。情報部会の目玉行事の一つとして計画してみたらどうだろうか？最後に旅費を支給して頂いた文部省当局（国際研究集会派遣）に厚く感謝の意を表す。

10月20日から24日まで西ドイツで開催された「Computational Methods in Chemical Design: Molecular Modelling and Computer Graphics」という国際会議に出席した。場所はミュンヘンから南へ約120km, 鉄道で1時間半位, オーストリアとの国境に近いアルプスの山の中にあるクライスという村で, そこにある Schloss Elmau という名のホテルで行われた。参加者は総勢約180名でかなりの盛況であり, 内訳は西独90, 米国20, オランダ14, スイス12, 以下英国, スウェーデンと続いていたが, アジア圏からは中国及び日本各1名のみであった。全部で招待講演15件, 一般講演19件, 及びポスター30件の発表があったが, 会議の主題は次の4つに大別される

- (1) X線結晶構造に基づく分子モデリングと構造活性相関
- (2) MDやNMRによる溶液構造
- (3) エキスパートシステムを含むデータベース
- (4) グラフィックスやスーパーコンピュータなどハードウェアシステム

計算法という会議の題名からはMOやMMに関する計算化学が多数を占めるものと期待していたが, MOに関する発表は2件, MMも3件のみであった。全体的に口頭, ポスター共にコンピュータグラフィックスを用いた分子のモデリングに関するものが多く, これらについては特に新味は感じられなかった。Evans & Sutherland 社や Chemical Design 社のソフトウェアのデモンストレーションも行われていたが, 分子のモデリングに関する限り, コンピュータグラフィックスはもう十分進展しているという印象を受けた。ハードウェアについては分子のモデリングの目的には欧州でもVAXとE&Sという組み合わせを利用している所が圧倒的に多かった。

筆者はアミド基に関するMMパラメータの最適化について発表したが, パラメータのリストの希望者は名前を書くように欄を設けたところ, 10名以上から申し込みがあった。どうやら欧米でもこの種のパラメータの入手は誰も苦勞して行っているのが通常であり, 筆者のような発表は至極奇特なものと受け取られたようであった。

第9回情報化学討論会をふりかえって

豊橋技術科学大学・佐々木 慎一

船 津 公人

第9回情報化学討論会をふりかえるに当り、まず会場をご提供下さった名古屋工業大学の諸先生及び種々の御協力を頂いた関係の皆様には深く感謝致します。

さて今回の討論会では昨年を上回る51件の講演申込みを頂き、世話人一同、情報化学へのこの大なる期待に対し、効果的で質の高い講演発表・討論の場をどのように設けるかという観点で特に配慮を行なった。これだけの件数をただ単に口頭発表として連ねるだけでは当然十分な討論は望めないであろう。同時に従来より講演討論のための時間が短く討論会の名にふさわしくないとの御意見も多く、したがってこの点を考慮し今回から講演18分・討論7分の計25分とした。結果として口頭発表に加えてポスターセッションを新たに設けた。ただ通常の口頭発表との間に公平さを欠く事がないようにとの観点からポスターセッションが行なわれている時間帯での口頭発表は取り行なわない事になった。同一グループからの複数の申込みもいくつか見うけられたが、口頭発表とポスターセッションとにふり分けさせて頂いたりもした。これらのプログラムによってそれぞれの研究テーマについて深い討論がなされたようであり、世話人として今回の企画の成功に満足した次第である。特にポスターセッション会場での予想をはるかに上回る参加者と各ポスター前での積極的な討論の雰囲気は口頭発表では得難いものがある事を如実に示していたと言えよう。今後ともポスターセッションの継続を望みたいものである。しかしながら反面、口頭発表会場、ポスターセッション会場ともに参加者数に比して多少狭かった事は世話人として企画の際の熟慮に欠ける面があったと率直に反省せねばなるまい。年々講演申込み、参加者と増加するにつれ、その顔ぶれにも変化が見られて当然であろう。今回も講演申込みに新しい顔ぶれが目についた。情報化学討論会の今後の一層の活性化を考え合わせる時、世話人として、これらの事実に対して考えるべき事は多いように思う。

第14回構造活性相関シンポジウムを終えて

豊橋技術科学大学・佐々木 慎一

高橋 由雅

標記シンポジウムは、去る10月18、19日の両日、日本化学会の秋季年会における連合討論会の一つとして名古屋工業大学にて開催された。本シンポジウムは、第9回（豊橋）より講演発表を依頼形式から公募形式に改めると同時に、情報化学討論会との併催の形で開催されるようになって5度目を数える*。

さて、今回のシンポジウムにおける講演内容から見た発表件数は、(1) QSAR解析（パターン認識も含む）：9件、(2) パラメータ：7件、(3) 手法に関するもの：4件、(4) コンピュータシステムの開発・応用：4件、(5) その他：3件となっており、全発表件数は26件であった。

今回は、併催の情報化学討論会が会期を1日延長し、10月17日—10月19日の三日間の開催となったため、本シンポジウムは二日間とも情報と平行して講演が行なわれたにもかかわらず両日とも300名を超える参加者を得て活発な討論が行なわれた。このことについては、情報化学討論会での関連の発表とのプログラム調整を行ない、討論会初日に構造活性相関関連の講演を集めるよう工夫・配慮したつもりであるが、平行開催のために聴衆が減りはしないかというのが一番の心配事であったことも事実であり、上記結果を得て世話人一同、胸を撫でおろした次第である。

また、情報との合同特別講演として、最近、化学研究においてもその発展・応用が期待されている人工知能、およびタンパク質に関する話題を取り上げ、「人工知能(AI)とその動向」（東京電機大・上野春樹教授）、「タンパク質の立体構造と分子設計」（姫路工大・安岡則武教授）の二題を企画し、両先生の御快諾を得て無事開催の運びとなった。いずれもホットな話題であることから、参加者の大きな関心を集めたことは筆者らの喜びとするところであり、講演依頼を御快諾下さった両先生に改めて御礼申し上げる次第である。

尚、本シンポジウムの情報化学討論会との併催についての長所・短所に関する議論も耳にするが、本シンポジウムの講演内容の推移、並びに情報化学討論会での関連発表の増加（今回は構造活性相関・分子設計関連の講演が16件）を見るにつけ、今後の発展に十分な期待を抱くものである。

次回シンポジウムは北里大学・森口郁生教授の御世話の下で、今回同様に情報化学討論会（この方の世話人は電気通信大学—山崎昶助教授）との併催の形で開催されることとなった。益々の発展を期待する次第である。

最後に、参加予約申込み手続きの案内に際し、配慮に欠ける面のあったことをお詫びすると同時に、本シンポジウム開催に当り、御尽力・御協力頂いた関係各位に御礼を申し上げて本報告を終える。

* 第11回は特別講演会形式で第12回大会と同年（昭和59年）に本シンポジウムのみが開催されたため。

**CHEMICAL STRUCTURES:
THE INTERNATIONAL LANGUAGE
OF CHEMISTRY**

**Sunday 31st May
to
Thursday 4th June 1987**

**LEEUWENHORST CONGRESS CENTER
NOORDWIJKERHOUT
THE NETHERLANDS**

The joint sponsors of this conference are the American Chemical Society Division of Chemical Information, the Chemical Structure Association and the Chemical Information Groups of the Royal Society of Chemistry and the German Chemical Society.

Subjects to be covered include substructure searching methodologies (for both molecules and reactions), databanks, new technologies (including micros, optical disks, parallel processing and expert system), access to integrated in-house databases, end-user searching and human factors. Technical sessions will be held mainly in the mornings and evenings.

Mr. C. Citroen
Center for Information and Documentation
TNO, P.O. Box 36
2600 AA Delft
THE NETHERLANDS

The closing date for application is 31st March 1987.
After January 15th all charges will increase by 20%.