

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
Chemical Information and Computer Sciences
The Chemical Society of Japan

計算化学 特集号

日本化学会
情報化学部会

Volume 6, Number 1
January 1988

目 次

特集：計算化学

「計算化学」特集に寄せて.....大 沢 映 二 1
田 辺 和 俊

プログラムカタログ..... 2

平 野 恒 夫 岩 田 末 廣 内 田 希
豊 田 二 郎・井 畑 敏 一 高 窪 正 明・渡 辺 好 夫
小 川 桂 一 郎 都 築 誠 二 大 沢 映 二
中 馬 寛 八 尾 徹

企業における計算化学の現状 23

旭 硝 子 ㈱ エ ー ザ イ ㈱ 花 王 ㈱ 協和醗酵工業㈱
キリンビール㈱ サントリー㈱ 塩野義製薬㈱ 住友化学工業㈱
第一製薬㈱ 大正製薬㈱ 武田薬品工業㈱ 帝 人 ㈱
東 芝 東洋紡績㈱ 東 レ ㈱ 日本化薬㈱
藤沢薬品工業㈱ 松下電工㈱ 三井東圧化学㈱ 三菱化成工業㈱
三菱油化㈱ 持田製薬㈱ 明治製菓㈱ 山之内製薬㈱

年会プログラム..... 43

関連行事 46

「計算化学」特集に寄せて

大沢 映二（北大理）、田辺 和俊（化技研）

情報化学部会は情報に限らず何等かの形でコンピュータに係わりや関心のある化学者の集まりである。その意味では「計算機化学」部会としての側面も合わせ持っている。「計算機化学」と「計算化学」はよく似た言葉であるが、違う意味に使われている。前者が広い意味でコンピュータと化学が接触する領域を指すのに対して、後者ははるかに狭い意味に用いられていて「計算機応用理論化学」のことである。具体的にいうと Journal of Computational Chemistry という雑誌があるが、そこに掲載される論文で扱っている中味が計算化学の現在の研究範囲と水準を反映していると思われる。

計算化学の真髄は化学の研究に対してコンピュータを介して理論化学の成果を積極的に適用し、化学全般の精密化志向を推進するところにあると考えられよう。計算化学における最も大切な道具がコンピュータであるのは当然であるが、概して計算化学者はハードウェアとしては売っているものを買ってきてそのまま使うだけであって、彼らの死命を制している肝心の道具はプログラムである。その意味で化学プログラムの頒布機構 Q C P E が計算化学の普及と発展に果たしつつある役割は計りきれないほど大きい。一方、情報化学部会員の中で計算化学に関心をお持ちの方の大半は産業界で分子モデリング関連業務に従事する人達であろう。分子モデリングにおいては華やかなグラフィック画面が主役なので余り気がつかないかもしれないが、背後では Q C P E プログラムが縁の下の力持ちを果していることが多い。

本特集ではまず「プログラムカタログ」と題して主として Q C P E プログラムの紹介を企画した。これは計算化学のプロにとって up-to-date な情報を提供すると共に、時には分子モデリングの縁の下にも陽を当てようという願いからである。この企画を 10月号のニューズレターで発表したところ、幸いにして多くの方々が応募して下さった。またこれとは別に岩田末廣先生（慶応大理工）には数少ない国産大型プログラムの一つである M O L Y X に関して特別に御寄稿を頂いた。ついで「企業における計算化学の現状」として各企業で分子設計などの業務を担当しておられる方々に現場の声をレポートしていただいた。

本企画はお忙しい中を執筆にご協力いただいた方々の努力の賜である。ここに記して厚く御礼申し上げます。

「プログラムカタログ」

<GAUSSIAN 86: 東大工・平野恒夫>

GAUSSIAN 86は Popleグループによって開発されてきた汎用 ab initio分子軌道法計算プログラムパッケージ GAUSSIANシリーズの最新版である。1970年の GAUSSIAN 70に始まり、76, 80, 82と版を改めてきた。GAUSSIAN 82からエネルギーの二次微分が解析的にできるようになり (MP2まで)、単に全電子エネルギー、分子軌道関数、電子密度分布、双極子能率が求まってオシマイという従来型のいわば「裸」の分子軌道法プログラムから、基準振動解析、熱化学諸量まで求まる文字通りの総合的な ab initio分子軌道法計算プログラムパッケージに変身した。GAUSSIAN 80以来の簡単な入力形式と相まって、GAUSSIANシリーズは最もよく使われている計算化学用プログラムの一つになっている。

GAUSSIANシリーズは80までが QCPEから実費で、82以降はカーネギー・メロン大学とライセンス契約を結んだ上でソースコードを手に入れることができる (GAUSSIAN 86: 大学関係 300ドル、企業 2000ドル)。とかくこの種のプログラムのソースは用済みになるまで開発者の周辺関係者以外には公開されない現状を考えると、ライセンス契約下であるとはいえソースコードの公開は画期的なことである。

GAUSSIAN 86としては現在 VAX/VMS版 (マイクロVAXでも走る)、CRAY-1および CRAY-XMP/CTSS版、IBM/MVS版ができています。東大の大型計算機センターでは理研の野村興雄先生と私で IBM版から HITAC-M680/VOS3への移植を始めている。まだテープが届いて一週間も経っていないのでその使い勝手を云々する立場にないが、マニュアルおよびプログラムのコメント文から読みとった機能を表1にまとめてみた。この IBM版は31ビットの拡張アドレッシング (XA) にも対応できる構造になっているが、GAUSSIAN 82と同様にシステムマイクロをふんだんに使った膨大なアSEMBラー部分があり、オペレーティングシステムを巻き込んだダイナミックリンキングをやっているの、コンパチなはずの HITACや FACOMでさえ移植には多大な困難が予想される。

GAUSSIAN 82と比較して計算アルゴリズムを始めとして種々の改良が施されているということであるが、なかでも SCF計算部分にMOPAC (現在もっともよく使われている半経験的分子軌道法汎用プログラムパッケージ) のルーチンが取り込まれたことの意義は大きい。ab initio分子軌道法計算用の初期構造の最適化および ab initio計算に必要な初期波動関数の計算を所要時間が格段に短くてしかも chemical accuracyを誇るMNDO法、AM1法で済ませることができる便利さもさることながら、GAUSSIAN 86パッケージさえあれば小さな分子には ab initio法を、大きな分子にはMOPACをと使い分けることができるので、従来のように GAUSSIAN 82 (小分子用)、MOPAC (大分子や高分子用) と2本のプログラムを整備して持つ不便さから開放されたことになる。

よく量子化学計算を行った論文にはおどろおどろしい名前前の基底関数を使っておどろおどろしい計算をやったように書いてあるので気おくれた方々が多いと思う。例えばである。ホルムアルデヒド分子について Triple-Zeta型の基底関数 6-311 (基底関数とは厳密でない言い方をすれば拡張された原子軌道のことである) の他に、水素原子にも水素以外の原子 (重原子と呼ぶ) にも分極関数 (**で表す) とdiffuse関数 (++で表す) をつけ加えて、一から四電子励起配置まで考慮した4次のMøller-Plessetの摂動計算をやりつつ構造を最適化するための入力データは実は図1に示すような簡単なものです。せっせと黙って忠実に計算に励んでくれるの

表 I GAUSSIAN 86 の機能

- ① エネルギーおよび分子軌道計算
ハートリーフォック計算: RHF, UHF, ROHF法
多配置原子価結合軌道法: GVP-PP法
- ② 計算方法
GTOによる ab initio計算、ただしMNDO, AM1, MINDO/3など(半経験的分子軌道法パッケージMOPACの一部)を内蔵
- ③ 基底関数
STO-3G ~ 6-311(++)*G**, Dunning基底、擬ポテンシャル関数(3種)などを内蔵。適当なGTOセットの入力も可。
- ④ 電子相関の計算 (Post-Hartree-Fock計算)
Møller-Plesset摂動法: MP2(2次), MP3(3次), MP4(4次)
CI法: CIS(一電子励起配置)、CISD(二電子励起配置まで)
CCD(二電子励起配置を用いる Coupled-Cluster法)
- ⑤ 構造最適化(エネルギー勾配法)〔解析的、数値的〕
基底状態、遷移状態: MP2, CISDまで解析的一次微分を使用
- ⑥ 力の定数、基準振動解析〔解析的、数値的〕
RHF, UHFでは解析的
→ 赤外・ラマン振動数および強度
→ エンタルピー、エントロピー、分配関数
- ⑦ 一電子物性
電子密度分布、Mullikenポピュレーション解析、多極子能率(双極子~16極子)、電場、電場勾配、分極率、Hyperpolarizability
- ⑧ ポテンシャル表面のスキャン
- ⑨ 溶媒効果(分布した点電荷からの電場を取り込む方法)
- ⑩ 電場下の電子状態の計算
局在化軌道(Boysの方法)
など

はコンピュータの方であって、計算をさせた当人は一番最初の行(＃で始まる)にオプションをいくつか羅列したに過ぎないのである。

もちろん実際には計算上の戦術や計算結果の解釈に関するノウハウがあって、試薬を使う実験と同様に計算の方でも多大の試行錯誤をしいられることになる。初めは先達に教えてもらいながらしばらくプログラムを使いこむと自然にカンが養われてくる。NMRの理論やNMRの測定装置の仕組みを知らなくても自分の合成した新規化合物をNMRで同定できるようになるのと一緒である。GAUSSIAN 86のユーザーズマニュアルの序文には「GAUSSIAN 86はユーザーのニーズを心において設計されている。我々の果たした努力によってすべてのユーザーが計算遂行上のメカニズムに対してではなく、計算を化学に応用することに自己のエネルギーを集中できるようになることを著者達は願っている」と書いてある。

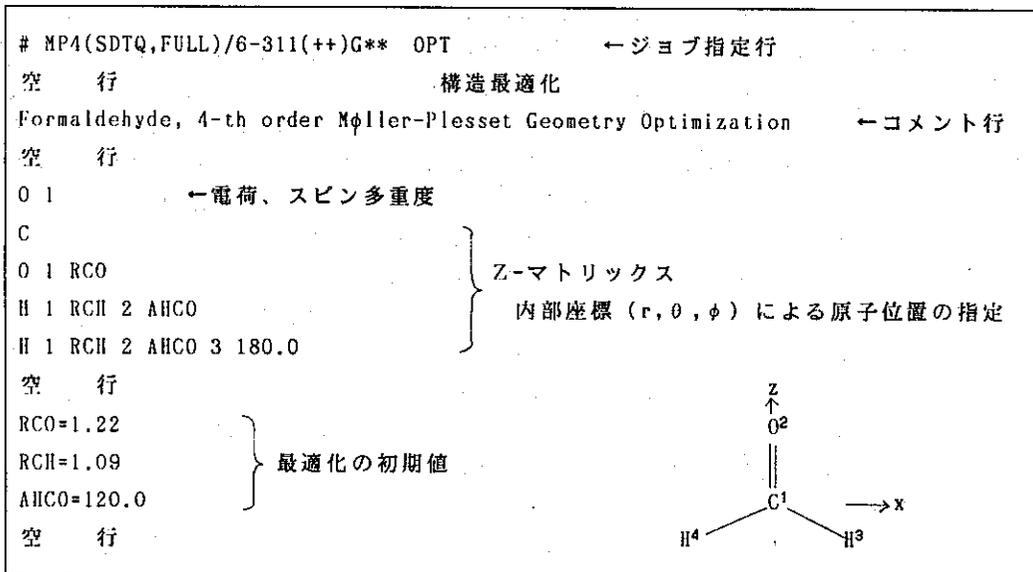


図1 GAUSSIAN 86 入力データの一例

試薬が手に入らなくて計算はできるのである。もしかしてひよっとするとひよっとするかもしれない未知化合物を考えたら、さっそく計算してみるのもおもしろい。皆さん、ひとつ「計算による化学」に挑戦してみませんか？

<MOLYX : 慶大理工・岩田末廣>

非経験的 (ab initio) 分子軌道のプログラムシステムはすでに完成の域にあるといわれるほど完備している。特に Pople 研によって開発された GAUSSIAN シリーズは市販もされており完成度は著しく高い。わが国でも多くの計算機センターに導入されて広く利用されているので、ここで紹介するまでもないであろう。わが国の研究者によって開発されたものもある。北大火野研究室によって開発された JAMOL, MICA3, KAMUI の流れをくむもの、東大の小杉によって開発された GSCF-CI などである。ここではこの数年間私の研究室で開発している MOLYX と呼んでいるプログラムシステムについて紹介する。数年前私が慶応に移ってプログラムの開発を始めたとき一つの決断をした。それは 16 ビット計算機では科学計算をしないことであった。32 ビットミニコンピュータが必ず安価に出回ると判断したからであった。この判断は今年になって正しかったことが証明されたと思っている。MOLYX は主に VAX11/750 で開発されてきたが、この 3 月からは SONY NWS830 に開発の中心が移った。

MOLYX は ab initio SCF-MO and CI 計算をするプログラム群である。GAUSSIAN シリーズのようなすばらしいプログラムがあるのに何を今さらという声がかかるであろうが、幾つかの目的をもってこのプログラム群をこの数年作ってきた。また今後もさらに発展、改良させていくつもりである。目的の一つは教育にあるので必ずしも高速化やスーパーコンピュータの効率利用にはなっていない。もちろん部分的にはベクトル化を意識している。簡単に MOLYX システムの作成にあたっての考え方と現状のプログラム構成の概要を紹介する。

M O L Y X は理研版 GAUSSIAN 70 と EFCI から出発している。名前は MOlecular orbital calculation program developed at Yagami, Keio を無理して略したもので、最後の X には幾つかの意味を持たせている。M O L Y X の特徴（あるいは目標といった方がよいかもしれないが）は 1) 移植性、2) 拡張性、3) 使いやすさである。1) と 2) はかなり実現されていると思う。3) も学部 3 年生の実習に利用している経験からいって初期の目的は達成されている。ただし 3) については後述するように利用する O/S に依存する。NWS830 上では基底関数の数の上限を 70 とした Load Module を作っている。ST03G を基底関数としたベンゼンの SCF MO を求める計算は約 20 分かかる。CI 計算は 3000 次元程度ならルーティン的に実行できる。NWS830 や SUN3 程度のミニコンピュータはプログラム開発のみならず予備計算や「論文になる」非経験量子科学計算に使うことができる。数年前計画した 32 ビットミニコンピュータで使える ab initio program は実現したと思う。Desk top ab initio machine と呼ぶにはまだ速度が遅いが、有機化学者が mass spectrometer や NMR を使うのと同じように Desk top ab initio machine を使うのは時間の問題であろう。各項目について説明した後でプログラムの内容を紹介する。

1) 移植性 (portability) の良さを保つために、

① すべて FORTRAN 77 によって書かれている。FORTRAN 77 が最良とはいわないが、現在での科学技術計算用ではしかたないであろう。またどうしてもシステムに依存してしまう部分は一つの file に納めている (vaxlib, hitlib, faclib)。他の機種への移植は本質的にはこの部分だけを書き換えるだけでよい。このような部分は FORTRAN が不得意とする記述を必要とし、本来なら C で書くべきなのであるが、C compiler を持たない計算機がまだある (!) 現状では改善の策となっている。

② 標準 DISK I/O を IOLIB というプログラム群で管理している。FORTRAN 77 の OPEN 文を使って files を各 unit に割つけているので、FORTRAN 77 の OPEN 文を完全に満たしている (いわゆる dynamical allocation ができる) 時には unit 番号を意識せずにプログラムを書くこともできるし実行することもできる。しかしながらこれも現状では大型機では dynamical allocation が事実上できない (使いにくいし、機種やセンターに依存する) ので IOLIB ではこの対策もしてある。このためプログラムは汚くなるし読みにくくもなっている。

③ 他の多くの ab initio プログラムと同様に沢山の Tasks から M O L Y X は構成されている。また各 Task は独立を保っているので必要な Tasks のみを移植することも容易である。ミニコンへの移植をするときにこの点は便利である。

④ ほとんどすべての DIMENSION と COMMON 文は PARAMETER 文で定義された parameters によって大きさが決められている。この結果プログラムの大きさの変更が容易で、利用できるメモリーの大きさに合わせることができる。特に UNIX にある stream editor (sed) が使えると非常に便利である。実際我々が分子研にプログラムを運ぶときには sed を使った change.big なるコマンドを通して、さらに tr コマンドで小文字から大文字に変更を行ってから floppy に移している。分子研でこの作業をするとファイルの多さもあって少なくとも何時間か ASPEN と戯れなくてはならなくなる。移植の容易さは初期の目的を達成できたと思っている。CONVEKX 社の CI, ALLIANT および SONY 社の NEWS への移植はコピーすることを含めて 3 時間ほどで計算の実行を開始することができた。共に UNIX を O/S としているからともいえる。

2) 拡張性とここでいうのは研究課題に応じてプログラム単位 (Task と呼んでいる) をつけ加えていくことをいう。現実の研究過程では学生 (研究者) が課題に応じて M O L Y X 本体とは独

立して新しいプログラムを書く。このプログラムが一般性があれば容易にMOLYXのTaskとして追加できるようになっている。このことを保証するためにTask間のデータのやりとりはMaster fileと呼んでいるDirect access fileで行っている。IOLIBがこれを管理しているがmember nameでI/Oができるので、codingに際してもrecord numberを意識する必要は全くないし、recordの割つけも必要ない。後に述べるようにできる限りDocumentationも同時に作るようにしているが、その中にはprogrammer's manualも含んでいる。IOLIBとCARDLIBのmanualを手元におけば自分のプログラムをMOLYXのTaskに化けさせることができる。

3)使いやすさを実現するために、

①データの形式はfree formatを原則にしている。これはCARDLIBルーチン群が管理している。これを用いてTASKを作る際に少々煩わしい面もあるが、入力データを作るときには分かりやすくなっている。データはTSSで作ることを前提にしているので、適宜コメントを入れたりデータ行全体をコメントに変えたりすることが簡単にできる。

②Task名やデータは計算内容を明瞭にしてあまりblack box的にしていない。これはroutineになった時は煩わしく使いやすさに反しているかもしれないが、教育的な意味を持たせるために行っている。

③master file(direct access file)のfile nameさえ入力すれば、実行するTasksによって生成されるmembers(master fileの中の)やsequential filesのfile nameは自動的に作成される(もちろん変更も可能)。UNIXやパーソナルコンピュータのFORTRAN 77のようにOPEN文を使ってFILEをOPENできる計算機(センター)ではJCLカードがなくなりfile管理も著しく簡単になり、MOLYXの利用者はfilesを使っていることを全く意識しないでよい。

UNIXの文書作成ソフトウェア roffを使ってmanualを書いてある。これをon-line manualとすることもできる。manualは現在4章からできている。1)MOLYX SCF, 2)MOLYX CI, 3)DATA EXAMPLES, 4)FOR PROGRAMMERS。これらは分子研計算機センターに登録してあるので興味のある方はご覧になれる。東大計算機センターにも登録しなければならないのだが遅れている。88年3月までには登録する予定である。DATA EXAMPLESには分子研センター用とUNIX用が示してある。特にCI計算で遷移モーメントを計算する例について両者を比較してもらくと、JCLというものがいかに時代遅れになっているかが分かると思う。

現在使える主なTasksは下記の通りである。1)GEOMETRY, 2)BASIS SET, 3)ONE ELECTRON INT, 4)TWO ELECTRON INT, 5)PROPERTY INTEGRAL, 6)CLOSED SHELL SCF, 7)OPEN SHELL SCF, 8)UHF, 9)GVB PERFECT PAIR, 10)SECI FROM CLOSED, 11)SECI FROM TRIPLET, 12)POPULATION ANALYSIS, 13)SPHERICAL DENSITY, 14)LOCALIZED MO, 15)ELECTRON HOLE POT, 16)VALENCE VACANT, 17)MANY BODY PT, 18)MO TRANSFORMATION, 19)CSF GENERATION, 20)REFERENCE CI, 21)MATRIX EVALUATION, 22)EIGENVALUE, 23)CI PROPERTY。これらはこのままデータとなり、後は量子化学の常識に従って順番に入力すればよい。GEOMETRY TaskやCSF GEN Taskなど自明なものを除いてほとんどの場合データが不要なので、データfileを作るのは簡単である。

MOLYXシステムは大学関係には無料で頒布しているが、民間にはまだ方針を決めていない。SONY NWSへは3.5インチフロッピー3枚でsource file, makefile, load.module, on-line manualなどが納まる。

MOLYXの開発には私達の研究室の計算機環境が重要であった。この環境を作る上で佐藤信行君の貢献を記しておかなくてはならない。この環境を作る上での苦労話は分子科学研究所

計算機センターの「Supercomputer Workshop Report 5」にのっている。また IOLIBの主要部分は長村吉洋博士によって書かれたことも記しておく。

＜M N D O：長岡技科大・内田 希＞

M N D O (Modified Neglect of Diatomic Overlap) 法¹⁾は1977年 M.J.S.Dewarによって、実験的に求まる物理量を高精度で再現することを目的として開発された半経験的分子軌道計算 (Semi-empirical LCAO-SCF-MO) 法である。

1950年代 C.C.J.Roothaan²⁾によって量子力学的計算を多原子分子系に適用するより一般的な SCF-MO法が提案され量子化学発展の道が示された。しかしながら量子力学の原理のみに基づいて分子の電子状態を計算する *ab initio* (非経験的、“はじめから”) 法では一般的な化学者の興味を満足させるためには莫大な計算量 (計算費用) が必要であったため、より少ない計算でより良い結果を得ようとする半経験法が提案されるようになった。その初期における代表的なものとしては J.A.Popleらによる C N D O / 2, I N D O, N D D O 法³⁾がある。これらはいずれも計算中に現れる大量の積分の大部分を無視し、残った積分は厳密に計算するか実験値を基にした経験的なパラメータで評価することによって、少ない労力で *ab initio* 計算の結果を再現しようとしている。

これに対し Dewarは経験的パラメータの導入を積極的に利用し、分子構造、生成熱、結合の力の定数など実験的に求まる物理量を高精度で再現するという観点から、I N D O法に手を加えた M I N D O / 3 (Modified INDO) 法⁴⁾と、N D D O法を基に M I N D O / 3法と同程度の信頼性を持つとされる M N D O法を開発した。M I N D O / 3法は有機化学の分野において大きな成果を上げたが、近似の性格上、元素の組合わせそれぞれについてパラメータを決定しておく必要があり、有機化学以外の分野への適用には制限があった。一方 M N D O法は数年おかれて発表されたが、M I N D O / 3法よりも近似が精密化されており、M I N D O / 3法のような元素の組合わせの制限がなく無機化合物の計算も可能であるため、使用される度合は M I N D O / 3法を抜き、現在最も一般的で信頼性の高い半経験的分子軌道計算法とされている。

計算プログラム：M N D O法の計算プログラムは FORTRANで書かれたものが Quantum Chemistry Program Exchangeより QCPE 353⁵⁾として入手可能であるが、発表後も原子パラメータが追加され続けており、また使いやすさの点からも後で紹介する M O P A Cプログラムの中で M N D O計算を行うことをお勧めする。QCPE 353を用いる場合 FORTRANプログラムは約5300行。計算可能な最大原子数を100、軌道数を250に設定すると計算機上のメモリーとして3メガバイト強が必要となる。また Si₂OFe₆分子の計算は日立の HITAC M-280Hを使用して97秒で終了した。M N D O法を使用した場合の CPU時間は系の大きさにも依存するが、4-31G基底関数を用いた *ab initio*計算と比較して数十から数百分の一ですむ。

入出力データ：分子あるいはイオンの基底状態の計算を行う限りは入力、出力とも量子化学の専門知識がなくとも化学の一般的知識で十分自分で作成し理解することができるようになっている。1) 入力データ：基本的に必要なものは分子あるいはイオンの電荷、構成原子の空間座標のみである。原子の種類は原子番号を入力し、その座標の定義は核間距離、結合角、二面角 (ひねり角) を用いた内部座標系により行う。ただしオプションとして XYZ座標系による入力も可能である。核間距離、結合角などのデータは既知の化合物の実験データを基に初期値を入力しておけば計算の中で系の全エネルギーが最も低くなるように構造の最適化が行われる。2)

出力データ：基本的な出力としては系の標準生成熱、最適化された分子構造、分子軌道（LCAOの係数）、各原子上の形式電荷、双極子モーメント、イオン化ポテンシャルが得られるが、利用者の興味に応じて入力時のオプション指定を加えることによりさらに詳しい情報を得ることもできる。

結果の信頼性：半経験法であれ ab initio法であれ、このような理論計算では計算機から出力された結果を鵜呑みにするのはかなり危険なことである。MNDO法の結果は実験値を再現するという点で ab initio法をしのぐことも多いが、適用する系の求めたい物理量についてよく似た系の既知の分子によって信頼性の確認をしながら計算を進めることが必要と考えられる。

1) M.J.S.Dewar, W.Thiel, J.Am.Chem.Soc. 99, 4899 (1977).

2) C.C.J.Roothaan, Rev.Mod.Phys. 23, 69 (1951).

3) J.A.Pople, D.L.Beveridge, "Approximate Molecular Orbital Theory", McGraw-Hill, N.Y. (1970).

4) R.C.Bingham, M.J.S.Dewar, D.H.Lo, J.Am.Chem.Soc. 97, 1285 (1975).

5) W.Thiel, QCPE, 15, 353 (1987).

<MNDOC：阪大教養・豊田二郎、井畑敏一>

MNDOC法¹⁾は西ドイツ Bergische Universitätの Walter Thielにより1981年に開発された半経験的分子軌道法の一つであり、MNDO (QCPE#353)²⁾をもとに電子相関の項を計算に取り入れたものである。MNDOC近似においてはSCF計算（規定値）以外に minimal CI計算と振動計算が行えるようになっている。振動計算法としては RSMP法、RSEN法、BWMP法、BWEN法（規定値）の4種が選択できるが、BWEN法が主に使用されている（RS: RAYLEIGH-SCHROEDINGER TREATMENT, BW: BRILLOUIN-WIGNER TREATMENT, MP: MOLLER-PLESSET DENOMINATORS, EN: EPSTEIN-NESBET DENOMINATORS）。このプログラムではMNDOC以外にもパラメータの選択によりMNDO (SCF, minimal CI)、MINDO/3 (SCF, minimal CI)、CNDO/2 (SCF)計算も行える。パラメータの規定値がMNDOC法でなくMNDO法であるところが注意すべき点である。つまりMNDOC計算よりもMNDO計算を行うためにこのプログラムが使用されることが最も多いのではないだろうか。実際 CASでの検索（106巻、107巻、87年12月17日以前のもの）ではこの1年間にMNDOのキーワードで159件の論文が登録されていたのに対し、MNDOCのキーワードでは5件³⁾しか登録されておらず、そのうちの2件は W.Thielによるものである。MNDOC近似の使用は意外と少ないようである。以下ではMNDOCプログラムの使用法の概要と使用上の注意、計算時間などを他の半経験的分子軌道プログラムや GAUSSIANプログラムなどとの対比を行いながら初めて使用する人向けに述べたいと思う。またこのMNDOCプログラムをパーソナルコンピュータ（PC-9801シリーズ）上に規模を縮小することなくそのままの形で移植することに成功したので併せて報告する。

使用できる原子、原子数など：MNDOCで使用できるのはH, C, N, Oのみである（MNDO: H, Li, Be, B, C, N, O, F, Al, Si, P, S, Cl。MINDO/3: H, C, N, O, F, P, S, Cl。CNDO/2: H, C, N, O, F）、原子数 max 75（実際には重原子30未満程度）、構造変数 max 99、対称性 50、軌道数 200。

データ入力の概要と注意点：分子構造の入力法はMNDOとほとんど同じである。詳細はマニュアルを参照していただきたい。分子の構造は Z-MATRIX（原子番号と内部座標：結合距離、

結合角、二面角で定義)でのみ入力できる。プログラム内部で直交座標(X,Y,Zで定義されるデカルト座標、Cartesian coordinate)に変換されるが、その方法は GAUSSIAN系のプログラムと MNDO系のプログラムでは異なっており、そのための分子の座標と p-軌道の向きとの対応には注意が必要である。また全ての入力は AMPACプログラムなどでの自由形式(Free format)とは異なりカラムを意識した書式通りでなければならない。計算法などのオプションはキーワードではなく決められたカラムに数字で指定する。振動計算を行う時には分子の点群を指定しなければならないが、座標軸と分子の対称軸との対応に制限がある。

計算結果：規定値で出力されるのは以下のものである。タイトル、入力データ、直交座標、すべての原子間距離、構造最適化の情報(SCFの情報)、軌道のエネルギーレベル(eV)と原子軌道係数、密度行列、標準生成エンタルピー(Kcal/mol)などのエネルギー情報、原子上の形式電子密度、双極子モーメント、振動計算の情報、構造最適化の結果(Z-MATRIX、直交座標、原子間距離)、計算時間とSCFサイクル数。

応用例：1985年以降の主な応用例については Ref 3), 4)を参照してください。

計算時間：このプログラムでは4個のワークファイルを用いており、二電子積分やハミルトニアンなどの行列はこのワークファイル上で読み書きしている。このためプログラムのベクトル演算率は低く NECの SX-1上では49.3%⁵⁾しかなかった。ワークファイルを用いているのは計算機の主記憶メモリーを節約するためと思われるが、MNDOCのような半経験的分子軌道法では積分の数が ab initio法に比べて極端に少なくすむので、現在のメモリー量の大きな計算機から見るとこのような方法は大変効率が低い。しかしメモリーの限られたパソコン上で実行することができる。

MNDOC法などの半経験的分子軌道法の最大の特徴は計算時間が少なくすむこと(重なり積分を無視し、他の積分もパラメータを用いて簡略化しているため)であり、そのためパソコン上でも実用的な計算ができるが、反応中間体や水素結合などへの応用は限界があることを蛇足ながらつけ加えておく。

謝辞：MNDOCプログラムのパソコンへの移植に際し種々の御教示、御援助いただいた大阪大学薬学部 高木達也先生に感謝いたします。また移植を許可していただいた Walter Thiel 博士に感謝いたします。

1)W.Thiel, J.Am.Chem.Soc. 103, 1413 (1981); W.Thiel, QCPE #438.

2)M.J.S.Dewar, W.Thiel, J.Am.Chem.Soc. 99, 4899 (1977); W.Thiel, QCPE #353.

3)A.Rauk, G.Hamilton, G.J.Moore, Biochem.Biophys.ResCommun. 145, 1349 (1987);

A.A.Bliznyuk, A.A.Voityuk, Zh.Struct.Khim. 27, 190 (1986); D.Cremer, W.Thiel, J.Comput.Chem. 8, 48 (1987); M.Reinisch, U.Loeweler, M.Klessinger, Angew.Chem. 99, 250 (1987); S.Schroder, W.Thiel, J.Am.Chem.Soc. 108, 7985 (1986).

4)S.Schroder, W.Thiel, J.Am.Chem.Soc. 107, 4422 (1985); D.Cremer, T.Schmidt,

C.W.Bock, J.Org.Chem. 15, 2684 (1985); W.F.Maier, G.C.Lau, A.B.McEwen, J.Am.Chem.Soc. 107, 4724 (1985).

5)大阪大学の大型計算機センターの応用ライブラリーに登録されているものを使用。高木達也、田中明人、松尾三四郎、前田重男、前橋博信、谷美香、佐々木喜男、大阪大学大型計算機ニュース、16 (4) 83 (1987)。

<MOPAC:長岡技科大・内田 希>

MOPAC (A General Molecular Orbital Package) は J.J.P.Stewart によって精力的に整備が進められている半経験的分子軌道計算プログラムである。このプログラムでは MNDO¹⁾、MINDO/3²⁾、AM1³⁾ の三種類の半経験的分子軌道計算を実行することができる (AM1 とは MNDO に開発者の M.J.S.Dewar 自身が手を加えたもので、殻間反発項を改良し MNDO の欠点を除いたとしているもの。Austin Model 1)。

MOPAC 中では標準として MNDO 計算が実行されるが、ここで使用可能な元素は現在 H、Li、Be、B、C、N、O、F、Na、Al、Si、P、Cl、K、Ge、Br、Sn、I、Hg、Pb の 20 種である。Dewar は周期律表の全ての元素について MNDO 計算ができるようになることを意図しているかのように原子パラメータの開発を今も続けている。

また Stewart は単一のプログラムで得られた分子軌道から可能な限り多くの化学的情報を引き出すことを意図しているらしく、MOPAC につけられているオプションは多岐にわたっている。幾つか例を上げれば、

- 1) MNDO, MINDO/3, AM1 の中からの計算法の選択。
- 2) 結合の力の定数の算出。それを基にした振動スペクトル、振動モード、同位体効果、自由エネルギー、エントロピーの算出。
- 3) 二中心エネルギーの算出。
- 4) 局在化軌道の算出。
- 5) 非制限ハートリー・フォック (UHF) の MNDO 計算による ESR データの算出。
- 6) 反応の遷移状態の計算。
- 7) 配置間相互作用の計算。
- 8) 励起状態の計算。二、三、四、五重項状態の計算。

などがある。これらはいずれも入力時にキーワードによって指定する。

計算プログラム: 筆者の使用しているプログラムは MOPAC Version 3.00⁴⁾ であるが、これは QCPE より IBM 計算機用に FORTRAN 77 で書かれたものが入手可能である。総ステップ数約 16,000。VAX 用あるいは CRAY 用のものも存在する。計算機上のメモリーとしては軽元素 (水素) の数を n 個、重原子 (水素以外の元素) の数も n 個としたとき約 $800+5*n*n$ キロバイトを必要とする。基本的なルーチンの実行に必要な CPU 時間は前の MNDO プログラムと変わらないが、振動スペクトルの算出などのオプションを実行させるときには系の大きさに応じてかなりの CPU 時間を必要とする。

入力データ: まず目的とする計算の内容を 3-10 文字のキーワードで指定する。キーワードは組み合わせて使用することができる。キーワードを何も指定しなければ標準として基底状態の MNDO 計算が行われる。原子の種類は元素記号によって指定し、その空間座標は核間距離、結合角、二面角 (ひねり角) の内部座標によって定義する。これらは適当な初期値を入力しておけば計算の中で系のエネルギーが最も低くなるように構造が最適化される。

出力データ: 基本的な出力データとしては系の標準生成熱、最適化した分子構造、各原子上の形式電荷、双極子モーメント、イオン化ポテンシャルなどが得られるが、入力時のオプションに応じた出力がこれにつけ加わる。

パーソナルコンピュータ用プログラム: MOPAC のパーソナルコンピュータ用プログラムも QCPE の QCMP シリーズの中に幾つか登録されている⁵⁾。これらは大型計算機用の MOPAC

プログラムをパーソナルコンピュータ用の FORTRANに合うように手を加えたもので、内容的には大型用のものとほとんど変わらない。NECの PC9801シリーズではメモリーを640キロバイトに増設し、数値演算プロセッサとハードディスク装置を接続すれば MS-DOS上で使用可能になる。ただしこのときの系の大きさは軽原子 7、重原子 7が限界であるので、研究用に使用するためにはさらに CPUボードを装着するなどの投資が必要かもしれない。

分子軌道の形：結果を解析するとき MNDO, MINDO/3, AM1 のいずれの方法でも分子軌道を求めるにあたって基底となる原子軌道が ZDO近似に基づいて規格直交しているとして取り扱われているため、得られた分子軌道の形が拡張ヒュッケル法や ab initio法で得られたものとは異なっていることに留意すべきである。

- 1) R.C.Bingham, M.J.S.Dewar, D.H.Lo, J.Am.Chem.Soc. 97, 1285 (1975).
- 2) M.J.S.Dewar, W.Thiel, J.Am.Chem.Soc. 99, 4899 (1977).
- 3) M.J.S.Dewar, E.G.Zoebisch, E.F.Healy, J.J.P.Stewart, J.Am.Chem.Soc. 107, 3902 (1985).
- 4) J.J.P.Stewart, QCPE, 16, 464 (1984).
- 5) S.Olivella, QCMP 017; N.E.Heimer, J.T.Swanson, J.J.P.Stewart, QCMP 019; J.T.Swanson, H.E.Klei, J.J.P.Stewart, QCPE 024; J.T.Swanson, T.A.Miller, J.J.P.Stewart, QCMP 030.

<AMPAC: リコー中研・高窪正明、渡辺好夫>

半年程前に大きな障害もなく QCPE #523 IBM主要機版 AMPAC (Austin Model 1 Package) を互換機上に設置した。そのパフォーマンスは期待通り十分満足いくものであった。今後このプログラムの使用を考えられている方々のためにまず HITAC M260D上で FORTRAN 77 E2(VOS3) コンパイラーによって AMPAC を稼働させたとき必要となった幾つかの変更を報告し、次いでこのプログラムの概要を簡単に紹介する。

プログラムの変更箇所を列記すると

- 1) サブルーチン CAPS (ファイル5) でキャラクター文中の ICHR(*) を ICHR*(*) に変更した。同じくこのサブルーチンにおいて DO ループ110の論理 IF 文中の整変数添字 KK を文字位置式 KK:KK に変えた。
- 2) サブルーチン DRC (ファイル5) で 210 CONTINUE を 220 CONTINUE の直後に移動した (なお文番号 210 は誤まった桁に書かれていた)。
- 3) サブルーチン ANAVIB (ファイル5) で DIMENSION 文中の実配列 COORD(3,100) を整合配列 COORD(3,NUMATH) に変更した。
- 4) サブルーチン DCART (ファイル5) において変数 CUC の型を LOGICAL 文中で宣言した。
- 5) サブルーチン DERIV (ファイル5) において DIMENSION 文中の擬寸法配列 GRAD(*) を整合配列 GRAD(MAXPAR) に変えた。
- 6) サブルーチン MULT (ファイル6) においてサブルーチンプログラムの末尾に END 文を加えた。
- 7) サブルーチン LINMIN (ファイル6) において DIMENSION 文中の配列 XPARAM の添字 NVAR を整変数添字 MAXPAR に変更した。また同じ行に整合配列 GRAD(MAXPAR) を加えた。
- 8) 関数副プログラム READA (ファイル8) において CHARACTER*1 A(80) を CHARACTER A*80 に変えた。同じくこのサブルーチンにおいて DO ループ10中の配列 A の変数添字 J を文字位置式 JJ

:JJに変更した。同様に DOループ30および50においてもそれぞれ次のように書き改めた。N=IC
HAR(A(I:)), N=ICCHAR(A(II:II))。

9) サブルーチン READ (ファイル8) において算術 IF文、IF(LOPT(J,I))100,120,100を3つの論
理 IF文に分解した。IF(LOPT(J,I).LT.0)GOTO 100, IF(LOPT(J,I).EQ.0)GOTO 120,
IF(LOPT(J,I).GT.0)GOTO 100。我々の計算機にとってこれらの変更は決定的であった。上の結
論に到達するまでかなりの時間を要した。これらの変更はコンパイラ中のバグに起因して
いるかもしれないので、他の機種でもこれらが正しいかどうかは検討を要するであろう。

10) サブルーチン ROTATE (ファイル8) において DIMENSION文中の実配列 W(100)を擬寸法配列
W(*)に変更した。

11) 二つのサブルーチン SCHMITおよび SCHMIB (ファイル8) において DIMENSION文中の配列 U
の変数添字 NDIMを整数変数 Nに変えた。10)と11)の変更はキーワード GEO-OKを指定するとき必
要不可欠である。

12) サブルーチン WRITE (ファイル8) において DERIVへの二つの CALL文中の引数 GCOORを GR
ADに変更した。また二つの WRITE文中の変数 GCOORを GRAD(1)に変えた。これらの変更は CAL
L文とサブルーチン文との引数の型を一致させるために必要となる。

13) システム組込みサブルーチン CLOCKが使えるように関数副プログラム SECONDに変更を施し
た。すなわち CPUTIMへの CALL文を CPUTIMEへの CALL文に変えた。新しいサブルーチン CPUT
IMEは次の通りである。

```
SUBROUTINE CPUTIME(CPUREM,CPUELA)
  INTEGER    CPUREM,CPUELA
  DATA      ICNT/0/
  ICNT=ICNT+1
  IF(ICNT.EQ.1)THEN
    WRITE(6,*)'<<<<< CPU-TIME COUNT START >>>>>'
    CALL CLOCK
    CPUELA=0
  ELSE
    CALL CLOCK(TCPU,5)
    CPUELA=INT(TCPU*100.0+0.5)
  ENDIF
  CPUREM=10000*100
  RETURN
END
```

必要最小限の変更はこれだけで十分である。なお補注として二点加えたい。

1) QCPE Bulletin 7 (1) 15 (1987)に TogashiらがMOPAC (第3版)における変更を詳しく
報告しているので参照すると役立つと思われる。

2) キーワード GRAPHを指定する時は他にグラフィック関係のプログラムが必要となる模様。

次にAMPACの概要を簡条書に示す。

1) 全価電子を含めた半経験的分子軌道法で、MNDO, MINDO/3およびAM1 (Austin
Model 1) の近似法を備えている。

- 2) 計算対象原子：H、Li、B、C、N、O、F、Na、Mg、Al、Si、P、S、Cl、K、Ge、Sn、I、Hg、Pbの20種。
- 3) 計算対象化学種：分子、イオン、ラジカルおよび鎖状（一次元）高分子。
- 4) 計算可能最大原子数：水素原子 80個、非水素原子 80個。なお我々はメモリーの都合上、配列の添字を80から40に変更した。当面はこれで十分である。
- 5) 計算対象物理量：最適分子構造、生成熱、全エネルギー、イオン化ポテンシャル、電子親和度、電荷分布、双極子モーメント、力の定数、振動数、分配関数、熱力学関数、第一励起エネルギー（一重項および三重項、CI計算を含む）など。

次に、実際に計算して気づいたことを述べる。

- 1) 分子軌道に対称性（表現）の帰属を施してそのエネルギーの上昇順位を *ab initio* 計算のそれと比較すると分子によっては必ずしも一致しない。特に HOMO-1, HOMO, LUMO, LUMO+1の軌道対称性のくいちがいがよくおこる。
- 2) 分子によっては励起エネルギーの計算値と実測値との一致はよくないと思われる（たとえばホルムアルデヒド）。
- 3) 振動数計算から基準振動ベクトルを描くために努力がなされてはいるものの、ホルムアルデヒドの場合でも実際には容易でないと思われる。

このようなことがあるものの全体としてのAMPACは優れたプログラムパッケージである。実際我々は比較的簡単な反応の経路解析や高分子の最適構造決定に役立てている。最後に付言すると、我々はAMPACの他にQCPE#350(GEOMO), QCPE#353(MNDO)をHITAC M260 D上で何の変更もなく稼働させた。特に#353では計算可能原子数を二倍に拡張し、最高70個の原子から成る分子およびイオンに関して軌道計算が行えるようにした。

<MM2/MMP2：東大教養・小川桂一郎>

分子力学計算の代名詞といってよいほどに有名で世界中でよく使われているのが米国 Georgia大学のAllinger教授らの開発したMM2¹⁾とMMP2²⁾である。これについてはすでに教授自身による著書³⁾をはじめとして多数の総説や解説^{4,5)}があるので、ここではプログラムのごく簡単な解説と筆者の使用経験を紹介することにする。

MM2/MMP2の主目的は有機分子の安定構造を推定し、そのポテンシャルエネルギーを求めることである。MM2は共役系をもたない分子を取り扱い、MMP2は共役系のある分子を取り扱う。これら2個のプログラムはもともと1つのプログラムの中の2つの部分であるが、QCPEから手に入れられるのは最近までMM2だけであり、MMP2は米国MDL社⁶⁾から購入しなければならなかったため、独立したプログラムとして使用されることが多かった。現在は教育・研究機関に限ってはMMP2もMM2と合わせた形でQCPEから入手できる。MM2における基本的な方法は分子のポテンシャルエネルギー（MM2では立体エネルギーと呼ぶ）を第一近似として結合の伸縮、結合角の変化、結合のねじれ、非結合原子間の相互作用（水素結合も含む）および双極子・双極子相互作用の和として表現し、このエネルギーが極小となる構造を求めるというものである。各エネルギー項は経験的に定められたパラメータをもつ古典力学的ポテンシャル関数で表され、その関数とパラメータの集まりは分子力場と呼ばれる。分子が共役系を含む場合には共役系部分の平衡結合長と力の定数およびねじれのポテンシャルエネルギーは π 結合次数に依存するため、これらの量をプログラム内で分子軌道計算を行って求め（MM

P 2)、その後MM 2を行うようになっている。

使用法：入力データはMM 2については原子の座標と原子タイプ、結合情報、種々の計算機能を制御するためのパラメータである。MMP 2ではこれらに加えて共役系を指定するためのデータが必要である。入力構造はかなり粗いものでよい。また骨格原子のみを与えれば水素原子はプログラムによって自動的に付加させることができる。構造最適化の機能は強力で、たとえばシクロヘキサンの骨格を正六角形として入力しても椅子型配座が出力される。ただし構造最適化によって得られるのは局所的なエネルギー極小点であって系全体のエネルギー最小点ではないので、フレキシブルな分子の最安定配座を求めるためには入力構造を作る段階に工夫が必要である。MM 2/MMP 2には便利な機能がいろいろある。たとえば前述の水素原子の自動付加、結晶座標からの入力、構造最適化において指定した原子だけを固定しておくとか、指定した部分ないし分子全体に対称性の制限を課すとか、指定した結合のねじれ角だけを指定した量づつ変化させて最適化を行う等である。これらは親切なマニュアルのおかげで使いやすい。計算に要する時間は大型計算機のジョブとしては非常に短い。入力構造の質によるが、分子数数百程度の分子のMM 2による構造最適化は HITAC M682II上で数秒程度で完了する。MMP 2では SCF計算があるので数十秒程度かかる。MM 2は16ビットのパーソナルコンピュータでも実用になる。実行形式のモジュールができていれば計算を行うための主たる作業は入力データを作成することである。これについては対話型グラフィックスによって入力構造を作り上げるプログラム^{5,7)}がすでに開発されており、それを使えばたいした苦勞なしに作業が行える。著者らは現在研究室内のワークステーション (VAX station II/GPX, オペレーティングシステム ULTRIX Version 1.2) にパーソナルコンピュータ (NEC PC9801) を接続し、データの作成はパーソナルコンピュータ上で行い、MM 2/MMP 2の実行はワークステーション上で行っている。

結果の信頼性と応用例：プログラムに内蔵されたパラメータを用い基底状態の安定構造を計算する限り結果の信頼性は高い。結合長と結合角の計算値と実測値との一致は特に炭化水素の場合には実験誤差の数倍以内であり、精度の高いX線結晶解析の結果を再現する。その一例が (E)-2,2'-ジメチルスチルベンのX線結晶構造解析である⁸⁾。MMP 2によればこの分子のベンゼン環の6個の炭素・炭素結合の長さはその π 結合次数の微妙な違いのために互いに異なる。118Kでの精密測定から得られた結果は π 結合次数の違いを系統的に反映してMMP 2の結果とよく一致した ($\leq 3\sigma$, $\sigma=0.002 \text{ \AA}$)。これに対して室温での通常測定の結果は π 結合次数の微妙な違いを反映せず、MMP 2との一致は118 Kのデータに比べて劣る。結合角についてはいずれの測定結果もMMP 2の結果とよく一致した ($< 3\sigma$, $\sigma=0.1-0.2^\circ$)。結合長と結合角は原子と結合の種類が決まれば大体一定であり、気相・液相・固相による違いは小さい。これに対して結合のねじれ角はねじれが伸縮や変角に比べてはるかに小さいエネルギーしか必要としないため、分子のおかれた環境に強く依存する。MM 2/MMP 2では通常このような相の影響を考慮に入れず'孤立分子'の構造を計算する。しかしながらそもそも力場の設定に使われたデータの多くは結晶解析に基づくものなので、特に強い分子間相互作用がない限り計算されたねじれ角は結晶中のそれを比較的よく再現することになる。たとえば (E)-1,1'-ビテトラリニデンについてMMP 2の前身であるMMP I⁹⁾は2個のシクロヘキセン環はねじれ舟形になり、すべてのメチレン炭素はエチレン平面に対して同じ側になり、C-Ph結合のねじれ角が 54° (絶対値)である構造を予言した¹⁰⁾。X線結晶構造解析を行ったところシクロヘキセン環の立体配座は定性的に予言通りであった。C-Ph結合のねじれ角は $-44.4(3)^\circ$ および $-47.4(3)^\circ$ で

あった¹¹⁾。MMP 2によればC-Ph結合のねじれ角は -49.3° および -49.4° であり、実測値との一致はMMP Iの場合よりも一層よくなった。このようにMM 2/MMP 2によって求められる基底状態の安定構造の信頼性は高い。このためMM 2/MMP 2の最も確実かつ有効な利用法の一つはX線結晶解析の補助に用いることである。すでによく行われているのが水素原子の位置をMM 2/MMP 2で求め、これを使ってさらに構造精密化を行うことである。さらに最近ではMM 2/MMP 2で求めた構造を出発構造にしてパターンソベクトルサーチ法によって解を得ることが行われるようになった¹²⁾。これは直接法で解けないような難しい構造を解くのに特に有効であり、この場合にはMM 2/MMP 2計算はきわめて重要な役割を果たすことになる。基底状態の安定構造に対する高い信頼性とは対照的に、反応中間体や遷移状態に対してMM 2/MMP 2を適用することは困難な場合が多い。なぜなら力場は実測構造を再現するように定められており、それが実測にかからないような不安定な構造を再現する保証はないからである。遷移状態はエネルギー極小点ではなく鞍点であり、MM 2/MMP 2では鞍点を探すことはできない。しかしながら実測にかからない不安定な構造に対する情報こそ種々の化学的現象の理解に必要な場合が多い。そのような問題に対してあえてMM 2/MMP 2を使う場合にはそれによって得られる情報はあくまでもMM 2/MMP 2によるモデルに関するものであることを前提にしなければならない。その限界を知りつつモデルを使えば有用な情報が得られる場合もある¹³⁾。

- 1) N.L.Allinger, Y.H.Yuh, QCPE Program No.395 (1980).
- 2) N.L.Allinger, QCPE Program MMP2 (1982).
- 3) U.Burkert, N.L.Allinger, 'Molecular Mechanics', American Chemical Society, Washington D.C. (1982); 大沢映二、竹内敏人訳、「分子力学」、啓学出版社(1986).
- 4) 最近の総説：大沢映二、有機合成化学協会誌、45, 1033 (1987); 中村栄一、深沢義正、有機合成化学協会誌、45, 1044 (1987); 板井昭子、富岡伸夫、有機合成化学協会誌、45, 1119 (1987).
- 5) 小川桂一郎、吉田弘、鈴木弘、「分子のモデリングと分子力場計算入門」、サイエンスハウス、東京(1986).
- 6) 国内では伊藤忠テクノサイエンス(DEC, IBM用)と富士通(FACOM用)が実行形式のモジュールとマニュアルを販売している。
- 7) K.Ogawa, H.Yoshida, H.Suzuki, J.Mol.Graphics, 2, 113 (1984).
- 8) K.Ogawa, H.Suzuki, T.Sakurai, K.Kobayashi, A.Kira, K.Toriumi, Acta Crystallogr. Sect.C, 印刷中。
- 9) N.L.Allinger, Y.H.Yuh, QCPE Program No.318 (1975).
- 10) P.Lemmen, D.Lenoir, Chem.Ber. 117, 2300 (1984).
- 11) K.Ogawa, H.Suzuki, M.Futakami, S.Yoshimura, T.Sakurai, K.Kobayashi, A.Kira, Bull.Chem.Soc.Jpn., 印刷中。
- 12) E.Egert, G.M.Sheldrick, Acta Crystallogr.Sect.A, 41, 262 (1985).
- 13) K.Ogawa, Y.Takeuti, H.Suzuki, Y.Nomura, J.Am.Chem.Soc. 106, 831 (1984).

<MMP 2: 化技研・都築誠二>

MMP 2は1982年にN.L.AllingerらがMMP I (1973)の改良版として作成した共役系を合

む炭化水素用の分子力学計算プログラムである。MMP 2の概要、応用例などについてはMM 2の部分ですでに詳しい説明がなされているので、ここではMMP IからMMP 2への移行に伴ってつけ加えられた改良点、1985年版でなされたMMP 2のねじれパラメータの改良について補足説明することにする。

MMP IからMMP 2への改良は次の2点である。1つは炭化水素のパラメータの改良である。MMP Iでは炭化水素のパラメータにMM Iと同じものが使われている。そして共役結合のパラメータについてのみ結合次数による補正を行っている。MMP 2ではMM Iの改良版であるMM 2の炭化水素のパラメータが使われている。もう1つは結合次数の計算方法の改良である。MMP Iでは VESCF法で π 結合次数を計算するが、MMP 2では SCF法で計算している。これらの改良でMMP Iと比べ実験値との一致がよくなったということが報告されている¹⁾。MMP 2を使って構造最適化を行うと共役結合の結合距離の計算値は実験値をよく再現する。しかしねじれ角や内部回転障壁は実験値を再現しない場合がある。たとえば 1,1'-ビナフチルや 2,4,6-トリメチル-1-イソプロピルベンゼンの内部回転障壁の計算値は実験値よりもかなり小さいことが知られていた。この点を改良するために共役結合の V_2 パラメータの改良が1985年版でなされた。この改良で回転障壁の計算値を幾らか実験値に近づけることに成功している²⁾。

1982年版のMMP 2は QCPEから、1985年版は MDL社から入手可能である。1985年版では V_2 パラメータの改良の他に幾つかの新しいパラメータが追加されている。

- 1) J.T. Sprague, J.C. Tai, Y. Yoh, N.L. Allinger, J. Comput. Chem. **8**, 581 (1987).
- 2) T. Liljefors, J.C. Tai, S. Li, N.L. Allinger, J. Comput. Chem. **8**, 1051 (1987).

<BIGSTRN-3: 化技研・都築誠二>

BIGSTRN-3は K. Mislowが作成した汎用分子力学計算プログラムである。このプログラムの特徴はプログラムに手を加えることなしにユーザーが定義した力場でエネルギー計算や構造最適化ができることである。また幾つかの構造最適化サブルーチンが内蔵されており、ユーザーの選択した方法で構造最適化が行われる。ここではBIGSTRN-3の機能について簡単な紹介を行うことにする。

MM 2などの分子力学計算プログラムではエネルギー計算、構造最適化などのサブルーチンと計算に使われるパラメータが1つのプログラムに組込まれている。これに対しBIGSTRN-3ではプログラムは計算などのサブルーチンだけから成っている。計算に必要なパラメータは別の力場パラメータ用のデータファイルに用意する。このため力場パラメータ用のデータファイルを変えることで種々の力場で計算を行うことができる。BIGSTRN-3には次の4つの力場パラメータのファイルが用意されている (AM: Andose-Mislow, EAS: Engler-Andose-Schleyer, MM2: Allinger, CFF: Ermer-Lifson) が、この他に必要な力場パラメータのファイルを用意すればユーザーの定義した力場でエネルギー計算、構造最適化が可能である。

構造最適化には次の4つの方法が利用できる (Steepest Descent, Conjugated Gradients, Variable Metric, Newton-Raphson)。Newton-Raphson法を使うことができるので、driver法では計算することが難しい正確なサドルポイントの構造の最適化が可能である。

BIGSTRN-3には振動解析のサブルーチンがあるので、最適化した構造がミニマムであるかサドルポイントであるかを容易に判別することができる。また計算した構造と振動数から自由エネルギー、エンタルピー、エントロピーを評価することもできる。

また eigenvector distortion法を使い、サドルポイントから負の振動モードの振動方向へ構造を微小量だけ変化させ、そこからミニマムへ向かって構造を最適化することも可能である。こうすると最適化したサドルポイントがどのようなミニマムの間の遷移状態であるかを知ることができる。この方法でコンフォメーションの変換の経路をトレースすることができる。

< Q C M P : 北大理・大沢映二 >

Q C M P は QCPE が 1984 年 8 月から頒布を始めた 16 ビット パソコン 用 計算機 化学 プログラム シリーズ の 名称 である。原則 として MS-DOS を OS とする IBM-PC (数値 演算 用 コプロセッサ - 8087, RAM 640K バイト) 用、MS-FORTRAN を使用 し、媒体 は 2D フロッピー ディスク (360 K バイト) に 限定 されている。Q C M P プログラム は 昭和 62 年 8 月 現在 で 36 件 に 達 して いて、なお 増え 続 けて いる。上 に 定め ら れ た 原則 は 大体 よく 守 ら れ て いる が、最近 では 32 ビット ボード や ハード ディスク を 必要 と する 本格 派 プログラム も 登場 して いる。

これらのプログラムをカテゴリー別に分類すると次のようである。

カテゴリー	Q C M P #
分子力学	4, 10, 35, MM2/MMP2(85)
座標入力、パラメータ	3, 9, 21, 26, 27, 32
HMO, EHT	11, 21
半経験的MO	1, 2, 5, 7, 15, 17, 19, 24, 28, 29, 30, 34
ab initio	6
分子グラフィックス	16, 18, 31, 33
振動スペクトル	8, 12
NMR	13, 25
双極子モーメント	14
反応速度	20, 22
統計解析	23

これから先、分子計算との関連において Q C M P シリーズは どうなる だろう か？ 16 ビット パソコン に び っ たり 適 した カテ ゴリー (座標 入力、HMO、一部の 単純 な MM 計算 および 最後の 4 つ) は 別 として、研究 レベル の 本格的 分子 計算 という こと になると 16 ビット パソコン では 概 して 無理 と いわ ざる を え ない。最も 多くの バリエーション が 提出 されて いる 半経験 的 分子 軌道 法 パッケージ MOPAC を 例 に とると Q C M P プログラム では 重原子 7 個 以上 の 分子 を 扱う こと は でき ない。最近 の 32 ビット 型 ワークステーション の 急速 な 台頭 を 見 て いる と、Q C M P シリーズ に 含ま れ る 分子 計算 プログラム の 主要 部分 は まも なく WS 上 に 移行 する と 思 われる。分子 計算 に 関 して は Q C M P シリーズ は 過渡 的 存在 であらう。

< 3 J H H P C : 北大理・大沢映二 >

3 J H H P C / Q C M P 025¹⁾ は QCPE#461 「NMR シグナル 結合 定数 計算 プログラム 3 J H H」
²⁾ を Pettilo が IBM-PC 用 に 書き 直 した もの である。本 プログラム は もと もと 北大 に おいて 作成

しつつあるMM2拡張版(MM2')³⁾に追加中の各種応用機能の一つであるが、化学実験研究において頻用されているプロトンNMRの解析法の一つとして広い汎用性を持つことを考慮して、この部分だけをMM2'から取り出してステップ数1500程度の独立した小プログラムとした。これがQCPE#461であり、依然としてMM計算と密接な関連を持っているので「分子計算特集」に加えた。パソコン版3JHHPCでは対話形式によって入力情報を与えるように改良されていて信頼性、操作性ともに向上している⁴⁾。

本プログラムは1980年にAltona⁵⁾が提案した経験的一般化Karplus式:

$${}^3J_{HH} = P_1 \cos^2 \theta + P_2 \cos \theta + \sum \Delta \chi_i [P_4 + P_5 \cos^2(\xi_i \theta + P_6 |\Delta \chi_i|)] \quad (1)$$

$$\Delta \chi(\text{group}) = \Delta \chi(\alpha\text{-sub}) - P_7 \sum \Delta \chi_i(\beta\text{-sub}) \quad (2)$$

を用いてC-C単結合を介するビシナルH/H結合を計算する。(1)式の第一、第二項だけをとると「普通」のKarplus式となる。第三項以下に関しては詳しい説明はここでは省略するが、Altonaらの行った改良の要点は次のようである:

- 1) H-C-C-H二面角をMM1⁶⁾計算によって最適化した構造から取った。
- 2) α および β 置換基の電気陰性度が結合定数に及ぼす影響を考慮した。
- 3) α 置換基に対してはさらに絶対配置の効果を考慮した。
- 4) 7つのパラメータ(P_1, P_2, \dots, P_7)を導入し、315種類の固定配座化合物の実測 ${}^3J_{HH}$ 値を最もよく再現するようにパラメータセットを定めた。このような工夫を加えた結果、Karplus式が本来備えていた簡潔さとエレガンスは失われたが精度は格段に向上し、計算値の実験値からの誤差の標準偏差は約0.4 Hzである。

(1)式を実地に用いる場合Altonaはポケコンを利用することを勧めている。しかし(1)式には問題とするプロトンの環境に応じた様々な制約条件が与えられていてポケコン操作は相当な手間となる。そこで必要最小限の入力を与えれば自動的に計算が行えるような使いやすいプログラムを作ることにした。その際次のような「おまけ」をつけた:

- 1) MM系分子力学計算の最終出力座標をほとんどそのまま本プログラムの入力データセットとして用いることができる。
- 2) 複数の配座が平衡混合物として存在する場合には可能な配座をすべて最適化して、得られた配座分布に従って重みづけをした ${}^3J_{HH}$ 平均値を与える。なお分子力場としてはMM2⁷⁾(またはMM2'³⁾)を用いることにした。上記2)のオプションにおいて大型計算機用のプログラムMM2'を用いる場合には回転異性体を生ずる原因となる結合(最大10本まで)を指定するだけでよく、後はすべて自動的に同一ジョブの中で計算が終了する。これに反してPC版を使用する場合にはまずMM2プログラム(これにもPC版がある。QCMPに関する記事参照)によって配座異性体の構造最適化を行い、その出力座標を積み重ねて3JHHプログラムの入力ファイルとすればよい。

本プログラムの応用範囲はかなり広いと考えられる^{8,9)}。

- 1) P.A. Pettilo, QCPE Bull. 7, 50 (1987).
- 2) G. Jaime, E. Osawa, QCPE, 19, 461 (1985).
- 3) この拡張版には二種類の力場MM2およびMM2'が内蔵され、かつ両力場に共通に使うことができオリジナルのQCPE#395MM2にはない各種の便利なオプションがつけ加えられている。我々はこの拡張版プログラムを便宜上MM2'と呼んでいる。MM2'力場に関してはC. Jaime, E. Osawa, Tetrahedron, 39, 2769 (1983)参照。

- 4) 3 J H H はかなり使いこまれているが、3 J H H P C のテストはまだ十分でない。
- 5) C.A.G.Haasnoot, F.A.A.M.de Leeuw, C.Altona, Tetrahedron, 36, 2783 (1980).
- 6) QCPE #318.
- 7) QCPE #395.
- 8) S.Masamune et al, Chem.Commun. 261 (1986).
- 9) C.Jaime et al, J.Org.Chem. 48, 4514 (1983).

< E C E P P , U N I C E P P , E C E P P / 2 : 呉羽化学・中馬 寛 >

E C E P P , U N I C E P P , E C E P P / 2 はここ約10年間に Cornell大学の Scheraga教授のグループにより開発されたペプチド分子用の経験的分子力場計算(Molecular Mechanics)プログラムである。これらのプログラムはペプチド分子のアミノ酸残基配列(一次構造)および立体配座を二面体角で指定することにより、その配座エネルギー(Conformational energy)を算出する。また多変数関数の極小化サブルーチンを組込むことによりエネルギー極小配座とそのエネルギーが算出できる。これらのプログラムは IBMマシンで開発されたものであるが他機種への移行は容易である。プログラムの実行にはアミノ酸残基の構造情報を収めた外部ファイル(NDAT、各プログラムに付随)を必要とする。オリジナルのプログラムで実行可能な最大アミノ酸残基数は5であるが、拡張はきわめて容易に行えるようになっている。

E C E P P (QCPE#286)¹⁾: E C E P P を含めて上記のプログラムの入出力情報、プログラム構造、変数の意味など QCPEマニュアルに詳しい説明があるが、ここではプログラムの概要を紹介する意味も含めて入出力情報を説明する。

- 入力: ①Card Type 1(515): INUMRS(endgroupを含めた残基数、アミノ酸残基数+2); NUMCON(計算するconformationの数), IPRINT(出力機番), I1(二面体角出力の機番), I2(座標出力の機番)。
 ②Card Type 2(1615): LIST(1)(一次構造の指定)。LIST(1), LIST(INUMRS)はendgroupの種類を指定、LIST(2)~LIST(INUMRS-1)はアミノ酸残基の種類を指定する整数。D型アミノ酸残基は負符号によって指定する。アミノ酸残基の構造情報は NDATファイルに天然型アミノ酸残基20種類と他に Norleucine, Ornithine残基などが格納されている。ユーザーが新たなアミノ酸残基、endgroupを NDATファイルにつけ加えることも可能である。
 ③Card Type 3(10F8.3): ANGLE(アミノ酸残基、endgroupの二面体角の指定)。
 ④Card Type 4(A4): KV(変数とすべき二面体角の種類)の指定)。
 ⑤Card Type 5(1615): NRES, NVAR, LTEMP(K)(変数とする二面体角の指定)。

出力: 関数極小化サブルーチンとしては VA04A(Fletcher-Powell法、QCPE#060)が E C E P P に組込まれ、これがマニュアルで推奨されている。出力リストにおいて AFTER ENERGY MINIMIZATION の前までは入力情報に基づく座標と conformational energy(ETOT)である。他の分子力場計算と同様に ETOTの構成成分(静電エネルギー、非結合相互作用、二面体の回転に伴うエネルギーなど)が出力される。AFTER ENERGY MINIMIZATION以降は入力で指定した二面体角を独立変数として ETOTを極小化した結果が出力される。以上のように E C E P P の入出力はユーザーにとって簡潔にできている。

U N I C E P P (QCPE#361)²⁾: 入出力は E C E P P と同様であるが、E C E P P との違いは united atom近似を用いて二面体角変数、原子数を減少させ、その結果計算時間が短縮(~40%)されることである。united atom近似においてはたとえば Ala残基の場合側鎖 CH₃基の自由度が

消失する。united atomとみなす原子団は CH_3 , CH_2 , CH である。

ECEPP/2 (QCPE#454)³⁾: 1983年に発表されたECEPPの改良版である。主な改良点はN, S原子などの非結合相互作用項、N, O原子の水素結合項のパラメータとC-H結合距離である。この結果ペプチド分子、蛋白質の結晶解析、Ramanスペクトルの実測値をよく再現できるようになった。また ScheragaらのECEPP/2の発表とほぼ同時に筆者らはECEPP, ECEPP/2に比較して数々の良好な結果を与えるECEPP 83を発表した。ECEPP 83は現在QCPEには登録していないが、参考文献4), 5)をもとにECEPPから比較的容易に移行できる。

以上三つのペプチド分子用経験的分子力場計算プログラムを紹介したが、これらのプログラムを利用して例えば conformation energy map(例えば ϕ - ψ Ramachandran Map)作成は容易であり、また初期座標発生機能、配座エントロピー項評価など⁶⁾をつけ加えることも可能である。

- 1) F.A.Momany, R.F.McGuire, A.W.Burgess, H.A.Scheraga, J.Phys.Chem. 79, 2361 (1975).
- 2) L.G.Dunfield, A.W.Burgess, H.A.Scheraga, J.Phys.Chem. 82, 2609 (1978).
- 3) G.N.Nemethy, M.S.Pottle, H.A.Scheraga, J.Phys.Chem. 87, 1883 (1983).
- 4) H.Chuman, F.A.Momany, L.Schajer, Int.J.Peptide Protein Res. 24, 233 (1984).
- 5) H.Chuman, F.A.Momany, Int.J.Peptide Protein Res. 24, 249 (1984).
- 6) 中馬寛、有機合成協会誌、45, 1098 (1987).

<AMBER, BIOSYM, CEDAS, CHARMM: 蛋白工研・八尾 徹>

AMBER: AMBER¹⁾は巨大分子のモデリングのための分子力場計算および分子動力学計算プログラムであり、米国UCSFのDr.Kollmanらによって開発された。エネルギー計算はデカルト座標で結合長、結合角、二面角、van der Waalsおよび静電相互作用の項を扱い、水素結合エネルギーはユーザーのオプションとなっている。プログラムは座標読み込み、パラメータ設定などの準備部分と、中心となる計算部分と、計算結果の解析、表示部分とに分かれており、計算部分は高速コンピュータ用のバージョンがある。計算部分にはエネルギー極小化、分子動力学計算、基準振動解析、分子軌道計算との結合および自由エネルギー計算のルーチンがある。特に自由エネルギー摂動法の計算のために、摂動パラメータ λ を複数の区間に区切るモンテカルロ型と、 λ を時間と共に変化させる分子動力学型の2つの方法が使えるようにしてある。AMBERはその後の大幅な改良により機能が拡張されパラメータも更新された^{2,3)}。AMBERの計算結果を三次元グラフィックス上に出すには別のプログラム(INSIGHTなど)との接続をする必要がある。AMBERの応用例としては自由エネルギー摂動法による結合エネルギー計算が注目を集めている^{4,5)}。

- 1) P.K.Weiner, P.A.Kollman, J.Comput.Chem. 2, 287 (1981).
- 2) S.J.Weiner et al, J.Am.Chem.Soc. 106, 765 (1984).
- 3) S.J.Weiner, P.A.Kollman, J.Comput.Chem. 7, 230 (1986).
- 4) U.C.Singh, P.A.Kollman et al, J.Am.Chem.Soc. 109, 1607 (1987).
- 5) P.A.Bash, P.A.Kollman et al, Science, 236, 564 (1987).

BIOSYM: BIOSYMは米国BIOSYM社で開発された分子設計用統合システムで、分子力学、分子動力学計算を行うDISCOVERと、グラフィックス表示、操作を行うINSIGHTとから構成されている。DISCOVERはAgouron InstituteのDr.Hagler⁶⁾によ

て開発されたもので次の機能を持つ：(1)立体構造エネルギー最小化：最小化の方法は4種類、特定のねじれ角および結合長を指定値に固定できる、溶媒分子のシミュレーションも可能、残基間相互作用の計算が可能、残基内原子間相互作用計算が可能(2)分子動力学計算：指定した範囲内の計算が可能、溶媒分子を含めたシミュレーションが可能、自由エネルギー計算が可能。計算式はデカルト座標を用い、結合長、結合角、ねじれ角、平面からのずれ、van der Waalsおよび静電相互作用、水素結合などのエネルギーの他に隣接ボンド間の相互作用を考慮した項も入れており、使用するパラメータについて別途コンソーシアム⁷⁾を結成して実測および *ab initio* 計算により信頼性を高める努力がなされている。なお構造解析および振動解析のルーチンの他、NMRデータを拘束条件にした計算もできるようになっている。MOLEDTおよびINSIGHTと組合わせた一貫システムとしてソフトウェア製品としてのまとまりがよく、ドキュメントも充実している。BIOSYMの使用例としてはホルモンの解析⁶⁾、グラミシジン中のイオン通過の構造及び動的解析⁹⁾などが報告されている。

6) A.T. Hagler et al, Science 227, 1309 (1985).

7) "Potential Energy Function Consortium", BIOSYM社が DuPont, Monsanto, Abbott, Merck, Rohm & Haas 他の参加を得てパラメータ決定を進めている。

8) D.H.J. Mackay et al, Biophys.J. 46, 229 (1984).

CE D A S : CE D A Sは九大の郷助教授(現在京大教授)を中心に開発されたポリペプチドの構造計算および動的解析を行うための一連のプログラムである。CE D A Sの中のエネルギー計算部分はECEPP⁹⁾の力場を採用しており、ボンドの結合長および結合角を固定し、二面角を独立変数にとった計算方式で、下記のエネルギー項を持つ：

$$E_{TOT} = E_{EL}(\text{静電}) + E_{NB}(\text{非結合, 含水素結合}) + E_{TOR}(\text{回転角}) + E_{SS}(\text{SS結合}) + E_{LOOP}$$

CE D A Sは次の4つのプログラムから構成されている：(1)Regularization, PDBデータ形式から二面角形式への座標変換プログラムで、X線データを指定結合長および結合角に修正して初期構造を作っている(2)Energy Minimization, エネルギー極小化の計算を行う(3)Normal Mode Analysis, 上記極小構造をもとに基準振動解析を行う(4)Monte Carlo Simulation, 構造の動的な状況を解析する。CE D A Sの特徴は構造最適化変数として二面角のみを採用していること、および計算の高速化を達成していること^{10,11)}にあり、そのため短時間に正確なエネルギー極小構造を計算することができ、したがってまた引き続き基準振動解析によりゆらぎの状況を手軽に把握することができる。CE D A Sには分子動力学計算は含まれないが、その代わりモンテカルロシミュレーションにより動的な構造を調べることができる。二面角法を採用していることにより、水や基質の扱いには抜本的な対策が必要である。また計算結果の三次元表示には他のプログラム(MILD¹²⁾など)とのリンクが必要である。CE D A Sの応用例としてはBPTIのS-S結合の解析¹³⁾、テンダミスタットの動的構造解析¹⁴⁾他、多くが報告されている。

9) H.A. Scheraga et al, J.Phys.Chem. 87, 1883 (1983).

10) T.Noguti, N.Go, J.Phys.Soc.Jpn. 52, 3685 (1983).

11) H.Wako, N.Go, J.Comput.Chem. 8, 625 (1987).

12) H.Nakamura et al, J.Mol.Graphics, 4, 180 (1986).

13) H.Wako, N.Go, 生物物理, 26, S145 (1986).

14) K.Morikami et al, 生物物理, 27, S237 (1987).

CHARRMM : CHARRMM¹⁵⁾は分子の構造と挙動を解析するためのプログラム群であり、

Harvard大の Dr.Karplusらによって開発された。CHARMMの機能は大きく分けて3つある。1つはエネルギー極小化、第2は分子動力学計算、第3は振動解析である。さらにこれらの計算結果を解析するルーチンが豊富である。CHARMMではデカルト座標を用い、エネルギー計算式は下記の通りである：

$$\text{Total Energy} = \Sigma \text{Bond Energy} + \Sigma \text{Bond Angle Potential} + \Sigma \text{Torsion Potential} + \\ \Sigma \text{Improper Torsion Potential} + \Sigma \text{van der Waals Interaction} + \Sigma \text{Electrostatic} \\ \text{Potential} + \Sigma \text{Hydrogen Bonding Interaction} + \Sigma \text{Constraints}$$

エネルギー極小化計算には5つの方法が使えるようになっている。分子動力学計算では Minimization, Heatingおよび Equilibrationを経て Simulationに入る。溶液の効果をとり入れる方法としてランジュバン分子動力学の機能がある。またタンパク質の活性部位の動きを解析したい時、それ以外の部分を近似的にとり扱う方法として確率的境界条件分子動力学が使える。反応領域、緩衝領域およびリザーバー領域の3つに分けて扱い計算時間の短縮を図ることができる。CHARMMのグラフィックス入出力部にはHYDRAが使われる。CHARMMの使用例としてはミオグロビンの動的解析¹⁵⁾、NMRデータの解析¹⁷⁾あるいはX線データの解析¹⁸⁾など多くの報告がある。

15) B.R.Brooks, M.Karplus et al, J.Comput.Chem. 4, 187 (1983).

16) M.Karplus, J.A.McCammon, Scientific American, April, 42 (1986).

17) A.T.Brunger, M.Karplus et al, Proc.Natl.Acad.Sci. 83, 3801 (1986).

18) G.A.Petsko, M.Karplus et al, J.Mol.Biol. 190, 227 (1986).

「企業における計算化学の現状」

＜旭硝子（株）研究開発部・石田嘉明＞

当社の化学製品の多くは含フッ素化合物であるため理論化学計算ではフッ素のパラメータに不安を感じているものが多く、計算結果と実測値の差異をフッ素原子があるためときめつけてしまうこともしばしばのようである。それでも含フッ素核酸、含フッ素プロスタグランジンなどの合成研究にはMM2/MMP2による立体配座解析を適用し、 ^1H -、 ^{13}C -、 ^{19}F -NMRスペクトルデータ解析を組み合わせて立体化学を論じたりしている。いうまでもなくこれらの化合物の立体配座をはじめからMMのみで展開するのは危ないので、類似化合物の単結晶X線回折の文献データなどと照らし合わせながらパラメータを微妙に操作している。他の化合物系においてもここで一応決めたパラメータが使えるのか否か自信がもてないというのが現実である。

他方、合成反応における原料化合物の反応性に対してはMOPACを適用することにしてMMとの使い分けをしている。対象は芳香族化合物のフッ素置換体やある種のアミン、ジアミン類などであり、電荷分布やHOMO-LUMO相互作用を論じている程度である。必ずしも充分に使っているわけではないが、できれば計算結果を視覚的に表示してくれればもっと使いやすくなり、利用メンバーの数も増加するものと思われる。わが社の化学計算プログラムの使用状況については研究所のコンピュータが完全に社内オープンとなっているため、誰がどのプログラムを年何回利用しているかなどの定量的データをまとめることができない。最近MM2などはパソコンで行っている部署も見られるので実態は掴めていないのが現状である。かろうじて同好の士が時折情報交換の場を持っている程度である。ただし私達が考えている計算化学の範囲はMMやMOPACのジャンルのみにとどまらず、各種の物性推論計算、シミュレーションなど雑多なものが含まれていることを申しそえる。

＜エーザイ（株）研究開発本部・張ヶ谷泰二＞

製薬メーカーであるわが社では薬物の設計をするときの重要な情報源である化合物の立体構造、電子密度、軌道エネルギーなどの情報を得るために化学計算プログラムは必須のものとなっている。そこでその利用状況とプログラムの問題点について簡単に紹介したい。

分子力場（MM）法は計算速度が速く、容易にしかも大きな化合物でも計算で安定な立体構造を知ることができるのでよく利用しているプログラムの一つである。QCPEのMM法を最近容易に行うためのプログラムが多くなり、手軽に利用できるようになってきている。私どもには現在QCPEのほかにMDLのMM2/MMP2（85）、北大理学部大沢らのMM2'があり、パソコン版についてはbonch chemistも使えるようなソフトを開発している。MMの問題点はヘテロ原子に関するパラメータが少ないことであろう。医薬品はヘテロ原子を含んでいるものが多いので苦労しているが、工技院化技研の田辺らがいろいろとパラメータを研究しているので利用させていただいている。

コンフォメーションの違いによるエネルギー変化を見るのにMM計算をよく利用するが、AllingerのMM2にこの計算を使用する際に問題があることを発見した。比較的大きな化合物で結合を強制回転すると分子の中の数個の原子を置き忘れて回転してしまうことがあった。そのために異常に長いC-H結合が出てきたり、ゆがんだベンゼン環になったりする場合があり、最終結果を充分注意して見る必要がある。MM2にはまだ問題があるようだが、この用途では

MM2'には新たなサブオプションがあり使いやすいと思う。

またMM2/MMP2 (85)でメトキシなどの置換基の酸素が直接ベンゼン環についた化合物を計算するとベンゼン環が10度程度ゆがんだ結果が得られた経験があった。計算上のバグと思うがこれも注意する必要がある。このようなプログラムのバグを気軽に情報交換できる場があれば化学計算プログラムはもっと使いやすくなると思う。

パラメータの問題でMM法で計算できないときはMNDO法をよく使う。しかしたとえばアセトフェノンを計算するとベンゼン環の面からカルボニルが立ってしまい、合成化学の経験からはおかしなことである。これはMNDO法そのものの問題であり、この現象を認識して使えばいいのだが、このような結果を見て「これは使えない」と化学計算そのものまでも否定するbench chemistが出てくることもある。計算化学者も彼らにその点を説明し誤解を解くことも計算化学をより発展させるためにも必要かもしれない。

薬物設計においては化合物の立体構造だけでなく電子密度や軌道エネルギーなども重要な情報である。そのためにはGAUSSIANを最もよく利用しているが計算するには原子数の制限があり、医薬品に適した大きさの化合物をそのまま計算できないので、重要な部分構造だけを計算している。基底関数に6-31Gを使いたいときもあるが、コンピュータがストップしてしまうのでSTO-3Gを主に使用している。

QCPEからは化学計算の良いプログラムが一枚の手紙だけで安価に入手できるので私どもにとって有用な機関である。しいて愚痴を言わせていただくならば、本当にこのプログラムが動いていたのかと思うくらいバグ?が多いのに驚かされる。またマニュアル?も不親切でこれを読んで使える人はまずいないであろう。このような状況で困っている人は多いと思う。先にも述べたが、気軽に情報交換できる場を作れないだろうか。これもまた計算化学を広めるよい場となると思う。

<花王(株)知識情報科学研究所・山下 修>

弊社では以前紹介したように、知識情報科学研究所にいわゆる「Computer Chemistry」を仕事としているグループ、また基礎科学研究センターの一つに物理有機化学基礎研究センターがあり、両者共同で分子計算を利用した有機化学の物理化学的取り扱いを試みている。その特色として挙げられることは一部の個々の計算プログラムを除けば市販されている分子設計支援のための各種のシステムを全く持っていないということである。その理由は高価なシステムを購入し保守・管理に人員をさくよりは、たとえ小規模でもシステムの核となる要素技術を開発し、それを応用することを考えた方が内部の事情に合っていたからである。また他の総合化学会社や製薬会社と比較して年間に合成・評価する化合物の数が少なく、化合物情報を登録・管理する必要が今までのところなかったことも挙げられる。

独自に開発したシステムのうち気のついたものを紹介することにする。有機化学研究部門では以前から多環化合物の研究を続けており、これが現在の香気物質の研究に結びついている。これら多環化合物について分子力学などの分子計算を実行するための人力座標を得ることを考えると、従来の方法すなわちZ-Matrixを順に定義する方法あるいはグラフィックスを見ながら枝を延ばしていく方法では非常に不便であった。なぜなら環がうまく閉じないのである。これを解決するためにグラフィック・ディスプレイにマウスで二次元の分子構造を描いた後に分子に奥行きをつけるという考え方で各原子にZ座標を直接数値で与える方法を考案した。これと

ともに、立体化学が意図どおりになっているかを確認するために分子の立体視のための工夫も施した。さらに結合角は無視して結合距離のみを $1.5 \pm 0.2 \text{ \AA}$ になるように補正し、水素原子を付加してMM2に入力すればたいの分子で正しい局所最適構造が得られる。炭素数20個内外の分子なら初期座標を作成するのに5分とかからない。有機化学者は実体分子模型を組立てることに慣れており立体化学についても十分な感覚をもっているのので、この方法を導入することに全く抵抗はなかった。むしろ Z-Matrixの方が容易に受け入れがたいものであった。この方法を考案した3年前当時を振り返ると類似の発想は皆無であったように思う。

現在はこの方法を使って分子構造入力をすればMM2による構造最適化をリアルタイムで実行し、さらに Z-Matrixに自動変換し分子軌道計算へも容易に入れるようなシステムを開発し利用している。ちなみにハードウェアは構造入力に PC98シリーズ、数値計算に VAX8600を使用している。このような一部の専門家のものであった分子計算を誰もが容易に使えるシステムにしあげる仕事は最近の高速演算とグラフィック処理を兼ね備えたワークステーションの登場でますます拍車がかかるであろう。その一方で、ある目的に最適な分子計算を選択するためのシステムの必要性が生じてきたと考えられる。弊社では科学技術庁の補助を受けて、知識工学的アプローチによる化合物の特性予測システムの開発研究を行っている。その中のモジュールとして最適分子計算選択のための知識ベースシステムを位置づけている。さらに分子軌道計算により出力される膨大な数値を解析して有機化学者の容易に理解できる命題を与えてくれる頭脳がほしいと思う。夢の話であろうか。

<協和醗酵工業(株) 東京研究所・白木千尋>

当研究所では分子計算を主に医薬品に適用しているが、最も多用しているのは分子力場計算である。分子軌道法は CPU(VAX11/750)の能力の制約があり、現在は力場計算のための電子密度算出などの補助的手段として使用しているので、ここでは分子力場計算に関して紹介したい。

低分子化合物の構造推定にはMM1を使用している。力場計算において最も重要なパラメータは基本的にはプログラム付属のもの、文献値、それに Tribbleシステムに用意されているものを用いている。これらに含まれていない、あるいはたとえあったとしても対象としている化合物群に対して満足のいくものでないパラメータはそのつど作成している。実際我々の扱う化合物(母核)は化学的に活性な化合物であったり特異な構造であることが多いので、通常のパラメータでは全く意味のない構造になってしまうことがほとんどである。しかしいわゆる"側鎖"部分に関しては通常の部分構造である場合には汎用的な値で充分対処できると考えている。パラメータの作成は具体的には Cambridgeの結晶データベースのデータをもとにしている。すなわちデータベースより似たような環境にある化合物を検索し構造データとし、この構造を再現できるようにパラメータを調節する。上述のように"側鎖"部分には汎用的なパラメータを用いることが多いので、たとえば同じ部分構造が同一分子内に二つ以上あったとしても異なるパラメータが与えられる場合がある。このような処理を行うには原プログラムのままでは不可能なのでプログラムを大幅に変更している。なお、望む構造が報告されていない場合は典型的な化合物の少なくとも一つについてX線解析を実施し、これを構造データとしてパラメータを決めるようにしている。

タンパク質、核酸に関してはAMBERを用いて計算を行っている。対象がペプチド、ヌクレオチドだけの場合は Kollmanらのパラメータをそのまま利用できるが、阻害剤、基質、薬剤、

補酵素などを含めた計算を行おうとすると殆どパラメータが存在しないので、MMIの場合と同様な操作を行いパラメータを決定する作業から始めることになる。パラメータの構造への割当はAMBERの場合は容易にできるのでMMIのようなプログラムの変更は行っていない。

<キリンビール(株) 医薬開発研究所・飯島洋>

当研究所においては最近化学計算のためのコンピュータが導入され利用が始まった。経験が浅いが、頻繁に使用するQCPEソフトは市販の分子設計支援ソフトウェアパッケージ(Sybyl/Mendyl)からインターフェースを通じて起動されている点でユニークと思うので簡単に述べたい。

分子設計支援ソフトの最も有用な特徴はコンピュータを意識させないことであろう。手で分子模型を組んだり、X線のデータベースからは原子座標ではなくタンパク質の分子模型を取り出してくる感覚で仕事を進められる。画面に分子を表示し、たとえばAMPACとタイプすればZ行列が利用者の見えぬ所で発生しバッチジョブとして処理される。最適化構造や原子部分電荷などの計算結果も画面上で分子と同時に表示されるので出力ファイルの内容を具体的に解釈できる。したがって使い易さはQCPEソフト単独の場合に比較して大きく向上している。ソフトが提供している代表的オプションに対してもインターフェースしている。それ以外のオプションは入力ファイルをマニュアルを参照して編集すればよいので問題はないはずである。最後に、当研究所で使用しているQCPEソフトの代表的なものについてコメントする。

MM2 : No.395. 炭化水素系化合物の構造最適化。パラメータの追加を行う場合が多い。

AMPAC : No.508. 主として原子部分電荷計算。

GAUSSIAN 80 : No.446. 原子部分電荷計算。本来のオプションではないが、諸熊らのエネルギー分割法による分子間相互作用計算は有用であると思われる。

<サントリー(株) 生物医学研究所・石黒正路>

分子構造計算においてはQCPEのプログラムを主として用いており、その限りでは特に明記する利用法はない。一般に共通してこれらのプログラムの利用の際に生じる問題はスムーズなデータ作成や出力データの利用のためのプログラム群を用意する必要があることである。使いやすさはこのようなプログラムの出来、不出来にかかっているともいえる。最近ではこういった要望にこたえた種々のプログラムシステムが用意されてきており、目的に合った利用が可能となってきているように見られる。分子のエネルギー計算を行うにはできれば経験的分子力場法を用いることにしており、分子軌道法による計算は分子軌道や各原子の電子密度を求めるために利用することを原則としている。

MMI, MMP1, MM2 : テルペンなどC, H, Oからなる分子では信頼性の高い計算が可能であるが、一般の薬物などでは他のヘテロ原子が含まれることが多く、この場合にはほとんど計算が不可能となり、対応するパラメータの作成を自由に行えないため利用が限られる。これに対する処置としてはヘテロ原子をCまたはO原子などに置き換えて計算を行った後、さらにoriginalの原子に置き換えて分子軌道法などの他のプログラムを用いて構造をoptimizeするといった繁雑な方法を取っている。

ECEPP : このプログラムでは分子構造データとして分子内座標、特に二面角の値を入力するために構造を理解しやすく、最初に構造データがない場合には簡便である。しかし一般的にエネルギー計算や構造の最適化を行う場合、PDBなどのX線結晶解析データまたはコンピュー

タグラフィックスを用いて作成した構造データなどに用いられる初期座標はデカルト座標で与えられることが多く、これを分子内座標に直す手間および結合距離、結合角が与えられないことからくる初期座標からずれ(精度落ち)が生じるおそれがある。また与えられた配座に対応するエネルギー値を計算するサブルーチン集であるため、構造の最適化のためのルーチンの用意などやメインプログラムの作成が必要である。このようなプログラムの良し悪しで利用の範囲が大きく限定されてしまう。

EHT, CNDO/2, MNDO: 分子軌道計算プログラムとして上記の三種のプログラムを通常用いている。それぞれのプログラムで取り扱える原子の種類などにより選択しているが、一方では分子のエネルギー計算においてその分子のコンホメーションの数に依存してプログラムを選択することも多い。たとえばコンホメーションの決まった分子でエネルギーを最適化する目的ではMNDOを最も多用している。また多くのコンホメーションを発生させてそれぞれのエネルギーを計算する場合にはEHTを用いる。しかしこれも扱う軌道の数とコンピュータの計算能力に大きく依存している。分子軌道および原子の電子密度などはMNDOによる計算を標準としている。

3JHH: NMRにおけるビシナルプロトンのカップリング定数を求めるプログラムで、MM2の出力データを利用して計算させることが可能。数種のエネルギー極小値と対応する構造データを入力してフレキシブルな分子の平均的なカップリング定数を求めることによって、実測値との対比から計算結果を評価できる。

MS: 入出力データは非常に簡易であるが、大きな分子(タンパク質、核酸など)に対する入力は必ずインターフェースプログラムが必要で、出力データはグラフィック端末と表示プログラムにより検討される。主として分子の形状、表面の性質、分子間の接触などの検討に用いている。また分子表面を形成する点には表面に対する法線ベクトルも与えられているため隠点処理に利用できる。

(塩野義製薬(株) 研究所・江角清志)

研究所での分子の構造あるいは電子状態の研究への分子軌道法および分子力場法の利用について振り返ってみると、まず1960年代の初めのHuckel法の利用から始まると思う。私が入社した頃は半経験的分子軌道法であるPariser-Parr-Pople(PPP)近似のSCFMO-CI(Configuration Interaction)法を用いて芳香環Nオキシド類の電子状態について数多くの計算が行われていた。またこのSCFMO-CI法を基にラジカル分子の電子状態を調べるためにLonguet-Higgins-Popleのopen shell SCFMO-CI法のプログラムを作った。この方法を用いNオキシド類のアニオンラジカルの電子状態を研究した。これらの分子軌道法は π 電子系に限られるので、 σ 電子も含めた系を取り扱うためにPopleとBeveridgeによる著書に記載されていたCNDO/2法プログラムをFACOM上で稼働させた。

1970年代の中頃まではほとんど基礎研究に利用していたが、「薬物の開発には化合物の構造と活性との相関を調べることによってもっと合理的な開発が可能になるのではないか」という考えに基づいて、薬物の定量的構造活性相関の研究にこれらの分子軌道法を利用することを始めた。特にセファロsporin誘導体の抗菌活性、種々のステロイドホルモン受容体へのステロイド結合能、フェノール誘導体の光合成阻害などの解析に大いに役立った。一方CNDO/2法を改良し σ 電子系をも考慮したCNDO/S法のプログラムを作り、トリブセチンなどの σ

電子系をもった非平面分子の電子スペクトルの解析を行った。

1980年代の初めごろまでは FACOM上で PPP-SCFM0-CI法、CNDO/2法、CNDO/S法を稼働して分光学的研究と構造活性相関の研究を行ってきたが、1984年に VAX11/780が導入され、また FACOMの性能も向上し分子の構造の最適化計算が可能となったので、QCPEよりMOPAC (QCPE#464)、AMPAC (QCPE#506) を導入した。そして薬物開発のための構造と活性との相関を調べるためかなり大きな分子の構造最適化を行っている。VAXは昼夜稼働させ、MNDO法およびAM1法計算はバッチジョブとして走らせている。

1987年に FACOM VP-30型スーパーコンピュータが利用できるようになったので、AMPAC (QCPE#523) を用いて性能テストしたところ、VAXの約20倍速いことが確かめられた。VAXでは1-2日かかった計算でも数時間で結果が得られることになり大いに時間の節約になるものと期待している。

ab initio法は GAUSSIAN 82 (カーネギーメロン大) を導入して VAX上で利用している。研究所の現状では基底関数として 6-31G* を用いて構造最適化を行う場合、可能な分子の大きさはアニリン程度である (cpu timeは2週間以上必要)。この方法は入力が容易で使いやすい。

分子力場法は1978年にMM1/MMP1 (QCPE#318) を導入した。この版はパラメータの数も多くなく計算できる分子は限られたが、ピシクロ化合物などについて構造の最適化を行った。1987年にMM1/MMP1法より精度が高いMM2/MMP2法を MDL社より購入した。この版はパラメータもかなり増加されている。この方法はステロイドホルモン類の分子構造の推定に非常に役立った。しかし一般の薬物関連化合物では計算できるものは少ない。一方、分子内水素結合が重要な働きをしている分子の構造を決める場合は大いに役立つことと期待している。

研究所で最も利用されているプログラムはAMPACの中のMNDO法とAM1法である。これらのプログラムは Zマトリックスで入力する必要があり、簡単な分子はよいが大きな分子では入力が煩わしい。分子の構造のデータは Cartesian座標と connection tableから成る mole file形式でセーブしているため、mole fileから Zマトリックスに変換するプログラムを作り、これらの計算プログラムを容易に利用できるようにしている。AMPAC法、MOPAC法ともに簡単なキーワードでコントロールできるので非常に使いやすい。計算結果は一つの out fileに書き出されるが、固有値、固有ベクトルなどは指定すると新たに別の fileに書き出されるようにすると他に利用しやすいであろう。

コンピュータやパソコンが普及し、またこれら分子軌道法および分子力場法のプログラムが容易に入手できるため、MO計算や分子構造の決定 (推定) が誰でもできるようになった。しかしながらこれらの方法の適用と得られた結果の解釈には十分注意が必要である。たとえば p-置換アニリンの構造を最適化する場合、ab initio法において 6-31G* 以下の基底関数を用いてはアミノ基の構造について観測されているピラミッド性を正しく再現できなかった。いずれにせよこれらの計算プログラムを使用する場合それらの方法の特長や欠点を十分認識した上で使用するよう心掛けている。

<住友化学工業 (株) 大阪研究所・吉田元二>

当社では昭和57年より QCPEの会員となり、研究者のニーズに応じて逐次プログラムの導入を行ってきた。現在のところ QCPEからは約50本のプログラムを導入しており、分子の活性あるいは物性発現メカニズムの解明、反応性の検討、安定構造の解析などに利用している。利用

しているコンピュータは本社の IBM、千葉研究所、大阪研究所および宝塚総合研究所に設置されている ACOS、高槻研究所の VAXと多様である。一部のプログラムに対しては当社と日本電気の共同開発による汎用分子設計支援システム ACACSがインターフェースを持っており、分子の三次元座標の入力、計算結果のグラフィック表示が容易にできるようになっている。以下 QCPEプログラムを中心とした当社の化学計算プログラムの導入状況について述べる。

非経験的分子軌道法：ab initio法のプログラムとしては GAUSSIAN 76, GAUSSIAN 80を QCPEより、GAUSSIAN 82をカーネギーメロン大学より導入している。このうち GAUSSIAN 76は IBM, ACOSで、他は IBMで稼働している。最近は特に GAUSSIAN 82の利用が増加してきている。ただし計算スピードが十分でないということから一つの計算に何日もかかっている状態であり、スーパーコンピュータの利用が早晚必要となるものと考えている。

半経験的分子軌道法：QCPEからの導入が最も多いのがこの分野のプログラムである。即ち CNDO-S, CNDO 2 3 R, CNDO 2 U, CNINDO, MINDO 3, MNDO, AMPAC等々のプログラムが導入されている。これらの使い分けは対象とする分子あるいは何を解析したいのかに応じて行っている。分子の安定構造の解析には最近では AMPACの利用が多くなってきている。これらの多種類の (ab initio法も含めて) 分子軌道法プログラムの中から対象とする問題に適切な手法を選び出すエキスパートシステムの開発というものも面白いテーマであろう。

分子力場法：分子力場法のプログラムとしてはMM1, MMPI, MM2を古くから導入している。しかし現実に当社で解析をしたい化合物にはヘテロ原子を含むものが多く、現状のプログラムにおけるヘテロ原子のパラメータ不足から殆ど利用されていない。しかし AMPACなどの分子軌道法による安定構造の解析は計算時間がかかるという問題点があることから、最近精力的に研究の進められている分子力場法のパラメータ強化の動向に非常に期待をしている。

その他のプログラムとしては QCPEよりスペクトル関係のもの、数値解析の関係のものなどを導入し利用している。またカリフォルニア大学の Kollman教授より AMBERも導入し、タンパク質の構造解析への利用を行っている。

以上当社で導入している計算化学プログラムの主なものを列挙した。これらのプログラムを当社が開発に関与した ACACS, BIOCES (北里大学梅山助教授のご指導のもとに当社、住友製薬、キッセイ薬品、キッセイコムテック、日本電気が開発中のタンパク工学と医薬品設計のためのシステム) との有機的な関連のもとに活用し、統合的に薬物設計あるいはもっと広く分子設計を支援し、計算機実験とでもよぶべきジャンルを確立していきたいと考えている。

<第一製薬(株)中央研究所・諸井黎明、坂元みや子>

理論化学計算を実施する場合その目的とするところはこれから行おうとすることの予測と結果に対する考察のためのデータ作りに分けられる。製薬企業としては莫大な情報量を基に新規な化合物をドラッグデザインし、そのデザインされた化合物で主な薬理作用、安全性及び臨床での効果などが期待通りに認められればそれを上市し、皆様のお役に立てるということになる。

この過程の中で理論化学の果たす役割はドラッグデザインを考える場合の試行錯誤の過程で参画することである。以下に当社での QCPEプログラムの使用経験について簡単に紹介したい。なお使用コンピュータは富士通製 M-360である。

CNDO: 使用目的は化合物の大まかな total energyを求め活性コンフォーマーの予測を実

施することである。分子量として400以下の化合物であれば約1時間程度で結果が得られるので重宝である。

MNDO: CNDOで求めた座標を基に本プログラムでは座標の最適化を改めて実施している。座標は torsion angleで入力するため慣れるまで少々苦労がある。また入力ミスが生じた場合は計算せず、どこが間違えたかを調べるには分子模型と対比しながら確認する必要がある。optimizationの数が多くなると結局1日を費やすということになる。MNDOでの結果は大方満足すべきもので、これから得られた HOMOおよび LUMOの軌道関数は Diels-Alder反応の場合の productsをよく説明してくれた。

MMI: 簡単な化合物の配座解析に適用するなら秒単位で結果が得られるので非常によく、プロトンの位置に関してもX線結晶解析の結果と比べても少しも遜色がない。しかしながら製薬企業の中で扱っている化合物群には複雑なものが多く、MMIがこれら化合物群には適用できないのは実に残念で、適応パラメータの拡大が切に望まれる。

CEPP: 生理活性ペプチドの活性発現配座を求めるには有用ではあるが、MOを稼働するより時間を消費するとの印象が強い。入力座標の設定にも格別の考慮を払う必要があり、力で計算を実施する前に NMRその他から得られる情報を最大限利用し、初期座標を絞り込んでおく必要性がある。

ELPO: 本プログラムでの静電ポテンシャルは二次元の出力のみで、三次元的出力はできないのであるが、化合物のある面での静電ポテンシャルマップであってもしっかりと情報を提供してくれる。我々は主に窒素原子に着目し、プロトネーションすべき位置の検討に用いている (pKa値との対応を考慮して)。

研究者が理論化学計算をこぞって利用することを願っている。それには計算の精度や演算速度などに関してまだまだ改良の余地がありそうである。

<大正製薬(株)総合研究所・北村一泰>

当研究所では約30の分子計算プログラムが稼働状態にあるが、これらのほとんどは国内外の大学、QCPEから導入された。しかし多くの場合、計算結果を仮説に従って総合的にまとめ上げるには多数の周辺プログラムを必要とするので、そのためのプログラム約100本も同時に稼働している。使用頻度の高い分子計算プログラムとしてはやはり MO法ではMNDO、CNDO/2、GAUSSIAN 80、MM法ではMM2'そしてMD法ではAMBERである。他社と異なったところではMM2/MM2'の力場で分子動力学シミュレーションを行うMM-AMBER(社内の仮称)、コンフォメーション変化に伴う内部回転角間の連動を測るSPAD、そして数式処理に対してはREDUCEなどがよく利用されている。以下に幾つかのプログラムについてその利用現況を簡単に紹介する。

MM2/MM2'とMM-AMBER(仮称): MM2/MM2'は炭化水素系化合物について短時間で精度よく力場計算を行うことができる重宝なプログラムである。入力は多少の煩わしさもあるが、QCPEにある入力作成用プログラムを利用できる。ただ分子が大きくなると内部回転自由度が増加するので最適なコンフォーマーを見つけるのが難しくなる。炭化水素系生理活性化合物、たとえばロイコトリエン、ポリプレノールやコレステロール合成阻害剤などのコンフォメーション解析は極めて興味あるテーマである。しかし力場には問題なくとも上述の内部回転自由度の問題ゆえに困る場合がある。1つの解決法としてはMM2/MM2'力場と

分子力学 (AMBER) とを合わせることである。そこで AMBER の変更 に約 3 か月を費やし MM-AMBER の作成を試みた。現在はある生理活性炭化水素の MD 計算を行って興味ある知見を得ている。また将来リン脂質膜の流動性のシミュレーションが行えるよう力場を拡張している。

GAUSSIAN 80: GAUSSIAN 80 による ab initio の計算をもっぱら分子力学、分子力学計算のパラメータ決定のために使っている。ab initio 計算は IR スペクトル、ダイポールモーメント、X 線解析、分子衝突などの実験と同様に、電荷、伸縮、変角、ねじれ角、ファンデアヴァールス力のパラメータ決定の有力な手段となる。Fe や Ni 程度の重い原子になるとディスク容量の制限もあって frozen core 近似をする必要が生じる。現在、力を GAUSSIAN 80 の外場としてとり入れる計算 (QN+NM 計算) を試運転中である。

SPAD (Statistical Program for Angular Data): コンフォメーションの変化は非共有結合原子間の相互作用に起因するので、その影響は内部回転角の変動に現れるはずである。そこでもしコンフォメーション変化を支配する幾つかの内部回転角間の相関をフォーミュレートできれば、CPU を要するエネルギー計算なしに構造変化の予測が可能である。このプログラムは一連の誘導体の分子構造が知られている場合に内部回転角を計算し、連動するペアーをとり出し連動を回帰式の形で数式化する。その際角度データの特徴である周期性による問題点を解消している。入力 は原子座標もしくは内部回転角だけである。核酸ヘリックス、 β -bend などの構造予測に利用している。

REDUCE: REDUCE は代数式の処理のための言語の 1 つで、Lisp と同様にインタープリタである。確かに人間技では絶対不可能な、きわめて煩わしい代数式の展開、微積分、代数方程式の解法、くり出しなどをやってくれる。しかし基礎方程式自身は人間が作り出さねばならず、また長々しい結果を美しく意味のあるものにまとめ上げる処理も人間の命令に頼らねばならない。

< 武田薬品工業 (株) 中研化学研・神谷和秀 >

GAUSSIAN 82: 演算時間がかかりすぎ当社のハード環境では実用にならない。しかも基底関数のとり方の面でも精度の低いものではこのプログラムの長所が生かせず、ますます演算時間が長くなる。超高速コンピュータを用い力場パラメータの決定に使うのが有力な利用法であろう。

MNDO: 薬物など一般の有機化合物の構造最適化には主としてこのプログラムを使用している。ある程度演算時間はかかるが結果の信頼性は高い。最大の難点は水素結合を含む系には使えないことである。

MNDOC: このプログラムでは MNDOC, MNDO, MINDO/3, CNDO/2 などの計算が可能である。前項の MNDO 専用プログラムの方が使いやすいのでこちらはあまり使っていない。

CINMIN: CNDO/2, INDO の計算が可能である。CNDO は水素結合を含む系には有力であるが、本プログラム中の CNDO/2 は最適化機能の能率が悪く実用的でない。前項 MNDOC 中の CNDO/2 はこの意味では合格だが適用範囲が狭い。

Extended Huckel: 昔は多用したが、結果の信頼性が低いため最近では使用していない。

MM2: 精度が高く演算時間も短く有力なプログラムである。ただし致命的なのはパラメータ不足であり、当方が通常扱う化合物でそのまま適用可能なものは皆無に近い。有力なパラメー

タ導出手法の普及が望まれる。

MMIPI : 前項と同じであるがMM2より古いのでより問題が多い。

PCILO2 : 水素結合を含む系にも使え過去にはかなり使用したが、結合の方向に問題が多く見られたため現在は使用していない。

ECEPP : ペプチドには有力なプログラムである。構造最適化機能を当方で付加した。

AMBER : 旧版のため dynamicの機能はない。あまり使いやすいとはいえないが、適用範囲が広いのでペプチドには主として本プログラムを使用している。

構造最適化の目的にはペプチド系はAMBER、非ペプチド系はMNDOを主として用いている。各種 conformation間の比較にはペプチド系はAMBERまたはECEPP、非ペプチドの場合はMM2などを用いている。これらを通じての一番の問題点は力場パラメータの不足である。コンピュータの性能向上は顕著であるが ab initio法で気楽に計算できるにはまだかなりの年月を要すると思われる、それまでのステップとして力場パラメータの充実とそのための協力体制作りが重要であろう。

< 帝人 (株) 生物医学研究所・小谷野和郎 >

当社は合成繊維、フィルム、医薬品等を製造し、7研究所、7工場を有しているが、化学計算は研究所のみならず一部工場の技術部門に拡がりつつある。以下に集約してその概況を紹介する。

入力方法 (モデルビルダー) : 計算化学ではまず入力が問題である。すなわち各手法についての入力座標の発生とその座標間の相互変換である。分子力場法(MM)では当初はプラスチックのモデルを組んで物差しで測っていた。最近の分子軌道法(MO)では構造最適化ルーチンがついているからさほど正確な入力が必要でないが、少し大きな分子になると大型機でも時間がかかるし、構造が悪いと SCF計算が収束しない。そのような場合は以前のように類似の結晶座標をケンブリッジのデータベースから検索し切り張りして構造を作成する。最初からできるだけ正確な三次元構造を作るのである。私自身はX線解析と平行して分子計算を行うことが多いのでこの方法をよく使う。市販されているいわゆる統合化学システムにはそれぞれ特徴が見られ、点と線の結合関係の構造式検索から発展してきたもの、コンホメーション解析からのもの、構造・活性の回帰分析からのもの、既存の三次元データを利用するものなどにわけられると思うが、私達のは一番最後のものに近い。この種のものとしては日本 IBM社の分子設計支援システム (MDS-S)、Chemical Design社のCHEM-Xなどが挙げられよう。いずれにせよ入力の労力が軽減されるので、どれか一つ統合システムを持つことは便利と感じている。

MM法 (パソコンから大型機まで) : もっぱらMM2' を使っている。オプションが豊富で、結晶座標の入力、メチル、メチレン、フェニル基などの置換基の発生ができるし、もともと収束が速いからモデルビルダーがなくともかなりの構造を作成できる。ただし縮合環の場合は環内のボンドの回転などに労力を要するので、結晶座標をもって来た方が速いようである。またよくいわれるパラメータの不足については、ねじれパラメータが1、2個だけないような場合には MOに行くことにしている。脂肪鎖の連続回転を扱う treeは便利な機能であるが、ボンド数が多くなると幾ら MMで大型機でも時間がかかる。そこで最初は収束幅を粗くしてとりあえず各座標を発生させてから、後は小分けに詳しい計算をするなどの工夫をしている。さらに MMはパソコンでもできる場合もあるし、一般に計算化学に馴染んでもらうためにもパソコン版とミニコン版も備えている。パソコン版は当社の電算部門が開発したモデルビルダーと描画機能を持つ

たMM2KITで普及に役立っている。かくしてパソコン、ミニコン、メインフレームのネットワークを構築することが課題となってきている。

M0法(ワークステーションとメインフレーム)：ほとんどMND0で、GAUSSIAN 82の使用頻度は少ない。通常は一旦MM法を経たものをM0にかけている。得られたnet chargeから静電ポテンシャルの計算などの機能もあるが、これには市販のパソコン版も使っている。HOMO, LUMOの計算がよく行われるが、軌道表示にPSI77を使う。絵で見る量子化学はアピールしやすい。M0法ではよい構造を入力しても時間がかかり、他の計算をストップさせて苦情を言われることもたびたびあった。事務計算ではメインフレームのCPUを5分以上も食うということは信じられないらしい。そこでワークステーションとメインフレームの問題が出てくる。画像処理のような転送には情報量の多いものはワークステーションに、CPUを食う計算はメインフレームというのが一つの方法であり、他は一つのワークステーションに一つの機能を専有させることかと思われる。最近GAUSSIAN 86にはミニコン版があるとの連絡を受けている。

ECEPP, AMBER：これらも時たま使う。ただ純粋なペプチドでなく他の成分が入ったりモディファイされていたりすると困る。力場の内容がよく分からないからである。力場は色々発表されているが、その由来がよく分からないと結果の信頼性に疑問が持たれてしまう。

以上当社の計算化学の浅い経験を述べさせてもらったが、ともかく最近のコンピュータの発展には驚くばかりである。つい先頃までメインフレームでなければとうてい無理と思われた計算をミニコンがこともなげにやってしまう。またX線回折のような膨大な測定を夜中にやっておいてくれる。私の場合学生の頃から量子力学に憧れながら化学企業で現実を活用できるようになると思わなかった。新しい革命的時代の中に居るのだと身をもって感じている。

<(株)東芝 総合研究所化材研・酒井真理子>

理論化学計算プログラムは以前は大学で理論化学系を専攻した研究者(もしくは入社後に強い興味を抱いて勉強した一部の人間)だけのものではあったが、最近では理論化学系を専門以外とする人にも日常的なものとして利用されるようになってきている。誰でも使うという状況になれば、中には計算した結果を受け取ってそれで満足してしまい、結果を正確に解釈しきれずに終る場合がないとはいえない。しかしこの分野に関心を示す人が増加してきているのは喜ばしいことである。特に化学だけではなく固体物理屋とよばれる人達にも徐々に使われつつある。各種の化学計算プログラムの中で一番利用頻度の高いのは分子軌道法関連のもので、その多くはQCPEに登録配布されているものである。

分子軌道法：実験よりむしろ理論化学的なことを好む人(または計算が好きの人)はほとんどCGTO基底系のab initio計算を利用する。これには当然のことながら大型汎用機、スーパーコンピュータが使われている。どのような目的のためにどの基底関数を選択すべきかという計算を始めるところにも専門知識を必要とするため理論化学系以外の人にとっては敷居が高いものに感じられる。より正確な値を知るにはab initio法を使うべきだという考え方は浸透してきている。ESRスペクトルと対応づけて考察しようとする場合、金属錯体を取り扱いたい場合など使用度は増える傾向にある。一方、半経験的分子軌道法は計算量が少なくプログラムも小さくて扱いやすい、大規模分子系への適用が比較的容易、大型汎用機の他にスーパーミニコン、EWS、パソコンの上でも動かせる状態になっているなどの理由から利用者が多い。プログラム中のパラメータ値を自分で設定するとか、プログラムを書いてみるといったことも試みられてい

る。利用されるのは分子の双極子モーメントやイオン化ポテンシャルがどの程度か相対的に比較すればよい場合、反応性について考えるためのデータとしたい場合などである。後者の場合分子軌道という化学の画期的な概念が定量化された形で得られるので、議論のためのデータの一つとして役立っている。

分子力場法：分子軌道法に比べるとその利用者数は少ない。また実験結果と照合して使う場合も余りない。実験に関連した仮説を有機電子論的ではなくむしろ分子の形に関連づけて立てるような場合コンホメーションを視覚的に捉えるために利用する（結果を幾つかの表示プログラムへの入力データとする）。分子力場法で得られた原子の座標値を分子軌道法への入力に使う例が講習会などで紹介されているが、そういった利用法は今のところほとんどされていない。

使いやすさ：何を不便と感じるか個人差があって一般的にこれとはいいがたいことが多いが、分子軌道法の場合には大規模分子系を *ab initio* で計算しようとする場合に多くの計算時間が必要なこと、また分子力場法ではパラメータが不十分でいざ使おうとするとパラメータを算出することが必要となる、などである。また企業の場合研究対象となっている化合物が（契約などで）公表できない（有効なアドバイスをいただけない）ことを非常に残念だと感じる場面も多いようだ。

<東洋紡績（株）総合研究所・相川泰>

当研究所ではコンピュータケミストリの応用を促進するための専門の人員と計算機を置き、次のような目標で研究を進めている。

- 1) 分子の反応と性質について予測や解析をする。
- 2) スクリーニングに活用し実験回数の削減を図る。
- 3) 現象の本質的理解を深める。

さらに一般の研究員が気軽に計算できるように、

- 4) 各種化学計算プログラム用の入力ファイル作成ツール GUMMOS を開発した。
- 5) 各種の化学計算プログラムをパソコンに移植した。

現在はようやく道具立てが揃い計算例も少しづつ出はじめたところでまだまだ未熟であるが、ともかく第一歩を踏み出した。

PPP：QCPE167を北浦先生（阪市大）がパソコンに移植、改造されたものをさらに改造した。有機色素などの設計に利用。パラメータの選択が難しく任意性が残るが、パソコンレベルでも実用的な大きさの分子を扱える点で貴重である。

EHMO（QCPE011, QCPE344）：全価電子を扱う場合分子の大きさや含有原子種によっては唯一の計算法となる場合がある。また電子密度や分子軌道図の描画（PSI/77）用の分子軌道計算にも利用。

CNDO/2（QCMP001, QCMP438）：かなり正確な電子密度を計算したい場合で分子の構造が比較的オーソドックスな場合に使用。標準的な構造でないときにはMMで最適化するかMNDOを使う。

CNDO/S（QCPE174, QCPE382）：PPPでは不満足な場合（非平面分子、 σ 電子の効果が大きい分子）の吸収波長の計算に使用。

MNDO（QCMP002）：多くの場合はこれを使っている。分子構造の最適化ができ結果の精度も高い方法だが万能ではないため、近々MOPACを導入しAM1やMINDO/3を相補的

に使用する必要があると考えている。

MM2' (QCMP004に大沢先生(北大理)が手を加えられたもの)、MMP1:主にCNDOやEHMOを使う前の構造最適化に用いる。速いのが取柄だがパラメータがないときはお手上げの状態である。

非経験的分子軌道法:研究者が興味を持つような大きさの分子は現有の計算機では扱えないため使用していない。将来的にはGAUSSIANなどの導入を考えている。

現在化学計算を利用しているのは数名以内であり、そのうち実際にプログラムを動かす人はさらに少ないが、今後は人数も計算量も増加すると考えられる。そのために以下のような課題があると考えている。

- 1) パソコン、EWS、大型計算機を含めたネットワークの構築。
- 2) 計算結果の図示、解析ソフトの充実。
- 3) 計算および解析による問題解決のノウハウ、実績の蓄積。

<東レ(株)基礎研究所・大野清隆>

10年前、有機合成を志す化学者にとってコンピュータは全くといっていいほど無縁のものであった。有機合成は実践の学問であり多くの実験をこなすことが合成化学者の誇りでもあった。しかし最近のコンピュータ技術の発達にはコンピュータケミストリという新しい学問分野を生み、未知化合物の特性を実験によらないで予測しようとするいわゆる分子設計の手法がにわかに脚光をあびるようになった。これらの時代の進歩をみるにつけ我々有機合成を仕事とする者も無関心を装っていたのでは時代に取り残されてしまうという危機感すらもつようになってきた。

我々も5年程前にまわりの環境に触発される形でコンピュータケミストリに興味をもつようになった。初めは分からないままに幾つかの研究会に参加するなどして各種の分子設計システムが存在することを知った。デュボンのTRIBBLEなど多機能な分子設計のための総合的システムが欧米の企業内で現実に稼働していることを知り、弊社においても分子設計システム構築の必要性を痛感させられた。当初合成化学者が先頭に立ってこの種のシステムを構築することに大きなとまどいがあったが、システム関係の人の協力を得て何とか立ち上げることができた。その後徐々にではあるが機能の拡充も可能となった。現在ではユーザーである合成化学者が使いやすい合成化学者のためのシステム作りをめざしている。

有機合成の分野では薬物の構造と活性の相関、特に立体配座の解析が興味の対象となる。分子の立体配座解析を行うには解析すべき分子の初期構造を起こし、その安定構造を計算し結果をグラフィックスによりイメージ化するという一連の操作が必要となる。これらの実際の操作が合成化学者のレベルで自由に行えるのが理想的である。そのようなシステムを自前で作りあげるのも一つの方法であるが、最近では分子設計のための市販のシステムが多数開発されており、機能的にも優れていることからこれを利用することも可能である。我々の所では両者の長所を生かしてシステム作りを進めている。

初期構造の作成、分子のグラフィックス表示などは市販のシステムを使用するのが非常に便利であり機能的にもよくまとまっている。分子力場、半経験的分子軌道の計算については目的に応じて市販のシステムに組込まれた機能とQCPEなどから入手した計算プログラムを併用している。QCPEからはMM2, MOPAC, ECEPPなどのプログラムを購入し、市販のシステムと共通の結合座標を介して連動できるように改良した。本来QCPEのプログラムは特定の分野

において専門的な計算をするために書かれたものでシンプルで使いやすくできているが、構造入力やデータのアウトプット部分はほとんど整備されていないため、使用する人の目的に応じて大幅に手を加える必要がある。

たとえばECEPPによりペプチドの立体配座を解析する場合、QCPEから入手したプログラムでは一つのコンホマーのみを計算するようになってきている。通常ペプチドの立体配座を調べる場合、各結合のまわりの角度を変化させ可能なコンホマーすべてについてエネルギー計算を行い、最も安定なコンホマーを決定したいという希望が当然出てくる。そのためには計算に必要な初期構造を即座に発生させ、各コンホマーに付随した計算結果を編集する機能が不可欠となる。またMM2とMOPACでは使用する座標系が異なるため相互に変換できるプログラムを作る必要がある。

いずれにしても合成化学のレベルで機能的に作動するシステムを構築するには合成化学者とシステムエンジニアの連携プレーが必須である。

<日本化薬(株)総合研究所・古後義也>

我が社の研究部門における化学計算は主としてQCPEから入手した分子軌道法計算プログラムを用いて行っている。これらの計算を一般研究者が容易に利用できるようにするため自社でソフトを開発した。このソフトを使えばMACCS上で化学構造式を入力すると以下に列挙した各種の計算は特殊なオプションを除いてほぼ自動的に実行可能である。さらに計算結果の図形表示(立体配座エネルギー図、分子軌道図、電子密度図、静電ポテンシャル図、分子図など)も簡単に行うことができる。したがって標準的な計算を行う限りプログラムによる使い勝手の差異はほとんどない。

GAUSSIAN 80-UCSF(QCPE#446) : ハード上の制約のため基本的な有機化合物に関するSTO-3Gレベルでの単純計算がほとんどで、よりレベルの高い構造最適化計算などは例外的に行っているにすぎない。

PPP(QCPE#71) : QCPEオリジナル版にvariable B 、 γ 法を組み込み出力部分も大幅に改造したものを使用中である。有機色素の π 電子吸収スペクトルの計算にしばしば利用してきた。

CNDO/2, INDO(QCPE#315) : CNDO/2法は主に薬物の電子密度の計算に利用している。INDOによるラジカルの計算では原子数が多くなると収束しないことが多くなる。

CNDO/S(QCPE#315) : 基本的な有機色素について電子スペクトルと立体配座との関係を検討するために利用することがある。出力情報が豊富な点が魅力があるが、色素の吸収スペクトルの計算にはPPP法の方が実用的である。

CNDO/S(QCPE#261と#315を組合わせたもの) : S, P, Clなどを含む有機色素の電子スペクトル計算用で、3d軌道の寄与を検討するために開発し利用してきた。

MNDOC(QCPE#438) : 薬物の立体構造解析に最もよく使用しており使いやすいプログラムである。

DPCILO(A.Pullman) : QCPE#220と比較すると入力データ作成が容易であること、S, P, Clを扱えることなどの理由で薬物の立体配座エネルギーの計算には専らこれを使用している。

拡張Huckel(QCPE#344) : 金属錯体の計算に一時使用した程度で利用率は低い。プログラムの改造がしづらひように感じられる。

MM2'(E.Osawa, CBI研究会) : 入力データ作成にはCBIより入手したプログラムを使用

している。パラメータ値不足のため使用実績はほとんどない。

<藤沢薬品工業(株)新薬研究所・田中明人>

当社における理論化学計算は一般的な *ab initio* MO法、半経験的 MO法、分子力場法などの各種プログラムを用いずに、高木らによって開発されたオリジナルプログラム S I M P (Simulator of Inter-Molecular Potential) を用いて行っている。S I M Pとは現在のコンピュータ能力の限界(CPU timeなど)を考え、定量的な Drug-Designに必須と考えられる薬物-受容体 complex、薬物-溶媒分子 clusterなどに現れる分子間相互作用の計算を *ab initio* MO法の計算精度で、かつ半経験的 MO法の CPU timeで扱えるシミュレータを目的として開発されたプログラムである。

一般に分子間相互作用を理論化学計算により扱うためには高精度の近似の計算を必要とし、半経験的 MO法の中で最も信頼性の高い方法の一つである MNDO-MO法でさえ分子間力に関しては全く無力な状態にある。そこで高木らは新たに開発した"分子間パラメータ"を MNDO-MO法に導入することにより上記目的の達成を試み S I M Pを開発した。

現バージョンの S I M PはC, H, N, O, Fを含む弱い分子間相互作用を行う系(たとえば $\text{CH}_4\text{-C}_2\text{H}_6$ 系)から、強い相互作用の系(たとえば水素結合系)までの広い範囲の系に対して応用可能となっている。

参考文献:T.Takagi, A.Tanaka et al, Bull.Chem.Soc.Jpn. 59, 1317 (1986)

<松下電工(株)総合技研高分子研・安田歩>

現在のアプローチとしては材料開発を効率よく進めるために計算化学による計算結果を開発業務に応用する「スキル」の検討を進めている。したがってプログラム開発、システム開発よりも計算と実験とのインターフェースの開発に注力している。応用分野としては有機合成高分子材料の開発においてその材料設計、合成設計を対象としている。その中でも現在は物性予測にポイントを置いている。

GAUSSIAN 82:ポリマー合成用モノマーの反応予測、モノマーの安定分子構造の予測に使用。計算結果の信頼性は高いものの低分子しか扱えず演算時間も長い。したがって開発業務で使用するには計算対象が限られる。

MOPAC ver.3:ポリマー合成用モノマーの反応性予測、モノマーの安定分子構造の予測に使用。モノマーの反応性予測において使用頻度が高い。これはモノマーがこのプログラムで計算できる範囲にある場合が多いからである。しかしヘテロ原子を含む場合に結果の信頼性に乏しい場合があるので注意している。

MM2, MM2':モノマー、ポリマーの安定構造、物性の予測に使用。分子力場法が比較的分子量の大きな分子をも計算できるためポリマーを開発対象としている当方では最も使用頻度が高い。しかしヘテロ原子を含む場合にパラメータが不足する場合が多く残念である。

開発業務への応用を継続しながら、将来は計算と実験そしてそのインターフェースを含んだ広義のソフトウェアの方向性を見出していきたく希望している。

<三井東圧化学(株)総合研究所・小田研悟>

当社では各化学計算プログラム間の I/Oを有機的に結合したトータルシステム(システム名

: SAFFIRE) としている。これにより一般ユーザーは対話的に計算あるいは入力データの作成ができ、繁雑な入力フォーマットを意識せずに利用できる。以下に現在利用しているプログラムについて言及する。

非経験的分子軌道法 (ab initio法) : GAUSSIAN 80, 82は入力フォーマットが簡便で各計算オプションもキーワード化されており計算指定は容易であるが、計算時間、使用ファイルが膨大であるため、残念ながら一般ユーザーが気軽に使用できる状況にない。現在は構造解析データが報告されていない結合様式 (モデル化合物) の構造評価の目的に主として利用している。

半経験的分子軌道法 : 半経験的分子軌道法は ab initio法と比較して計算時間は短く実用的である。また次に述べる分子力場法が現在ヘテロ環化合物にはほとんど利用できないこともあり、構造解析や化合物の基本的な性質を知る上で主にこの方法を利用している。プログラムとしてはEHMO, PPP, CNDO/2, CNDO/S, INDO, MINDO/3, MNDO, AM1などを揃えているが、主として利用しているのはMINDO/3, MNDO, AM1を統合した分子軌道法パッケージMOPACである。MOPACは GAUSSIANと同様に計算オプションがキーワード化されており使用は簡単である。だが多量の実行領域を必要とし原子数、原子軌道数を制限せざるをえないため大きな分子への利用には工夫がいる。当社では機能を抑えたプログラムを開発して対応している。また半経験的分子軌道法には上記のように多くのプログラムがあるので、計算しようとする化合物系と精度との関係を踏まえて適切なプログラムを選択する必要がある。

分子力場法 : MM2/MMP2, MM2', MFO, ECEPPなどを揃えているが、それぞれ計算できる化合物群が限定されており、実際には現実的な化合物に利用できない場合が多く、前述の分子軌道法による構造最適化に頼っている。ただしそのような場合でも化合物によっては類似のモデル化合物を設定することで計算可能なものもある。MM2' は自由度の高い化合物の最安定構造を求めやすくするために効率のよい TREEオプションを有しており、これを用いると計算時間はかかるが計算設定の手間が省けるため重宝している。現在、応用範囲の広い力場法の出現を念願している。

以上述べてきたプログラムを使用するにあたって問題になるのが入力データとして必要な初期座標であるが、当社では線形入力により手軽に立体構造を作成できるプログラム STERICI を主に利用している。

<三菱化成工業 (株) 総合研究所・中村 振一郎>

分子科学計算とりわけ化学計算に対する要求は年々増大するばかりであり、理論化学に係わってきた者として正に隔世の感がある。当社においても富士通ベクトルコンピュータ VP-50を導入して以来この傾向は特に顕著である。実験化学者からの要求が厳しくなることは理論屋にとって何よりうれしいことである。というのはこれこそ新しいプログラムを開発するためのダイレクトな動機づけとなるわけであり、その作業を楽しんで行う正当化も自然に進行するからである。特に化学系の会社の中では電気系や計算機関連の会社と違って (といっても筆者は化学会社以外は外からしか知らないのではあるが) プログラムというものは決して自分で書くものではなく、どこか外の人々が書いたものを持ってきてれば全ては収まるものだという「常識」が依然として当然のこのようにまかり通っているのである。無論、既に完成品がどこにでもあって中味も決まりきったルーチンを1行1行自分で書くような愚行は行うべきではないが、何

といっても多少にかかわらず自分で手を入れたプログラムでなければ出てくる結果に血が通っている気がしない。筆者は *ab initio* のプログラムを ASTERIX という IBMOL-IV の流れを引くもので手ほどきを受けたせい、Pople らのグループが作ってプログラムの芸術品と別名をもつ GAUSSIAN 82 に対しては最も多用しているにもかかわらず、時折別の非経験的プログラムと結果を比べてみたくなる時がある。いっそのこと Pople らがロードモジュールいやもっと進んでチップの形でしか外に出さなくなれば話はすっきりするのかもしれない（とはいえ名のある会社の出したいいわゆる数学ルーチンにも時折誤りがあり、特にそれがロードモジュールしか公開されていない場合もある位だから、そういう時代がくるまでにはもっと本格的なソフト受難の試練が必要なかもしれない）。

以上のようなことを考えている者にとってプログラムに関する感想を求められた時に第一に思い浮かぶのは余りに多くの量子化学ソフトが外国製であるという事実である。日本の原子分子物理学をはじめとするいわゆる分子科学の基礎研究に対するかつての貢献は決して諸外国に負けずとも劣らぬものであったのが何故こうなってしまったのか不思議なことである。いずれにしても量子化学の講座を出た学生を益々企業が要求するようになればこの現状も決して暗くはないと思っている。それにしても米国の企業（大学や公的研究機関でなく）で華々しく展開しているバイオ関連分子計算ソフト作成競争に日本の企業はついに買う側でしか参画できぬまままで終るとは考えたくないものであるがどうなるのであろうか。

最も言いたかったことは以上であるけれども、プログラムの使い勝手についての感想を加えてから終えることにしたい。QCPE に登録されているいわゆる経験的及び半経験的分子軌道法（たとえば単純ヒュッケル法、拡張ヒュッケル法、CNDO/2 法、MNDO 法等）については今のところ現在の大型機があれば現実的なサイズの分子に関してほぼ計算可能であり（もちろん自社内で拡張した結果であるが）、I/O のインターフェースなどを工夫すれば質的に問題はほとんどない。無論これらを使いこなすということは十分に適用限界を知っているということであるから、結果については使う人のサイエンスが直接反映されることになり、問題はプログラムにはないことの方が多い。広く我々も用いている MN2 や MN2' についても同じことがいえよう。

しかるに非経験的分子軌道法は本来非経験的であるから誰にでも使うことができるはずである。事実基底状態の小さな分子を扱って満足してられるうちは確かにその通りであろう。しかるに少しでも現実的な系を対象とした時の使い勝手の悪さはなんと筆舌に尽くしがたい。特にサイズに比して急速に I/O が溢路となってしまうことである。ディスク装置の量は買うことで解決可能であるが、この I/O バウンド性はどの *ab initio* 法を用いても同じことであり、やはり根本的な計算機のアーキテクチャおよびハードの進歩を待つしかないであろう（半導体メモリの価格が桁違いになることはないものかとそればかり考えている）。

<三菱油化（株）中央研究所・朝倉立行>

我が社の計算化学プログラムとしては本年（昭62年）2月に MDL社より導入した CHEMLAB と、QCPEより取り寄せた分子軌道(MO)計算プログラムがメインである。CHEMLAB は DEC社のミニコン VAX 8200を本体とし、日本電気の PC 9801シリーズのパソコン15台を端末として利用している。QCPEよりの MOプログラムは半経験的プログラムとしては MOPAC, CNDO, CNDO/S を、非経験的プログラムとしては GAUSSIAN 80を富士通の汎用計算機 M170Fで利用している。筆者はCHEMLABを主に利用している関係上、CHEMLABを中心

とした利用状況を述べてみる。

分子力場法：CHEMLABではMM2/MMP2, MMFFの2種が利用できる。前者は現段階では最新版のものであるがパラメータの種類が少なく、ヘテロ原子を取り扱うことの多い当社では多くの化合物が計算不可能になってしまうので、後者のMMFFを利用することがほとんどである。CHEMLABでは構造入力からMMFFまでに至る操作が非常に容易になっている。MMFFは分子モデリングの本来の目的のほかに、双極子モーメント、生成エネルギーを求めたり電荷分布を求めるための前段階として利用している。MMFFでもパラメータの不足はあるが、CHEMLABの他の機能をうまく利用すると精度に問題はあがるが一応は求めることができる。

分子軌道法：CHEMLABでは拡張ヒュッケル、CNDO/2, MINDO3, MNDO, PCILLOの5種類の半経験的プログラムが利用できる。分子の構造の最適化が不要で電荷分布を求めるのが目的のとき、およびコンホメーション解析を行うときはCNDO/2を利用し、それ以外のときはMNDOを利用している。CHEMLABのM0計算は入力データは標準化されているのでオプションは少ないが、操作が非常に容易であるのでM0計算の普及に大いに役立っている。しかしMNDOはアウトプットの制御と励起状態およびラジカルの計算は不可であるので、この種の計算が必要なときは今後CHEMLABとインターフェースのとれているMOPACを利用していこうと考えている。

構造活性相関法(QSAR)：QSARについては説明変数の一部はCHEMLABの色々な機能を利用して求めている。しかし統計処理はCHEMLABの機能は利用せず、当方で作成したプログラムと北里大学の森口教授のALS法のプログラムを利用している。しかしまだCHEMLABとインターフェースをとっていないで単独で利用しているのでユーザーへの負担はかかる。

以上のように現在当社ではCHEMLABを中心とした計算化学を推進中であり、今後もこのシステムを核にして周辺をさらに拡大してゆきたいと考えている。

<持田製薬(株)安全性研究所・小貫慶昭>

分子の性質(薬理活性、光学的性質など)は分子の構造や電子状態と密接な関連があるといえる。QCPEにより頒布されている分子力場法(MM2', MMP1, ECEPP), 分子軌道法(GAUSSIAN 80, MNDO, 拡張Huckelなど)のプログラムを用いて分子に関する情報(最安定構造、生成熱、イオン化ポテンシャル、電荷分布、双極子能率など)を求め薬物設計に役立っている。

分子力場法はN.L.AllingerのMM2の改良版であるMM2'(北大・大沢映二助教授による)を中心に用い、芳香族などの共役系が含まれる場合にMMP1を用いている。MM2'(あるいはMMP1)は計算速度が速いというだけでなく、オプション機能として備えられているドライバ法、ツリー法も配座解析に大変役に立っている。MM2'(あるいはMMP1)は炭化水素について実験を必要としない精度で構造、エネルギー(生成熱)が求められる。しかし薬理活性を有する化合物の大半がヘテロ原子(N, O, ハロゲン, Sなど)を含み、それに対するパラメータが不足しているために有効に利用できないのが現状である。その場合Hoflingerのパラメータ補足法により構造についてある程度推測し、エネルギーについてはそれで得られた構造を初期座標として分子軌道法を用いて求めている。

分子軌道法は数年前まで演算速度の点で利用しにくいものであったが、最近のコンピュー

タの進歩 (CPUの能力の向上) と Pulayらによって実用化されたエネルギー勾配法により利用する回数が増えている。エネルギー勾配法によって構造の最適化、力の定数の算出が可能となり、さらに分子軌道法によって得られる情報 (電荷分布などの量子化学的パラメータ) が薬理活性との相関性を検討する上で非常に有効になっている。本来ならすべての分子について ab initio法である GAUSSIAN 80を適用したいところであるが、計算時間で制限され ab initio法と半経験的分子軌道法を併用している。原子数10個程度なら ab initio法を適用し、それ以外の分子については半経験的分子軌道法を適用している。半経験的分子軌道法として CNDO, MNDO, PCIL03, AM1などを用いているが、化学者にとってなじみやすい生成熱、イオン化ポテンシャル、双極子能率を手軽に得られるので MNDOをよく使用している。

分子力場法、分子軌道法のプログラムを用いていて不便を感じたり改善したらよい点が見つかる。①入力データの統一。座標データとしてカルテシアン座標、内部座標などがあり、結合関係を示すテーブルにも2~3の形式がある。②パラメータの充実。パラメータの不足により薬理活性を示す大半の分子について計算ができない (分子力場法)。③計算速度の向上。並列処理などの工夫により計算速度の向上があれば現在より大きな分子へ適用できるようになる。

<明治製菓 (株) 中央研究所・児玉佳男>

計算化学での我が社の状況はごく初歩的段階にあるので皆様の参考になるか疑わしい。現在利用しているプログラムは主に CBIを通じて入手したもので、分子力場計算は MM2', 分子軌道計算は MOSEMI を利用している。前者は誰もが経験するようにヘテロ原子を含む分子に対しパラメータがないことが多いので今のところ利用する機会は少ない。MOSEMIは CNDO/2, INDO, MINDO/3を含む半経験的 MOのパッケージで比較的使いやすいが、我々の目的に合うよう次の点の修正を加えた。①強制回転機能 (ドライバーオプション) の追加、②原子間結合次数の計算。①はコンホメーションエネルギーのためのもので結合回転軸は2軸までとした。②は軌道間の結合次数にかえて原子間のを計算するようにしたものである。強制回転の指定を行った場合の座標は一種の Zマトリックス入力 (内部座標形式) となるので、X線解析などのデータを利用するような場合はやや面倒になる。我々のところでは分子グラフィックスから直接 Zマトリックス形式への変換 (原子のリナンバーと内部座標出力) を自動的に行うプログラムを別に用意した。MOSEMIの MINDO/3は原子の組み合わせについての制約がやや多いので MOPACの使用も検討している。

最近、量子化学計算では ab initio計算が盛んであるが、通常我々が対象とする実用分子の計算への適用は当分先のことであろう。とりあえず目的に応じた精度があればよいとする立場で、半経験的 MOの限界をわきまえて種々の計算目的に対して上手に使う、そのための経験的蓄積を始めたということである。

<山之内製菓 (株) 中央研究所新薬研究所・古谷利夫>

この数年当社の研究部門のコンピュータ化が進められ、一応 DEC社のミニコンによるネットワークが形成された。ルーチ的に発生する研究データの数値処理、グラフ化、文書作成などに加えて、大口ユーザーとして我々のところで発生する X線構造解析や分子設計のための計算が分散された幾つかのミニコンによって行われている。

昭和61年の秋に分子設計のツールとして英国 CDL社の CHEM-Xを購入し μ VAX上で使用し

ている。CHEM-Xの中にQCPEのプログラムとのインターフェースがあり、従来は個別にMNDOやCNDO/2などの計算を実行していたが、CHEM-Xの中から実行し、その結果をCHEM-Xの機能を使って数値を見たりグラフ表示したりすることによって、短時間に効果的に利用できるようになった。従来の計算に必要な入力データを準備する手間と結果のアウトプットの中からほしい情報を探し、それを使ってさらに計算するといった仕事量はかなり大きいだけに、CHEM-Xのようなパッケージのソフトを使って機能的に効率よくできるメリットは大きいと感じる。QCPEの10個のプログラムとのインターフェースが用意されているが、よく使うのはCNINDO (274)、AMPAC (506)、MM2 (400)、VSS (249)、DENPOT80 (483) などである。カッコ内はQCPEのプログラム番号である。GAUSSIAN 80も使えるが、我々の計算したい分子では主に計算時間がかかりすぎるという理由でほとんど使わない。QCPEのプログラムの使用頻度はCHEM-Xの他の機能に比べてそれ程多くない。やはり頻繁に使う機能は分子同士の重ね合わせや、いわゆる active analogue approachに関する操作が中心となる。

CHEM-X以外のコンピュータ利用としては時間、頻度ともにX線構造解析の計算が多い。プログラムは東工大笹田教授の研究室で使用していたものをVAX用に手直しして使っている他にSHELX-86、MULTAN84を使っている。構造解析した結果はCHEM-Xでも読めるようにしてある。

QSARのためのプログラムはVAX上で使っているRS/1といういわゆる電子ノートと呼ばれているソフトウェアを使って自作した。約350の置換基について π 値などのパラメータを収納してあるテーブルからその値を取り出して、その後、不足のパラメータを入力し逐次回帰分析するプログラムである。

以上のようにまずネットワークを含むハードウェアの整備がされ徐々にソフトウェアの環境が良くなり、現在またCPUが不足になりハードウェアの環境改善が望まれるような状況にある。

年会プログラム

第56春季年会 化学情報・計算機化学プログラム

日時 4月1日(金)～4日(月)
場所 青山学院大学(渋谷区渋谷4-4-25)

XIF会場(11号館 1144 教室)

4月3日(日)〔化学情報・計算機化学〕

(9:50～10:40) (座長 工藤喜弘)

3XIF06* 有機化合物の自動構造推定システムCHEMICSにおける2次元NMRスペクトル情報の活用(その1)―2-D-INADEQUATE情報の解析処理について―(豊橋技科大)○須々田寛・船津公人・佐々木慎一

3XIF08 マイクロコンピュータによるNMR測定支援用データベースシステムの開発(豊橋技科大)高橋佐江・山浦一友○奥山 徹・阿部英次・佐々木慎一

3XIF09* ¹H-NMRスペクトルデータベースによる定性分析の試み(2)(日立計測・日立那珂)○田中保子・橋本正雄・服部忠鐵

(10:40～12:00) (座長 飯塚 健)

3XIF11 ミニフォーラム 化学におけるエキスパートシステムとファジィ理論(旭硝子)石田嘉明

3XIF15 ミニフォーラム ワークステーションで何ができるか?―化学研究を支援するために(富士ゼロックス)神保 旭

(13:00～13:40) (座長 中山 堯)

3XIF25 複数の包括表現併用による新しい観点からの有機合成設計(山形大工)○工藤喜弘・鈴木孝弘

3XIF26 有機合成設計システムCASINOの開発(5)立体化学の取扱いについて(化技研・富士通)○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・林 輝幸・湯田浩太郎・永井利枝子・樋高 透

3XIF27 化学構造式の線グラフ表現にもとづくグラフ特性量(2)(豊橋技科大)○高橋由雅・三浦竜一・佐々木慎一

3XIF28 人工知能言語A.I.TITの分子設計への応用(東工大資源化学研)○竹内 恵・黒田千秋・石田 愈

(13:40～14:20) (座長 石田嘉明)

3XIF29 置換クラスターモデルによる三次元アルミノケイ酸塩構造特性の検討(群馬大・工)佐藤満雄

3XIF30 1-オクタノール/水系分配係数の適切な推算法推定支援・自動推算システム(山形大工)○鈴木孝弘・工藤喜弘

3XIF31 吸入麻酔薬セボフルレンおよび関連化合物における構造活性相関(浜松医大・豊橋技科大)○白石義人・藤瀬 裕・池田和之・高橋由雅・佐々木慎一

3XIF 3 2 受容サイトの分子認識機構 (3) アミノ酸の光学異性体の識別 (東京農工大)

川原淳次・後藤教彰○安川民男・樋口俊章

(14:20~15:00) (座長 田辺和俊)

3XIF 3 3 複数半導体ガスセンサーとパターン認識法による化学物質の匂い識別の試み— (2) (豊橋技科大) ○阿部英次・金谷重彦・小林美学・高橋由雅・佐々木慎一

3XIF 3 4 パターン認識によるブランデー類の分類 (豊橋技科大) ○金谷重彦・勝見広幸・石川正己・宮下芳勝・佐々木慎一

3XIF 3 5 中止

3XIF 3 6 マイクロコンピュータによる分子構造高速表示プログラムMOLFASSの改良 (埼玉大工) 時田澄男○杉山孝雄

(15:00~16:20) (座長 阿部英次)

3XIF 3 7 ミニフォーラム 化学のためのプログラミング言語 (図書館情報大) 石塚英弘

3XIF 4 1 ミニフォーラム 化学者のためのネットワーク作り (東大教養) 竹内敬人・吉村 伸

※注: 講演時間はA講演10分(講演7分、討論3分)、B講演(*印)20分(講演14分、討論6分)です。尚、ミニフォーラム(3XIF 1 1、3XIF 1 5、3XIF 3 7、3XIF 4 1)は1件40分です。

★16:20より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。

第56春季年会 特別講演

特定テーマ「情報と化学—未来の情報技術」

4月1日(金) 特3会場(9号館930教室)

(10:00~11:00) (座長 清水 勇)

1. 脳の情報伝達経路としての神経網(東工大総理工) 加藤 武

(11:00~12:00) (座長 加藤 武)

2. 脳内における情報の流れを計測する(東工大総理工) 武者利光

(13:00~14:00) (座長 中浜精一)

3. 光通信の未来技術(NTT伝送システム研) 中沢正隆

(14:00~15:00) (座長 入江正浩)

4. 新しい光デバイス構想(神戸大工) 峯本 工

(15:00~16:00) (座長 宮田清蔵)

5. 超大容量光メモリー(電総研) 谷 俊朗

特定テーマ「化学研究のためのAI」

4月4日(月) 特1会場(4号館420教室)

(10:00~11:00) (座長 富永博夫)

1. 化学の理論とAI(東海大) 米田幸夫

(11:00~12:00)

2. 触媒設計とAI(名大) 服部 忠

関連行事

第16回天然物化学国際会議

主催 日本化学会・日本薬学会・日本農芸化学会

会期 昭和63年5月29日(日)～6月3日(金)

会場 国立京都国際会館(京都市左京区宝池)

講演申込締切 昭和63年1月31日(日)(必着)

事前割引参加登録申込締切 昭和63年3月15日(火)(必着)

主題 下記の4主題により、特別講演、招待講演、および一般ポスター発表(一部口頭発表)を行う。

A: Isolation and Structure Elucidation of Natural Products.

B: Syntheses of Natural Products.

C: Natural Products of Biological Importance.

D: Dynamic Aspects in Natural Products.

また、下記4テーマによるコロキウムも行う。

a: Marine Natural Products.

b: Chemical Communication between Bioorganisms.

c: Molecular Recognition in Natural Products.

d: Computer Use in Natural Product Chemistry.

招待講演

(コロキウム)

d: Computer Use in Natural Products Chemistry.

J. B. Hendrickson (Brandeis Univ., USA)

Systematic Synthesis Design: the SYNGEN Program

P. A. Kollman (Univ. of California, USA)

Use of Computer Simulation in Study of Complex Molecules

E. Osawa (Hokkaido Univ., Japan)

Application of Molecular Mechanics to Natural Product Chemistry

D. A. Pensak (E. L. du Pont de Nemours & Co., USA)

Molecular Modelling-Scientific and Technological Boundaries

S. Sasaki (Toyohashi Univ. of Technology, Japan)

Application of the Automated Structure Elucidation System (CHEMICS) to the Chemistry of Natural Products.

講演・参加登録申込方法 下記あて所定の申込書(セカンドサーキュラー)をご請求下さい。
セカンドサーキュラーを送付します。

連絡先 101 東京都千代田区神田駿河台1-5 社団法人日本化学会内

第16回天然物化学国際会議組織委員会(電話03-292-6168 担当中野)又は

565 吹田市山田丘1-6 大阪大学薬学部 北川 勲(電話06-877-5111 内線6141)

(第16回天然物化学国際会議組織委員会総務幹事)

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
 Chemical Information and Computer Sciences
 The Chemical Society of Japan

日本化学会
 情報化学部会

Volume 6, Number 2
 March 1988

目 次

部 会 行 事	
第11回情報化学討論会 (発表募集).....	1
部 会 記 事	
昭和63年度部会役員.....	2
関 連 行 事	
第16回構造活性相関シンポジウム.....	3
学 会 報 告	
国際情報知識コンファレンス ICIK '87.....	石塚英弘 4
国 内 の 動 き	
近畿化学協会コンピュータ化学部会発会記念講演会.....	9
講演会 “物質設計と材料の設計・創製の現場をコンピュータはどう変えつつあるか”.....	10
最近各社 NWS 性能・規格一覧表.....	11
海 外 動 向	
Meetings.....	15
文 献 紹 介	
本号迄の紹介文献一覧.....	17
Journal of Computational Chemistry (Vol. 8, No. 8 ~ Vol. 9, No. 1).....	19
Journal of Chemical Education (Vol. 64, No. 7 ~ No. 12).....	21
Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol. 1, No. 1 ~ No. 2).....	22
Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol. 27, No. 4 ~ Vol. 28, No. 1).....	22
Journal of Molecular Graphics (Vol. 5, No. 4).....	23
Computers & Chemistry (Vol. 12, No. 1).....	24
Journal of Mathematical Chemistry (Vol. 1, No. 4).....	24
部 会 員 名 簿	25

第11回情報化学討論会（発表募集）

共 催 日本化学会・日本薬学会・日本分析化学会ほか

日 時 昭和63年12月5日（月）～7日（水）

会 場 京都大学薬学部（京都市左京区吉田下阿達町）

京都教育文化センター（京都市左京区聖護院川原町）

交通：JR京都駅市バス乗場Aから、206系統、阪急烏丸駅から市バス201、31系統（以上いずれも熊野神社前または近衛通下車）。

地下鉄丸太町駅から市バス65、93、202、204、207系統（川端丸太町下車）。

京阪三条駅から京都バス5番乗場から全系統バス（川端丸太町または荒神橋下車）。

※なお同期間中に同じく京都教育文化センターにおいて第16回構造活性相関シンポジウムが一部重複して開催されます。

討論主題 1) 化学情報システムとデータベース、設計、製作と利用

2) 化学におけるコンピューターの利用

3) そのほか情報化学一般

講演申込締切 昭和63年7月31日（日）

1件ごとにB5判の用紙に次の事項を横書きで記入の上、下記あてにお送り下さい。

a) 講演題目

b) 発表者と所属（講演者に丸印）

c) 連絡先

d) 討論主題（上記の3主題のうち一つを記入）

e) 講演内容の要約（150字～250字程度）

f) ポスター発表の可否（発表件数が多い場合には、一部を掲示発表にお願いすることがあります）。

講演要旨締切 昭和63年9月30日（金）

講演1件について所定の原稿用紙4枚まで。他に半ページ大の英文のタイトル、氏名、要旨を記入したものを添付のこと（用紙は申込を受理次第送付します）。なお口頭発表はスライドのみに限らせていただきます。

懇親会 昭和63年12月6日（火）京都教育文化センターで第16回構造活性相関シンポジウムと合同で開催の予定。

講演申込先 〒606 京都市左京区吉田下阿達町 京都大学薬学部 町田勝之輔
（電話 075-751-2111 内線 4523）

部 会 記 事

昭和63年度部会役員

(部会長)	米 田 幸 夫	東海大学開発技術研究所
(副部会長)	佐々木 慎 一	豊橋技術科学大学副学長
(幹 事)	阿 部 英 次	豊橋技術科学大学分析計測センター
	安 藤 勲	東京工業大学工学部
	飯 塚 健	群馬大学教育学部
	石 田 嘉 明	旭硝子(株)研究開発部
	石 塚 英 弘	図書館情報大学図書館情報学部
	岩 沢 まり子	(株)紀伊国屋書店
	岩 本 振 武	東京大学教養学部
	内 野 正 弘	東京工業大学資源化学研究所
	大 沢 映 二	北海道大学理学部
	工 藤 喜 弘	山形大学工学部
	鈴 木 功	筑波大学電子情報工学系
	高 橋 由 雅	豊橋技術科学大学分析計測センター
	高 山 千代蔵	住友化学工業(株)宝塚総合研究所
	田 辺 和 俊	化学技術研究所
	中 野 英 彦	姫路工業大学工学部
	花 井 荘 輔	富士写真フィルム(株)足柄研究所
	広 田 勇 二	(社)化学情報協会
	藤 枝 修 子	お茶の水女子大学理学部
	藤 原 謙	筑波大学電子情報工学系
	船 津 公 人	豊橋技術科学大学工学部
	町 田 勝之輔	京都大学薬学部
	松 浦 育 敏	中外製薬(株)富士御殿場研究所
	宮 原 昶 中	三井東圧化学(株)システム部
	安 岡 則 武	姫路工業大学工学基礎研究所
	山 口 静 子	味の素(株)中央研究所
	山 崎 昶	電気通信大学
(監 査)	佐 藤 公太郎	富士写真フィルム(株)
	山 本 修	神田外語大学

関連行事

第16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・日本農業学会

日時 昭和63年12月5日(月)～7日(水)

会場 京都教育文化センター(京都市左京区聖護院川原町)

[交通] JR京都駅から市バスAのりば206、四条河原町より市バス201、31、地下鉄丸太町駅から市バス65、93、202、204(いずれも熊野神社または川端丸太町下車)、京阪三条駅から京都バス5番のりば全系統(川端丸太町下車)。

※なお同期間中京都教育文化センターおよび京都大学薬学部において、第11回情報化学討論会が一部重複して開催されます。

討論主題 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の相関関係の解析、およびドラッグデザイン。

講演申込締切 昭和63年7月31日(日)

1件ごとにB5判の用紙に次の事項を横書きで記入の上、下記あてにお送り下さい。

- a) 講演題目
- b) 発表者と所属(講演者に丸印)
- c) 連絡先
- d) 講演内容の要約(150字～250字程度)

講演要旨締切 昭和63年9月30日(金)

講演1件について所定の原稿用紙4枚まで。他に半ページ大の英文のタイトル、氏名、要旨を記入したものを添付のこと(用紙は申込を受理次第送付します)。なお発表はスライドのみに限らせていただきます。

懇親会 昭和63年12月6日(火)京都教育文化センターで第11回情報化学討論会と合同で開催の予定。

講演申込先 〒606 京都市左京区北白川追分町 京都大学農学部農芸化学科 岩村 倣
(電話 075-751-2111 内線 6116)

国際情報知識コンファレンス ICIK 87

図書館情報大学 石塚英弘

1. はじめに

昨年(1986)の11月11-13日、第2回国際情報知識コンファレンス(The 2nd International Conference on Information and Knowledge, ICIK 87)が横浜の神奈川県立ホールで行われた。海外からの参加者も多く盛んなコンファレンスであったし、31件にのぼる講演は各分野における情報と知識に関する研究開発の最新状況を伝えるものであった。また、このコンファレンスは日本化学会も後援しており、講演の中には情報化学やそれに関連した発表もかなり見られた。そのため、これに出席した私に本 CICSJ

Bulletin の編集委員から依頼があったので、紹介の文を書くこととなった。読者の参考になれば幸いである。

2. ICIK とは

第1回のコンファレンス(ICIK 84)は1984年に東京のプレスセンター・ホールで開かれ、そのメイン・テーマは「知識情報科学の展望」であった。今回はそれに続くコンファレンスである。主催は前回と同じく ICIK 87 組織委員会で、共催は神奈川大学、また後援は前回同様日本学術振興会をはじめとする団体と関連学協会である。名前を挙げれば、日本学術会議の情報学、文献情報、それにデータ情報の3つの研究連絡委員会、日本科学技術情報センター、それに今回は神奈川県も加わっている。学協会は電子情報通信学会、情報処理学会、日本化学会、日本分析化学会、日本薬学会、情報科学技術協会など多岐に渡っているが、これは ICIK が取りあげた情報と知識の問題が多くの学協会に関連していることを示している。組織委員会は藤原鎮男神奈川大学教授を委員長とし、DARCシステムの開発者であるDuBoisパリ第7大学教授ほか4名の海外委員を加えた10名の委員で構成され、実行委員会は神奈川大学の方を中心として構成されている(図1参照)。

3. ICIK 87の概要

次に紹介するように発表は色々な分野にわたっているが、本稿では化学に関連した発表を中心に紹介することとしたい。

Organizing Committee	Acting Committee
S. Fujiwara (Kanagawa University) Chairman	T. Kanno (Kanagawa University) Honorary President
Y. Fujiwara (Tsukuba University) Secretary	K. Inoue (Kanagawa University) Chairman
H. Chihara (Osaka University)	S. Kitagawa (Kanagawa University) Secretary
J. Osugi (Osaka Inst. of Technology)	A. Hattori (Kanagawa University)
T. Sakai (Kyoto University)	T. Kadoya (Chiba University)
H. Yamasaki (University of Tokyo)	Y. Sugitani (Tsukuba University)
J. -E. DuBois (University of Paris VII)	T. Teramoto (Kanagawa University)
E. Fluck (Gmelin Institute)	T. Yamada (Kanagawa University)
D. A. Lewis (ASLIB)	
H. S. White (Indiana University)	

図1. ICIK 87 の組織委員会と実行委員会

3.1 第1日目の講演

第1日目は基本的、概説的な講演があった。

図2のプログラムに示すように、このコンファレンスは藤原組織委員長の開会講演で始まり、引き続いて米国のインディアナ大学教授 White氏の基調講演があった。彼は同大学の図書館情報学部の学部長であるが、以前には雑誌論文タイトルの速報誌 Current Contents で有名な ISI社の副社長や米国の情報学会の会長も勤めた情報学の重鎮である。続いての招待講演者は英国図書館の副所長 Hill氏で、彼は情報学の国際学会 FID(International Federation for Information and Documentation)の会長も兼務している。英国図書館は科学技術・工業に関する情報を重要視しており、以前からオンライン情報サービスを実施しているが、彼はその分野のトップである。次の招待講演では数値データベースのための情報科学の一層の発展の必要性が述べられた。講演者 Lide氏は NBSの標準基準データ部部長で、CODATAのトップも兼務している。

午後の最初の講演者は中国の科学技術情報研究所(日本のJICST にほぼ相当する機関)の副所長であり、中国における科学技術情報の管理体制について報告があった。二番目は学術情報センターの根岸教授によるシステムの現状報告であった。同センターの情報システムは独自の新しい機能を持つ世界有数のシステムである。次いで、荒木らにより JICST化合物辞書システム STARS の報告があった。本 CICSJ Bulletin の読者にとっては、情報化学討論会の発表などで周知のシステムであろうが、海外の研究者の前で発表したことは有意義であった。

Nov.11 (Wed)

Opening: Welcome and Introductory Remark -- S.Fujiwara

1.General

- *1-1 The Role of Information in the Modern Age -- H.S.White (Indiana Univ.)
-Coffee-
- *1-2 Information Flow -- M.W.Hill (FID, British Library)
- *1-3 Developments and Future Problems in Numerical Information Sciences
-- D.R.Lide (CODATA, NBS)
-Lunch -
- 1-4 The Status of Scientific and Technical Information in China
-- Liu Zhaodong, Chen Tongbao, Chen Zhencheng (Institute of Scientific and Technical Information of China)
- *1-5 Development of a New Schema for Scholarly Information Flow in Japan
-- M.Negishi (National Center for Science Information System)
-Coffee-
- 1-6 Stereospecific JICST Chemical Compound Dictionary System STARS -- K.Araki, S.Komuro, M.Kimura, C.Maeda, M.Kaji et al. (JICST)
- *1-7 Policies, Practices and Prejudices: The Human Aspects of Information for Technology Transfer -- I.S.Farkas-Conn (FID/II, Arthur L.Conn & Assoc.,Ltd.)

図2. 第1日目のプログラム

* invited lecture

3.2 第2日目の講演

図3に示す講演が行われた。坂井京大教授の招待講演は IMES の報告であった。これは、ホストコンピュータ、ワークステーション、パソコンなどを接続した LAN を用いて、画像、音声などのマルチメディア情報を知的に処理しようとする総合システムである。この種のシステムは総合化学情報システムとしても興味深い。Rasmussen 教授の講演はマン・マシン・インターフェースの問題を認知科学的に考察しようとするものである。次の DARC システムの講演は DuBois 教授負傷のため来日でできず中止され、残念であった。Gmelin は無機、有機金属、錯体に関するファクト・データバンクを作っているが、2-4 ではその最新状況について報告があった。

CIS システムの開発者 Heller 博士からは、最近流行のエキスパート・システムに関する報告があった。その内容を一部紹介しよう。まず、エキスパート・システムの開発ツールとして最近 shell といわれるソフトウェアが使えるようになったことを述べた。これは最低限の機能として、推論エンジンと知識ベースを入力するための文法とを用意している。これに加えて、デバッキング・ツールと知識ベース構築ツールを持つものもある。以前 shell は LISP (または、より新しい言語 prolog) で書か

Nov.12(Thu)

2.AI, System Design, System

- *2-1 IMES Integrated Media Environment System -- T.Sakai (Kyoto Univ.)
- *2-2 A Framework for Analysis of Cognitive Work
-- J.Rasmussen (Riso National Lab. & Technical Univ., Copenhagen)
-Coffee-
- *2-3 DARC -- J.-E.DuBois (Univ. Paris VII)
- *2-4 The Gmelin Information System: The Gmelin Handbook and Gmelin Factual Databank
-- E.Fluck (Gmelin Inst.)
-Lunch -
- *2-5 Expert Systems in Chemistry -- S.R.Heller, D.W.Bigwood (US Department of Agriculture)
- 2-6 Digital Color System -- T.Takahata (Information and Communication Research)
- 2-7 Materials Data System for Modelling -- S.Iwata (Tokyo Univ.)
-Coffee-
- 2-8 Knowledge Based Approach for VLSI Structured Design -- S.Takagi, Y.Okada, M.Washisaka (NTT Electrical Communication Lab.)
- 2-9 Knowledge-based Natural Language Interface to Database -- K.Narumi, S.Hashimoto, Y.Yoshino, T.Hutamura (Fujitsu Ltd.)
- 2-10 A Model for Knowledge Based Process Control Systems -- A.Masui, S.Tano, M.Funabashi (Systems Development Laboratory, Hitachi Ltd.)
- 2-11 MINERVA: An Integrated Biomedical Computing Environment as a Model for Creative Intellection Support System -- T.Kaminuma (Tokyo Metropolitan Inst. of Medical Science)

図3. 第2日目のプログラム

れ、大きく高価なコンピュータを必要としたが、今はC言語や他の言語で書かれたものもあり、\$100程度の値段でパソコン上で動くものも出てきた。今では、このような shellを使って開発されたエキスパート・システムも多い。さらに講演者は、食物中のセレンに関する発表済データを評価するエキスパート・システムを報告し、未知の有機化合物の構造説明のためのスペクトルの知識ベースを作るプロジェクトを説明した。

2-7では、材料設計のために物性のデータベースと知識ベースが必要であることが述べられ、そのようなシステムが提案された。ここで知識ベースとは、特別な条件下における物性データを推定するためのものである。2-8から10は NTT、富士通、日立の研究所による情報工学や情報科学の分野における AI の講演であった。2-11は情報化学討論会でも発表された MINERVAシステムの講演であった。

3.3 第3日目の講演

図4に示すように、13件という3日間のうち最も多い件数の講演があったが、その中でコンピュータを用いる翻訳システムの講演が3件あり、また用語の多言語データベースの講演があったことが注目される。この点でも国際会議と呼ぶに相応しいコンファレンスであった。最後の講演では、このコンファレンスに先立って行われた、安全管理に関する国際シンポジウムの報告がなされた。インドにおける化学工場爆発事故やチェルノブイリ事故の例を見るまでもなく、安全管理は化学、工学、情報など複数の分野に渡る重要な問題であり、今後の進展を期待したい。

4. おわりに

このコンファレンスについては、近いうちにプロシーディングが出版されるとのことであるので、興味のある方はそれをご覧いただきたい。ICIK 87を企画、運営された関係者の方々、誠に御苦労さまでございました。

Nov.13(Fri)

3. Media

- *3-1 Unification of Information Science and Artificial Intelligence
-- M.Nagao (Kyoto Univ.)
- 3-2 Computer Environment of Meaning Structure Representation and Manipulation in Machine Translation System (LUTE) -- K.Kogure * and H.Nomura**
(ATR International * , NTT Basic Research Lab. **)
- *3-3 Developments in Classification Theory and Method -- F.Miksa (Univ. of Texas at Austin)
-Coffee-
- *3-4 Analysis of Scientific and Technical Terms for Multilingual DB Access Systems
-- Y.Fujiwara, T.Itoh, Lee Won Gyu (Tsukuba Univ.)
- 3-5 Basic Architecture of Bibliographic Database on Statistical Information for More Efficient Use of Statistical Data -- Y.Matsuda* , S.Suoh**, T.Okubo *
(Hitotsubashi Univ.* , Kansai Univ.**)
-Lunch -

図4a. 第3日目午前中のプログラム

- 3-6 Bibliographic Database and its Authority File Structure -- S.Matsui (Univ. Library and Information Science)
- 3-7 A Translation System from English to Japanese, Korean and Chinese Using Case Frames -- S.D.Choi, L.Wu, H.Ishizuka, T.Yamamoto (Univ. Library and Information Science)
- 3-8 Availability of English-Japanese Machine Translation Using a Personal Computer-- H.Nakasa, Y.Kanamaru (Central Res. Inst. of Electric Power Industry)
- Coffee-
- 3-9 Problems in Representing Meaning and Organizing Knowledge Base -- H.Nakai (Jyoban Univ.)
- 3-10 The Basic Nature of Japan Medical Terminology and Database for English and Japanese-- R.Ito, M.Abe, K.Oota (Japan. Assoc. for Medical Sci.)
- 3-11 Representation of Knowledge in an Office Environment -- M.Jucquois-Delpierre (Univ. Düsseldorf)
- 3-12 Information Retrieval in Integrated Work Stations -- A.M.Pejtersen, J.Rasmussen (Royal School of Librarianship, Copenhagen)
- 3-13 Safety Management--A Subject for Information and Analytical Sciences -- S.Fujiwara * , I.S.Farkas-Conn ** (Kanagawa Univ.* , FID/II, Arthur L.Conn & Assoc.,Ltd. **)
- 3-14 Closing Remark

図4b. 第3日目午後のプログラム

国内の動き

近畿化学協会 コンピュータ化学部会 発会記念講演会

日 時 昭和63年4月13日(水) 13時より
会 場 大阪科学技術センター8階大ホール
設立総会 (13:00 ~13:40)

1. ご挨拶 社団法人近畿化学協会 会長 石川 三郎
2. 設立の経過ならびに運営委員の紹介
同 事業企画委員会 委員長 北尾悌次郎
3. 部会長挨拶ならびに事業計画の発表
同 コンピュータ化学部会長 吉田 郷弘
4. 部会入会のご案内

記念講演

1. 計算機と分子工学 (13:40 ~14:10)
京都大学名誉教授 米沢貞次郎氏
2. 私のコンピュータ化学史 (14:10 ~15:00)
豊橋技術科学大学副学長 佐々木慎一氏
3. ドラッグデザインにおけるコンピュータ科学 (15:00 ~15:50)
京都大学農学部教授 藤田 稔夫氏
4. 情報化学とその将来 (15:50 ~16:40)
東海大学開発技術研究所教授 米田 幸夫氏
4. 計算機と化学 (16:40 ~17:10)
京都工芸繊維大学学長 福井 謙一氏

発会記念講演会への参加は無料です。なお、講演会終了後(17:30頃より)記念パーティ(会費:3000円)を開催します。

参加ご希望の方ははがき又はファクシミリで、氏名、連絡先及びパーティ参加の有無をご記入の上、必ず下記までお申込み下さい。

部会へのご入会申込みについても下記までお問い合わせ下さい。

550 大阪市西区靱本町1丁目8番4号
(社) 近畿化学協会 コンピュータ化学部会
TEL 06-441-5531 ・ FAX 06-443-6685

講演会「物質設計と材料の設計・創製の現場を コンピュータはどう変えつつあるか」

主催 日本化学会関東支部

日時 昭和63年6月16日(木) 17日(金)

会場 日本化学会講堂(東京都千代田区神田駿河台1-5)
[交通] JR、地下鉄とも「お茶の水」駅下車、徒歩5分。

コンピュータの機能が飛躍的に向上するとともに各種のシステムソフトの開発が進み、研究開発の現場も大きく変わりつつあります。物質設計と材料創製の現場においては、コンピュータの活用領域が広がり、高度化しております。本講演会では、それらの現状と将来を明らかにしていただきます。これからこの方面の研究を計画されている方は勿論、既にこの領域で御活躍の皆様にも、きっと役に立てていただけるものと思います。

内容

第1日目

1. コンピュータの現状と将来 (9:30~10:30)
東京大学工学部 山本 良一
2. パソコンの利用 (10:40~11:40)
埼玉大学理学部 下沢 隆
3. 分子軌道法に基づいた反応設計に向けて
(12:40~13:40) 分子科学研究所 諸熊 奎治
4. 分子軌道法に基づいた機能材料設計
(13:40~14:40) 大阪大学基礎工学部 山口 兆
5. 分子力場法による分子設計・反応設計
(14:50~15:50) 化学技術研究所 田辺 和俊
6. 特別講演「物質科学とコンピュータ」
(16:00~17:00) 京都工芸繊維大学 福井 謙一

第2日目

7. 材料創製知識システム (9:00~10:00)
住友電工(株)基盤技術研究所 村上 茂三
8. 蛋白工学とコンピュータ、AI (10:00~11:00)
蛋白工学研究所 八尾 徹
9. 高分子材料のデータベース構築の現状
(11:10~12:10) 繊維高分子材料研究所 藤重 昇永
10. 高分子加工のシミュレーション (13:10~14:10)
-射出成形を中心として- (株)豊田中央研究所 高橋 秀郎
11. 薬理機能の設計 (14:10~15:10)
東京大学薬学部 板井 昭子
12. 分子設計トータルシステム私論 (15:20~16:30)
豊橋技術科学大学 佐々木慎一

参加費 (講演要旨代を含む) 会員12,000円、学生6,000円、非会員20,000円。
ただし、参加者自身が非会員でも勤務先が日本化学会法人正会員の場合は、会員(団体12,000円)扱いとなります。

参加申込方法 葉書または適当な用紙に「講演会参加申込書」と標記し、講演会名、参加者氏名、年齢、勤務先名、会員種別(会員[会員番号]・学生・非会員・団体)、連絡先(郵便番号・所在地・電話番号・勤務先か自宅かの別)、参加費金額、参加費支払方法(1. 当日持参、2. 現金書留、3. 銀行振込[住友銀行神田支店 普通口座No.358469 名義:社団法人日本化学会関東支部])を明記のうえ、下記あてお申し込み下さい。

申込先 101 東京都千代田区神田駿河台1-5 社団法人 日本化学会 関東支部
講演会係 (電話(03)292-6169)

最新各社EWS性能・規格一覧表

※この表は電波新聞社(週刊電波コンピューター)のご好意により、転載したものです。

メーカー名	機種名	CPU (クロック周波数)	クロック (クロック周波数)	演算 装置 (チップ構成)	主記憶容量 (メモリ構成)	拡張 メモリ (構成)	ハードディスク 容量	O/S	ディスプレイ装置	インターフェイス	買価価格	出荷年月
日本電気	EWS 4800	68020 (16 MHz)	68881 (16 MHz)	2 MB~32 MB	4 GB	68 MB~1 GB	EWS-UNIX (UNIXシステムVリリース2.0 準拠)	カラー20インチ	RS232C, VME BRANCH480, 取付用V2, S.XI, X.25	550万円~ 190万円~ 545万円~	61年11月 62年12月 63年1月	
	EWS 4800/10	68020(16 MHz)	68882(20 MHz)	8 MB~32 MB	"	81 MB~441 MB	"	モノクロ17インチ	"	117万円~ (ハードウェア)	63年4月	
	EWS 4800/50	68020(20 MHz)	68882(20 MHz)	8 MB~32 MB	1 GB	147 MB~2.1 GB	SV/G (UNIXシステムVリリース2.0 準拠)	カラー16色20インチ	GP-IB, RS232C, ESD802/3準拠のLMI(イ ーサネットワークを含む), TCP /IP, RJE	"	567万円~ (ハードウェア)	63年10月
富士通	FACCOM G-250 C	32ビット独自	"	"	"	132/284 MB	"	1.モノクロ14インチ 2.カラー1色14, 20インチ	"	"	"	63年10月
	FACCOM G-250	"	"	"	"	132 MB	"	"	"	"	"	63年10月
立石電機	SK-3100 モデル 70 E	68020 (20 MHz)	68881 (20 MHz)	20 MB (200 m)	16 MB/1 GB	350/700 MB	OMRON-S(UNIXシステム Vリリース2.1)	1.カラー16色16インチ 2.カラー16色19インチ 3.モノクロ17インチ 4.キヤプチャー15インチ	RS232C, GPIB, セントロ ニウム, SCSI, イーサネット, X.25, TCP/IP, NFS, SLIPなど " (SCSI準拠)	350万円 (OS, OSW, TCP/IP, OAS など含む)	62年12月	
	モデル 30	68020 (20 MHz)	68881 (16.67 MHz)	4/12/20 MB (200 m)	"	66/172 MB	"	"	"	"	62年10月	
日立製作所	Z900	68020 (20 MHz)	68881 (20 MHz)	4 MB~16 MB	2 GB	146 MB~1.5 GB	HI-UX/G (UNIXシステムVリリース2.0 準拠)	カラー256色15.07色 15/20/25インチ	RS232C, セントロニウム, SCSI, TRM, VME-NET (IEEE802.3準拠)	411万円~ (")	63年4月	
	11000 UNITOPIA モデル 20	68020 (16 MHz)	68881 (16 MHz)	4 MB~8 MB	セグメント ペーシング方式	40 MB~80 MB	IF-UX (Umiplex V リリース2.0に独自機能を 追加)	1.カラー16色14インチ 2.モノクロ15インチ	専用スロット(2), 汎用スロ ット(1), 汎用拡張, 3270-3170準拠, UTERRM, イーサネット 専用スロット(2), 汎用ス ロット(1), SCSI, PCリンク	1.カラー24/27 2,000円 3,000円 190万円 250万円	62年5月 60年11月	
沖電気工業	モデル 10 M	68010 (10 MHz)	"	2 MB~8 MB	"	"	"	モノクロ15インチ	"	"	"	60年11月
	モデル 10 M	68010 (10 MHz)	"	2 MB~8 MB	"	"	"	"	"	"	"	60年11月
三菱電機	AS 280 S	68020(16 MHz)	68881	2 MB~8 MB	"	40/140 MB	UNIXシステムV	16色16インチ, 16/20/24/2 8/21	LMI(IEEE802.3), V.24, X.21	587万円~ 455万円~ 432万円~ 390万円~	61年11月 62年9月 62年3月 62年9月	
	AS 1300 AS 1200 AS 1100	"	"	4 MB~8 MB 2 MB~8 MB 4 MB~8 MB	"	70/140 MB 40/140 MB 70/140 MB	"	"	"	"	"	62年4月
東	AS 240 S	SF 5010 (16.67 MHz)	Welltek 1164/1165	32 MB~128 MB (60 m)	1 GB	1156 MB~ 2300 MB	OS/AS 4.2 BSDシステムVの 移植化UNIX	16色16インチ, 16/20/24/2 8/21	RS232C(準拠), イーサネット	2,017万円	63年4月	
	AS 1450 HM AS 1260 C/P AS 2180 S	"	"	8 MB~28 MB (60 m) 8 MB~32 MB (120 m)	"	500 MB~ 1120 MB 576 MB	"	高解像度モノクロ19インチ カラー256色19インチ	"	1,347万円 1,398,740万円 1,100万円	63年8月	
東	AS 240 C AS 240 G AS 2160 HM AS 2160 M	"	"	"	"	2,300 MB~ 280 MB~ 1880 MB	"	カラー256色19インチ モノクロ256段階19インチ 高解像度モノクロ19インチ モノクロ19インチ	"	1,016万円 1,502万円 953万円 724万円	63年8月	
	AS 2160 M	68020	68881	4 MB~15 MB	"	141 MB~	"	"	"	"	"	63年8月

海外動行

MEETINGS

4-7 April 1988.

SCRI-Chemistry Workshop Molecular Mechanics and Molecular Dynamics.

Tallahassee, FL., USA.

Contact: DeLos F. DeTar, Department of Chemistry, Florida State University, Tallahassee, FL 32306-3006.

24-29 April 1988.

Computer-Assited Modelling of Receptor-Ligand Inrteractions: Theoretical Aspects and Applications to Drug Design.

Ness-Ziona, ISRAEL.

Contact: Secretariat 1988 Oholo Conference, P. O. Box 19, 70450 Ness-Ziona, ISRAEL. (972-8-481586 or 481494). (FAX: 972-8-475594).

15-20 May 1988.

Third International Conference on Supercomputing and the Second World Supercomputer Exhibition.

Boston, MA.

Contact: Prof. Lana P. Kartashev, or Dr. Steven I. Kartashev, International Supercomputing Institute, Inc., 3000 34th St., South, Suite B-309, St. Petersburg, FL 33711. (813-866-2694).

24-26 May 1988.

First Naples Workshop on Bioactive Peptides: Conformation —Activity in Peptide Relationships and Interaction.

Capri, ITALY.

Contact: Prof. Ettore Benedetti, Dipartimento di Chimica, Via Mezzocannone, 4, 80134 Napoli, Italy.

1-5 June 1988.

International Conference on Computational Physics.

Beijing, CHINA.

Contact: Richard Isaacson, Physics Division, National Science Foundation, 1800 G St., NW, Washington, DC 20550. (202-357-3474).

13-18 June 1988.

Workshop on Quantum Chemistry: Basic Aspects. Actual Trends.

Girona, Spain.

Contact: Ramon Carbo. Col. legi.

Universitari de Girona, Divisio de Quimica, Pl. Hospital 6, 17071-Girona, Spain.

19-26 June 1988.

EUCHEM Conference on Chemometrics in Organic and Bioorganic Chemistry.

Contact: Paola LINDA, EUCHEM, Conference on Chemometrics, c/o Istituto di Chimica Farmaceutica, Universita degli Studi, Pizzale Europa, 1, 34128 Triest, Italy.

20-25 June 1988.

The Third International Course and Conference on the Interface Among Mathematics, Chemistry and Computer Science.

Dubrovnik, YUGOSLAVIA.

Contact: A. Graovac, Math/Chem/Comp 1988, R. Boskovic Institute, YU-41001 Zagreb, POB 1016 YUGOSLAVIA.

4-8 July 1988.

Computational Chemistry Gordon Research Conference.

Plymouth, NH.

Contact: Dr. Donald B. Boyd, Lilly Research Laboratories, Eli Lilly and Company, Indianapolis, IN 46285. (317-276-4232)

10-12 August 1988.

The Seventh Annual Molecular Graphics Society Meetings.

San Francisco, CA.

Contact: Dr. T. Ferring, University of California, San Francisco, San Francisco, CA 94143.

22-26 August 1988.

6th International Congress on Quantum Chemistry.

Jerusalem, ISRAEL.

Contact: Prof. Joshua Jortner, School of Chemistry, Tel Aviv University, 69978 Tel Aviv, ISRAEL.

13-15 September 1988.

International Conference on Computers in Clinical Medicine-Medical Informatics 88. Nottingham, ENGLAND.

Contact: Conference Division, British Medical Informatics Society, 87 Gower St., London, WC1E 6AA, ENGLAND.

26-29 September 1988.

11th International CODATA Conference.

Karlsruhe, Federal REPUBLIC OF GERMANY.

Contact: DECHEMA, Attn. CODATA Conference, P. O. Box 97 01 46, D-6000 Frankfurt/M. 97, FEDERAL REPUBLIC OF GERMANY.

10-14, October 1988

Computational Methods in Chemical Design.

Elmau, Federal REPUBLIC OF GERMANY.

Contact: Prof. Dr. Carl Kruger, Max-Planck-Institute fur Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mulheim a.d. Ruhr, FEDERAL REPUBLIC OF GERMANY.

23-25 January 1989.

Drug Information Association's 5th Biennial Computer-Assisted Chemistry Workshop. San Francisco, CA.

Contact: Drug Information Association, P. O. Box 113, Maple Glen, PA 19002 or Dr. "Babu" Venkataraghavan, (914-735-5000, x 3406)

October, 1989.

9th International Conference on Computers in Chemical Education and Research (ICCCRE).

Contact: Mario Marselli, Computer Chemistry, Area Della Ricerca, 00016, Monterotondo 5, I-1000 Rome, ITALY.

文献紹介

本号迄の紹介文献一覧

CICSJ Bulletin

紹介文献

Vol.5, No.2

Journal of Molecular Graphics

1986 Vol.4, No.2~No.4

Journal of Computational Chemistry

1985 Vol. 6, No.1 ~ 1986 Vol.7, No.6

Computers & Chemistry

1986 Vol.10, No.4 ~ 1987 Vol.11, No.1

Quantitative Structure-Activity Relationships

1986 Vol.5, No.3

Vol.5, No.3

Journal of Computational Chemistry

1987 Vol. 8, No.1 ~ No.3

Journal of Chemical Education

1986 Vol. 63, No.1~No.12

Journal of Molecular Graphics

1987 Vol.5, No.1

Journal of Chemical Information and Computer Sciences

1987 Vol.27, No.1

Computers & Chemistry

1987 Vol.11, No.2

Vol.5, No.4

Journal of Mathematical Chemistry

1987 Vol.1, No.1

Vol.5, No.5

Journal of Chemical Education

1987 Vol. 64, No.1~No.6

Journal of Chemical Information and Computer Sciences

1987 Vol.27, No.2

Journal of Computational Chemistry

1987 Vol. 8, No.4 ~ No.6

Journal of Molecular Graphics

1987 Vol.5, No.2

Computers & Chemistry

1987 Vol.11, No.3

Quantitative Structure-Activity Relationships

1986 Vol.5, No.4~ 1987 Vol.6, No.1

Vol.5, No.6

Computers & Chemistry

1987 Vol.11, No.4

Quantitative Structure-Activity Relationships

1987 Vol.6, No.2

Journal of Computational Chemistry

1987 Vol. 8, No.7

Journal of Mathematical Chemistry

1987 Vol.1, No.2~No.3

Journal of Chemical Information and Computer Sciences

1987 Vol.27, No.3

Journal of Molecular Graphics

1987 Vol.5, No.3

Vol.6, No.1

文献紹介なし

本 号

Journal of Computational Chemistry

1987 Vol. 8, No.8 ~ 1988 Vol.9, No.1

Journal of Chemical Education

1987 Vol. 64, No.7~No.12

Journal of Computer-Aided Molecular Design

1987 Vol.1, No.1~No.2

Journal of Chemical Information and Computer Sciences

1987 Vol.27, No.4 ~ 1988 Vol.28, No.1

Journal of Molecular Graphics

1987 Vol.5, No.4

Computers & Chemistry

1987 Vol.12, No.1

Journal of Mathematical Chemistry

1987 Vol.1, No.4

- Systematic Drug Receptor Mapping: A New Approach to the Analysis of Conformational Energy Calculations of Flexible Molecules with Application to Dopaminergic and Adrenergic Agonists
L. Sanathanan, E. Danaher, K.-H. Kim, and Y. Martin , p.1075
- Molecular Orbital Calculations on Solvents and Other Small Molecules: Correlation between Electronic and Molecular Properties μ , α_{MCL} , π^* and β
D. F. V. Lewis , p.1084
- Cooperative Effects in Extended Hydrogen Bonded Systems Involving O—H Groups. *Ab Initio* Studies of the Cyclic S₄ Water Tetramer
J. E. H. Koehler, W. Saenger, and B. Lesyng , p.1090
- On the Use of Constraints in Molecular Mechanics. II. The Lagrange Multiplier Method and Non-Full-Matrix Newton-Raphson Minimization.
J. L. M. Dillen , p.1099
- Molecular Mechanics Study of Myelin Basic Protein
R. D. Gilliom and G. L. Stoner , P.1104
- An Evaluation of the Performance of Diffuse Function-Augmented Basis Sets for Second Row Elements, Na-Cl
G. W. Spitznagel, T. Clark, P.v.R. Schleyer, and W. J. Hehre , p.1109
- Semi-Empirical Calculations of Molecular Trajectories: Method and Applications to Some Simple Molecular Systems
J. J. P. Stewart, L. P. Davis, and L. W. Burggraf , p.1117
- Nonbonded Interactions. 1. Anisotropic Hydrogen-Hydrogen Interactions
K. B. Wiberg and M. A. Murcko , p.1124
- Calculation of Enthalpies of Hydrogenation of Hydrocarbons
M. R. Ibrahim, Z. A. Fataftah, P.v.R. Schleyer, and P. D. Stout , p.1131
- Benzene-Benzene (Phenyl-Phenyl) Interactions in MM2/MMP2 Molecular Mechanics Calculations
I. Pettersson and T. Liljefors , p.1139
- Benzene, Aromatic Rings, Van der Waals Molecules, and Crystals of Aromatic Molecules in Molecular Mechanics (MM3)
N. L. Allinger and J.-H. Liu , p.1146
- MNDO Calculations on [n] Metacyclophanes
L. W. Jenneskens, F. J. J. de Kanter, W. H. de Wolf, and F. Bickelhaupt , p.1154
- An Investigation of the Relative Stabilities of the Isomers of CF₂N₂: Comparison of *ab initio* and MNDO Calculations
C. Glidewell, D. Higgins, and C. Thomson , p.1170
- Ab Initio* Program for Treatment of Related Molecules II. Integral Transformation in Extended Systems
C. Kozmutza , p.1179
- The Hylleraas-CI Method in Molecular Calculations: Two-Electron Integrals
A. Largo-Cabrerizo and E. Clementi , p.1191

An Analysis of the Structural and Energetic Properties of Deoxyribose by
Potential Energy Methods

T. Schlick, C. Peskin, S. Broyde, and M. Overton, 1199

A Force Field for Allenes and for Nonlinear Acetylenes within the MM2
Approximation

N. L. Allinger and A. Pathiaseril, p. 1225

Journal of Computational Chemistry

Volume 9 Number 1 January/February 1988

Acetylcholine in Water: *Ab-Initio* Potential and Monte Carlo Simulation

C. Margheritis and G. Corongiu, p. 1

Determination of the Water Geometry in Violuric Acid Monohydrate with a
Monte Carlo Simulation

J. N. Onuchic and G. Corongiu, p. 11

Molecular Mechanics and Molecular Shape. V. On the Computation of the
Bare Surface Area of Molecules

A. Y. Meyer, p. 18

Molecular Mechanics Parameters for Organosilicon Compounds Calculated
from *Ab Initio* Computations

S. Grigoras and T. H. Lane, p. 25

Application of SINDO1 to Phosphorus Compounds

K. Jug and H. Schulz, p. 40

Application of SINDO1 to Silicon, Aluminum, and Magnesium Compounds

K. Jug and R. Iffert, p. 51

Explorations on the Multidimensional Potential Energy Surface of a Chiral
Stationary Phase

K. B. Lipkowitz, D. A. Demeter, J. M. Landwer, C. A. Parish, and T. Darden, p. 63

A Conformational Study of a Biologically Active Conjugated *Syn*-Oxime

T. J. Venanzi and C. A. Venanzi, p. 67

The Computation of Floating Functions and their Use in Force Constant
Calculations

A. C. Hurley, p. 75

Atomic Physicochemical Parameters for Three Dimensional Structure
Directed Quantitative Structure-Activity Relationships III. Modeling
Hydrophobic Interactions

A. K. Ghose, A. Pritchett, and G. M. Crippen, p. 80

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

JULY 1987 Vol.64, No.7

Computer Series, 84

Protein Structure Prediction in Color, *Lawrence C. Davis and Gary A. Radke*, p.582

edited by John W. Moore

Computer Programming in General Chemistry, *G. L. Breneman and O. J. Parker*, p.584

AUGUST 1987 Vol.64, No.8

Computer Series, 85:

Werner and Jørgensen: Presenting History with a Computer, *David M. Whisnant*, p.688

edited by John W. Moore

SEPTEMBER 1987 Vol.64, No.9

Computer Series, 86: Bits and Pieces, 35

Audio Frequency Measurements for Heat Capacity Ratios Using Apple II, *Robert V. St. Louis*, p.788

edited by John W. Moore

Ab Initio Calculations on a Microcomputer, *Lynne H. Reed, Arthur R. Murphy*, p.789

X-Ray Structure Refinement and Electron Density Map: A Computer Programming Experiment, *G. L. Breneman*, p.790

Simplex Optimization: A Computer Program for Instrumental Analysis, *James P. Deavor*, p.792

Faradaic Impedance Diagrams: A Computer Electrochemical Experiment, *F. Arnaiz, P. LI. Cabot, M. Cortes, and J. M. Costa*, p.792

OCTOBER 1987 Vol.64, No. 10

Computer Series, 87:

A Computer Exercise in Chemical Reaction Engineering and Applied Kinetics, *Tapio Salmi*, p.876

edited by John W. Moore

Computer-Assisted Analysis of Reaction Rate Data, *W. David Chandler, Eric J. Lee, and Donald G. Lee*, p.878

December 1987 Vol.64, No. 12

Computer Series, 88:

Chemical Oscillations: A Microcomputer-Controlled Experiment, *Patricia Aroca, Jr. and Ricardo Aroca*, p.1017

edited by John W. Moore

A Colorimetric Titration Experiment with Laser Excitation and Computer-Interfaced Endpoint Detection, *Manish A. Mehta and Richard F. Dallinger*, p.1019

JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN

※ CICSJ Bulletin Vol.5, No.1で発刊についてお知らせしましたが、本号より文献紹介欄に掲載します。

1987年第1巻第1号(4月) 論文題目、著者、頁

A unique geometry of the active site of angiotensin-converting enzyme consistent with structure-activity studies, *Dorica Mayer, Christopher B. Naylor, Ioan Motoc, and Garland R. Marshall*, p.3

Modelling of α -lactalbumin from the known structure of hen egg white lysozyme using molecular dynamics, *Barry Robson and Eric Platt*, p.17

A molecular graphics study on structure-action relationships of calcium-antagonistic and agonistic 1,4-dihydropyridines, *H. -D. Holtje and S. Marrer*, p.23

Strategic approaches to drug design. I. An integrated software framework for molecular modelling, *J. G. Vinter, A. Davis, and M. R. Saunders*, p.31

Conformation-activity relationships of opiate analgesics, *Jennifer Martin and Peter Andrews*, p.53

WIZARD: AI in conformational analysis, *Daniel P. Dolata, Andrew R. Leach and Keith Prout*, p.73

Computer graphic study on models of the molybdenum cofactor of xanthine oxidase, *Gerd Folkers, Michael Krug and Susanne Trumpp*, p.87

1987年第1巻第2号(7月) 論文題目、著者、頁

Strategic approaches to drug design. II, Modelling studies on phosphodiesterase substrates and inhibitors, *A. Davis, B. H. Warrington and J. G. Vinter*, p.97

Computer-aided molecular modeling of a D_2 -agonist dopamine pharmacophore, *Roberto Tonani, James Dunbar, Jr., Brian Edmonston and Garland R. Marshall*, p.121

A theoretical study of angiotensin-converting enzyme inhibitors, *M. R. Saunders, M. S. Tute and G. A. Webb*, p.133

Structure-activity relationships for apomorphine congeners. Conformational energies vs. biological activities, *Ingrid Petterson and Tommy Liljefors*, p.143

The active analog approach applied to the pharmacophore identification of benzodiazepine receptor ligands, *Souhail Tebib, Jean-Jacques Bourguignon and Camille -Georges Wermuth*, p.153

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1987年(11月)第27巻4号 発表題目、著者、頁

Effect of New Technology on Information Transfer in the 1990s, *Carlos M. Bowman, John A. Nosal, and Anne E. Rogers*, p.147

Algorithms for the Identification of Three-Dimensional Maximal Common Substructures, *Andrew T. Brint and Peter Willett*, p.152

An Expert System for Machine-Aided Indexing, *Clara Martinez, John Lucey, and Elliot Linder*, p.158

Personal Microcomputer Based System of Chemical Information with Topological Structure Data Elaboration, *M. L. Contreas, M. Deliz, and R. Rozas*, p.163

Computer Simulation of Deutrium NMR Line Shape, *Salem Jagannathan, Frank D. Blum, and Carl F. Polnaszek*, p.167

Enumeration and Classification of Benzenoid Hydrocarbons. 2. Symmetry and Regular Hexagonal Benzenoids, *J. Brunvoll, B. N. Cyvin, and S. J. Cyvin*, p.171

Computer Storage and Retrieval of Generic Chemical Structures Using Structure Attributes, *Soichi Tokizane, Tsukasa Monjoh, and Hideaki Chihara*, p.177

1988年(2月)第28卷1号 发表题目、著者、頁

Logical Perception of Ring-Opening, Ring Closure, and Rearrangement Reactions Based on Imaginary Transition Structures. Selection of the Essential Set of Essential Rings (ESER), *Shinsaku Fujita*, p.1

Automated Classification of Candidate Structures for Computer-Assisted Structure Elucidation, *Alan H. Lipkus and Morton E. Munk*, p.9

Further Development of Structure Generation in the Automated Structure Elucidation System CHEMICS, *Kimito Funatsu, Nobuyoshi Miyabayashi, and Shin-ich Sasaki*, p.18

Generating and Counting Unbranched Catacondensed Benzenoids, *Ratko Tosic and Milovan Kovacevic*, p.29

SMILES, a Chemical Language and Information System. 1. Introduction to Methodology and Encoding Rules, *David Weininger*, p.31

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1987年第5卷第4号(12月) 論文題目、著者、頁

TOM: a FRODO subpackage for protein-ligand fitting with interactive energy minimization, *C. Cambillau and E. Horjales*, p.174

An interactive modeling program for DNA, *M. Treger and E. Westhof*, p.178

PUCK: a real-time modification of sugar pucker on a PS300, *B. Amerein, R. Ripp and P. Dumas*, p.184

An interactive biomolecule graphics system, *J. Wu, Y. Guan and Q. Zheng*, p.190

A Simple method to display molecular orbitals with computer graphics, *Y. Kurita and C. Takayama*, p.197

Identifying 3D maximal common substructures using Trasputer networks, *A. T. Brint and P. Willett*, p.200

Stereo viewing on the Evans and Sutherland PS350/PS330, *H. E. Bosshard and J. P. M. Postma*, p.208

Bibliography of theoretical calculations in molecular pharmacology, *N. J. Stedman, G. M. Morris, and P. J. Atkinson*, p.211

COMPUTERS & CHEMISTRY

1988年 第12卷第1号 論文題目、著者、頁

Procedures for defining FSE standards, *Delos F. DeTar*, p.1

Molecular dynamics of a model polymer on a Hypercube parallel computer, *J. B. Drake, A. K. Hudson, E. Johnson, D. W. Noid, G. A. Pfeffer and S. Thompson*, p.15

An efficient algorithm for comparing two protein sequences: implementation for microcomputers, *Mitsuo Murata*, p.21

Analyzing the oxidation of graphite using a microcomputer, *Eric F. Brown*, p.27

Computerized tritium measurements with a liquid scintillation counter, *Marijan Mil etic, Ivan Kobal and Teodor Mohar*, p.39

A Program system for spectroelectrochemical measurements, *Kurt Kalcher, Herbert Greschoning, Christian Jorde and Alfred Leitner*, p.43

A molecular graphics suite of programs for micro-computer to display molecules from Cambridge Crystallographic Data Files and the alpha-carbon backbone of proteins from Protein Data Bank crystal files, *Brian Clarke*, p.65

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1987年 第1卷第4号 (11月) 发表題目、著者、頁

Walsh diagrams and the Hellmann--Feynman theorem: A tribute to the late Professor Charles A. Coulson, F. R. S. (1910-1974), *Brian O'Leary and R. B. Mallion*, p.335

Complexity index for the linear mechanisms of chemical reactions, *D. Bonchev, D. Kamenski and O. N. Temkin*, p.345

An examination of the basic postulates of surface chemistry: A variational calculus analysis of the classic rotating drop experiment, *Harold M. Scholberg*, p.389

Homomorphism polynomials of chemical graphs, *D. M. Berman and K. W. Holladay*(Note), p.405

Chemical applications of topology and group theory. XXIV: Chiralization of Chemically significant polyhedra [1] (Note), *Bruce King*, p.415

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
Chemical Information and Computer Sciences
The Chemical Society of Japan

日本化学会
情報化学部会

Volume 6, Number 3
May 1988

目 次

部 会 行 事	
第1回情報化学夏期セミナー.....	1
ワークショップ「分子と反応の表現」報告.....米田幸夫	2
化学者のためのパソコン講習会.....	6
計算化学ワークショップ「機能物質・材料の設計のための計算化学手法」.....	7
年 会 報 告	8
関 連 行 事	
第3回化学PCソフトウェア研究討論会.....	13
部 会 記 事	14
研 究 会 案 内	16
学 会 報 告	
分子力学と分子動力学に関するワークショップ出席報告.....大沢映二	23
中馬 寛	26
海 外 動 向	
Meetings.....	27
Third Chemical Congress of North America.....	30
国 際 会 議	
Gordon Research Conference on Computational Chemistry.....	33
図 書 紹 介	
計算化学ガイドブックー3大計算プログラムの解説ー.....平野恒夫	34
吉田元二	
文 献 紹 介	
“Tetrahedron Computer Methodology” 発刊のお知らせ.....	36
Quantitative Structure-Activity Relationships (Vol.6, No.3~Vol.7, No.1).....	37
Journal of Mathematical Chemistry (Vol.2, No.1).....	38
Computers & Chemistry (Vol.12, No.2).....	38

第 1 回情報化学夏期セミナー
—情報化学入門—

主催 日本化学会情報化学部会

日時 7月27日(水)13時～7月28日(木)11時(1泊2日)

会場 蒲郡荘(愛知県蒲郡市港町21-4)

参加申込締切 6月30日(木)、定員(40名)になり次第。

話題提供

第1日(7月27日)

A. 化学データベース入門

- 1) 化学構造式の計算機表現とその処理(富士写真フィルム)花井荘輔
- 2) スペクトルデータの計算機表現とその処理(豊橋技科大)阿部英次

B. 分子設計・合成設計入門

- 1) 新薬設計に計算機はどう使えるか?(住友化学)高山千代蔵
- 2) 有機合成経路を計算機に考えさせるとは?(山形大工)工藤喜弘

*) 夜の部

—情報化学のここが聞きたい(フリートーク)—

第2日(7月28日)

C. 分子計算入門

- 1) 分子力場計算による分子設計・反応設計と分子力場パラメータの最適化(化技研)田辺和俊
- 2) QCPEプログラムの利用に際して(呉羽化学)中馬 寛

参加費(資料代および27日夕食から宿泊、28日朝食までを含む)

部会員(法人会員の場合2名までを部会員扱いとする)18,000円、一般25,000円、学生10,000円。

参加申込方法 葉書等に「第1回情報化学夏期セミナー申込」と題記し、①氏名・年齢、②勤務先・職名、③会員資格、④連絡先、電話番号を明記のうえ、下記あてお申し込み下さい。

なお、会場に関する詳細な案内ならびに参加費支払方法については申込締切後お知らせ致します。

申込先 440 豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1 豊橋技術科学大学 高橋由雅・船津公人
電話 (0532)47-0111 内線 774、454

ワークショップ 「分子と反応の表現」 報告

米田 幸夫 (東海大)

情報化学部会の行事として、昭和63年3月23日に上記のワークショップを開催したので、その状況を報告する。

このワークショップの趣旨は次の通りであった。すなわち、分子設計・反応設計にあたって、分子の入出力は図形入出力が主流となってきた。反応の表現も多様化している（ただし、今回は反応経路の表現は除外）。また、これらに共通して、立体化学の正確な表現、特に絶対配置・配座の表現が不可欠といえよう。このような時点で、分子と反応の、二次元図形表示、結合（関係）表、分子・反応の線形表示、反応の内部および外部表現、反応条件の記述などを話題としたものである。

話題提供者として以下の8人の方々をお願いし、計約25名の会合を予定して、この話題に関心をお持ちの部会員の方々、特にソフトのメーカーの方々への参加も呼びかけたところ、予想以上の希望があり、数名の方はお断りし、合計30名で開催した。

当日は、午前10時30分～午後5時まで、東海大学開発技術研究所（東京都渋谷区代々木）の会議室で話題提供の講演と討論を行い、終了後ささやかな懇親会を行った。

なお、参加資格は情報化学部会の正部会員、準部会員、または法人部会員の関係者に限り、参加費は無料、懇親会費は実費3,000円であった。

話題提供者のご協力を得て、ワークショップを持って、それぞれの流儀で活発に研究をおこなっている人々が一同に会して、共通の話題を議論したことは大きな意義があった。しかし、8人の話題提供者がそれぞれ30分の持ち時間で、講演と討論を行ったので、時間切れで、十分な、また深まりのある討論ができなかったのは、残念であった。話題を適切に絞って総括的な討論を深める機会が望まれる。今回は参加費無料で、また情報化学部会からの補助金も用意しなかったため、遠方の話題提供者はすべて自費で来て頂いた。今後はなんらかの方法を講じるべきであろう。

話題提供者の講演要旨は次の通りである。

(1) 分子の立体化学と官能基・基礎団（母核）の表現方法 米田 幸夫 (東海大)

1. 分子の表現は以下の3要素で表現する。(iii)修飾表の一部または全部を(i)、(ii)と統合してもよい。

(1) 結合関係表(connectivity table)

(i) 原子表(atom table) 化学種と原子序数。同位体、イオン、ラジカル。

(ii) 結合表(bond table) 原子序数と結合の多重度。

(iii) 修飾表(modifier table) 立体化学。

2. 立体化学の表現。図形入出力、特に出力に当たっては、(真の)絶対表現か、仮の絶対表現で表示することが必要。cis/trans, α/β は構造式の裏表で変化する。

(i) (真の)絶対表現：順序規則と(R/S), (Z/E)。

(1) 仮の絶対表現： 原子序数を仮に順序規則による優先順位として、仮の (R/S), (Z/E) を与える。これは図形の裏表で変化することはない。

3. 官能基の表現。基礎団と共に、知識ベース・システムなどで記号処理のために、ある程度、統一する必要がある。

a. 表現 (i) 名前(IUPAC組織名) (ii) 記号(示性式) (iii) 正準化記号(WLN)

b. 階層的定義 $-NH$ $-NH-NH$ $=NH-NH$

4. 基礎団(母核)。CASには、骨格が約3万。

a. 表現 (i) 名前(長がすぎる) (ii) 記号・略号(何個作るか) (iii) 正準化記号(WLN, Morgan付番) (iv) 結合関係表

(2) 荒木啓介(JICST) JICST化合物辞書のシステムのがいよう——特に分子の原子結合表表現について

(3) 計算機による構造認識いろいろ 高橋由雅 (豊橋技科大)

化学構造式の計算機表現と並んで、これらの表現を基に、化学構造としての種々の特徴をどの様に認識するかと言った構造認識の問題は、化学研究への計算機の有効利用を図る上で極めて重要な問題の一つと言える。これら二つの問題は相互に密接な関連を持つと同時に、目的に応じた表現或は機能が要求される。

分子の構造表現レベルとしては典型的には次の三つのレベルをあげることができる。1) トポロジカルな構造表現、2) 1) + 立体化学、3) 三次元構造。一方、構造認識について言うならば、官能基認識、環認識、任意の部分構造認識、官能基対等その他の特徴認識、さらには異なる複数の分子を対象にした場合の共通部分構造(或は共通構造特徴)の認識と言った様々な問題をあげることができる。そして、これらについても各々上記の構造表現レベルに対応した問題設定が必要となる。ここでは、各レベルでの計算機表現にも触れながら、筆者らの経験を中心に構造認識に関する二、三の話題を提供し、分子設計あるいは反応設計に必要な構造認識とは、...と言った問題に対する議論の素としたい。

(4) 反応DB/KBに於ける総称表現 藤原 譲 (筑波大)

有機合成反応のデータベースや知識ベースに於いては、総称的表現が使われることが多い。従って、DBやKBの設計の為にもデータ入力の為にも、総称的表現の取扱いを決めて置かなければならない。例えば、ハロゲンの各元素を個別に書く代りにXの記号で代表するような場合には、個別の表現に展開することは容易であり、多少入力の手数が増加するだけのことである。これが"アルキルR"とだけあって特別な制約が課されていないときには、展開の方法では無限個を対象とするので不可能である。勿論適当な範囲に限定することは次善の策として考えられるが、この場合メモリー効率と実用性のtrade-offとなる上に、やはり極端な場合に対処できないことになる。

このように総称表現は人間には便利であるが、外延(extension)をデータの基本的形式としている現在の計算機システムで、データの記述、表現、管理、処理のあらゆる面で不都合を生ずる。特に、この問題を避ける為に総称表現のデータを収録対象から外すことにならないような方策を述べることにする。

化学構造の構成単位が原子であることは目的によっては必ずしも適切ではなく、結合表の構成要素を通常の原子より詳細なレベル、すなわち結合状態や同位体までを考慮する場合もあれば、原子団、環構造などを一括して扱う場合もあるような柔軟な表現方法を採用することによって、総称的構造の表現が可能となる。

管理、処理はブロッカー切断点-木 (BCT) を拡張した EBC T の方式で解決できることを、Markush 表現を例として説明する。

反応パターンが合成知識の中心であるが、この方式によって原データが総称表現を含むときも対処できることが示される。

(5) コンピュータによる反応データの図形表示と反応内容の認識法 松浦育敏 (中外製薬)

反応は、通常、反応式と実験の文章で記述される。反応式は、紙の上に二次元の図形で表示し、三次元の情報は疑似的に表現される。

コンピュータでの反応式の記述も、二次元図形の形式で入力表示されるのが最も分かりやすい。しかし反応のデータ表現においては、その内容の本質を正しく記述することが必要である。そのために用いられるのが、①反応の結合表 (分子内の原子の結合関係を表す。三次元情報もドットやくさび型の結合等で疑似的に表す。出発物と生成物間の原子の対応も記述する)、②各原子の二次元座標、③反応条件の文字による記述、のセットである。

PC-SYNTREX で用いている表現例を資料 (1) で示す。反応の結合表は、反応の前後で未変化の部分を通部分としてまとめて記述することで、原子の対応を表すと共にメモリーの節約をはかる。

反応の内容は、この結合表から抽出される。抽出された内容を表す記述子としては、目下のところ環、官能基、反応部位の変化の 3 種類を用いている。さらに環、官能基は反応への関与に応じた 8 種の範疇のいずれかに分類される。反応の設計もしくは検索のためにどの様な記述子を発生させるかで、それぞれのシステムの機能が特徴づけられる。

反応条件の文章による記述には、簡潔でありかつ検索の切り出しができるように、次のような形式を採用した。

FROM starting compound WITH reagent IN solvent AT temperature . Y=%

必要なら、THEN (多段階操作)、FOR (時間)、UNDER (圧力)、COM: (コメント) も用いる。この記述法から出発物、試薬、溶媒、温度、収率を区別する。

(6) 虚遷移構造による有機反応の記述 (富士写真フィルム足柄研究所) 藤田真作

筆者は、有機反応の新しい表現方法として虚遷移構造 (imaginary transition structures: 略称 ITS) を提案した。ITS は、出発系の分子と生成系の分子を重ね合わせた構造式であり、出発系にのみ存在する結合を out-bond (—H— で表記。カラーグラフィックスでは赤色の結合で表示する)、生成系にのみ存在する結合を in-bond (—O— または緑色の結合)、および両系に存在する結合を par-bond (— または白抜の結合) として区別したものである。

この構造式に現われる結合 (虚結合 imaginary bonds) は、上記三種の結合の組合せで

表示される。これらの虚結合は、複素結合数 (complex bond numbers) と対応づけることができる。この複素結合数を用いると、ITSは結合表の形でコンピュータに格納される。

第1報¹は、ITSに関わる基本的概念を説明した。第2報²は偶数員環の反応グラフの数え上げと分類、第3報³は奇数員環の反応グラフの数え上げと分類、第4報⁴は三節および四節部分グラフ、第5報⁵は反応ルートの記述、第6報⁶および第7報⁷は二本結反応の数え上げと分類、第8報⁸は電荷空間と合成空間および立体化学の記述、第9報⁹は転位反応の記述について述べている。まとめとして第10報¹⁰で「構造-反応型式パラダイム」について述べた。第11報¹¹では、部分グラフによる分類法、第12報¹²では、ESER (essential set of essential rings) について報告した。

(文献)

- (1) S. Fujita, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 1986, **26**, 205. (2) 1986, **26**, 212.
- (3) 1986, **26**, 224. (4) 1986, **26**, 231. (5) 1986, **26**, 238. (6) 1987, **27**, 99.
- (7) 1987, **27**, 104. (8) 1987, **27**, 111. (9) 1987, **27**, 115. (10) 1987, **27**, 120.
- (11) S. Fujita, *J. Chem. Soc., Perkin II*, 印刷中. (12) S. Fujita, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 印刷中. (13) 藤田眞作 有機合成化学協会誌 1986, **44**, 354.
- (14) *Chem. Eng. News* (Sept. 29, 1986) 75~76.

(7) 有機反応を念頭においた構造特徴抽出 船津公人 (豊橋技科大)

有機構造の特徴抽出には、その目的に応じた手法とその表現があってよい。例えばNMRスペクトル解析を例にとればNMR情報と部分構造との対応が基本となっている事は言うまでもない。一般にその対応関係を示すには具体的な部分構造表現を伴う必要がある。この場合、一対一の関係を比較的示し易く、またその数もあらかじめ設定できる。一方、有機反応を念頭において反応性に関与すると思われる諸因子に応じた構造情報を含んだ上で構造と反応との関係を示す場合、複雑な因子のからみから必ずしも具体的な部分構造をもってそれらの関係を全て設定・提示することはスペクトル解析の場合ほどには容易ではない。従って、一たん極めて基本的な構造特徴のみを獲得し、入力された要求反応情報に対応する部分構造あるいはpKa値などの反応性指標の提示へとその基本特徴を integrate してゆくことがこの場合合理的と考えられる。本発表ではこの事に対応できるよう有機反応を念頭においた構造特徴の抽出とその integration法およびそれらの情報の記述法について述べる。

(8) コンピュータによる分子の部分の間の立体的関係の認識 内丸忠文 (化技研)

立体化学的な観点から、分子内の原子、および面の等価性を正確に認識することが光学活性化合物の合成戦略の立案の際に必要なとされる。すなわち、平面構造の上では等価と考えられるホモトピック、エナンチオトピック、ジアステレオトピックの3つの関係がそれぞれ区別されなければならない。このような立体化学的観点に立った分子の各部分の関係は分子内の対称要素を用いて認識することができる。分子の対称要素には回転軸、対称心、対称面、回映軸の4つがあるが、このうち対称心と対称面は回映軸の特殊な場合と考えられるから、回転軸と回映軸のみを考えれば充分である。すなわち、回転操作によって重ね合わせることができる分子の各部分は互いにホモトピックであり、回映操作によってのみ重なる部分は互いにエナンチオトピックな関係にある。いずれの操作によっても重ね合わせることができないものはジアステレオトピックな関係にあると言える。

今回は時間の都合上分子内の回転軸を捜し出すためのプログラムの流れについてお話する。その基本的な考え方は以下の通りである。すなわち、1) 平面構造式の上で等価と判断される原子と結合の組を作る。2) 回転軸上にくる可能性のある原子と結合の候補を捜し出す。3) もしC_n軸が存在すれば1) で作った組から軸上の原子と結合を除外したした場合に各組の要素数はnの倍数になる。回転軸についてもほぼ同様の手順で認識することができる。

以上のような考え方がどのように合成設計に利用できるかについても簡単に解説したい。

化学者のためのパソコン講習会

主催 日本化学会情報化学部会

協力 神戸学院女子短期大学、日本電気株式会社

日時 昭和63年9月2日(金)、3日(土) 10時~17時 (1日コース)

会場 2日: 神戸学院女子短期大学第一学舎パソコン教室(神戸市長田区林山町27-1)

[交通] 山陽、阪急、阪神各電車高速長田駅より市バス5分下車徒歩10分

3日: 新大ビル9階939号室日本電気パソコン教室(大阪市北区堂島浜1-2-6)

[交通] JR東海道線、環状線大阪駅下車徒歩15分または

地下鉄御堂筋線、京阪電車淀屋橋駅下車徒歩10分

趣旨 化学の研究室でもパソコンが見られることが普通になってきました。しかし、まだ十分に活用されていない場合も多いと思われます。パソコンをもっと化学の研究に役立てたいと思われる方を対象とし、実習を中心に開催します。奮ってご参加下さい。

参加申込締切 8月13日(土) (各日とも定員20名、申込順)

1. 化学領域におけるパソコンの各種活用法(三重大農) 田口寛
2. パソコンによる分子力学計算入門(広大理) 深沢義正
3. パソコンによる分子構造表示(姫工大工) 中野英彦

実習機材 日本電気PC-9801シリーズ機 (1名1台使用)

参加費 5,000円。但し、2名で1台を使用される場合は2名で8,000円(連名でお申し込みください)。

参加申込方法 葉書に「化学者のためのパソコン講習会参加申込書」と標記し、氏名(フリガナ)、所属、連絡先(所在地・電話番号)、参加希望日を明記のうえ、下記あてお申し込みください。

申込先 671-22姫路市書写2167 姫路工業大学応用化学教室 中野英彦
(電話(0792)66-1661、内線325)

計算化学ワークショップ 「機能物質・材料の設計のための 計算化学手法」

世話人 大沢 映二（北大理）
田辺 和俊（化技研）

1. 趣旨

MO, MM, MDなど計算化学プログラムは多数開発されているが、依然として分子レベルの計算にとどまっており、企業などで要求される機能物質・材料の設計のための道具としてはまだまだ距離がある。

しかし、欧米は勿論、わが国でもこのような分子集合体計算の試みが企業研究者を中心に最近行われるようになり、新素材メーカーの関心を引きつつある。

このワークショップでは、表記のテーマに関連して最近研究を行っている企業研究者に話題を提供してもらい、機能物質・材料設計のための計算化学手法の現状と問題点を探る。

2. 話題提供者

有機非線形光学材料やフォトクロミズム材料関係等の化合物についてMO法等の計算を行った研究発表を日本化学会年会等で行っている企業の研究者10人程度。

3. 日時：7月13日（水） 10:00-17:00

4. 場所：日本化学会4階講堂

5. 申し込み方法：参加費無料。ただし資料準備の都合上、参加希望者は官製葉書に、①氏名、②所属、③懇親会（17時から、2000円）出欠、を明記の上、下記あてお申し込み下さい。

6. 申し込み及び問い合わせ先

〒305 つくば市東1-1 化学技術研究所 田辺和俊（Tel 0298-54-4522）

年 会 報 告

第一のセッションは、NMRのデータベースとその処理に関する3件の報告があった。

最初の報告は、「有機化合物の自動構造推定システムCHEMICSに於ける2次元NMRスペクトル情報の活用(1)~2D-INADEQUATE情報の解析処理について~」で、豊橋技科大の須々田寛、船津公人、佐々木慎一による研究であった。従来のデータベースが標準チャートを対象としているのに対し、ここはC-Cの2次元NMRを対象としている。そのためCHEMICSの適用範囲を拡張するため630個に部分構造を拡充し、候補構造を出力するまでについて実例を中心に報告された。

次は、「マイクロコンピュータによるNMR測定支援用データベースシステムの開発」で、同じ豊橋技科大の高橋佐江、山浦一友、奥山徹、阿部英次、佐々木慎一による研究であった。H-NMRスペクトルデータベースを測定機から直接収録するため、測定機とのインターフェース、帰属、コード化、データベース化までを支援するシステムの開発を、PC9801VX2と40MBのハードディスク上で行った結果が述べられた。物質の同定、データ管理、チャート、構造式処理等を、dBASEと新たに開発した付加機能で実現している。小型ではあるが、システムとしての完成度が高いものである。

三番目は、「H-NMRスペクトルデータベースによる定性分析の試み、その2~検索同定に於けるノイズの検討~」で、日立計測、日立那珂の田中保子、橋本正雄、服部忠による発表であった。著者らは既にH-NMRスペクトルを近接ピーク数のパターンで表現して、効率の良い検索システムを報告しているが、今回はピークの高さ、巾についてもパラメータに還元して検索精度の向上を目標としたものであった。約400種の芳香族ケトンのデータについての実際の検索テストの結果と、その解析が説明された。

筑波大学 藤原 謙

3XIF11 化学におけるエキスパートシステムとファジィ理論

(旭硝子研究開発部) 石田嘉明

演者は赤外線吸収スペクトルの化学構造への帰属問題等で今日のようにとやかく言われ始める以前から、ファジィ問題に取り組んできた人である。ファジィ集合に関わる概念の分かりやすいグラフによる説明やファジィ制御の工業的応用の紹介、およびファジィ推論がルール型エキスパートシステムと異なる点の指摘があった。従来種々の制約から、曖昧さが捨て去られて構築されたシステムが、ファジィ理論の実用化により、幅広い適応性と柔軟性のある解析が可能となると、理論では保守的なケミストが関心を持ち始めるチャンスになったことと思う。

3XIF15 ワークステーションで何ができるか？—化学研究を支援するために—

(富士ゼロックスAI事業部) 神保 旭、尾山伸一

横着をきめこんだケミストのテーブルワークを期待して臨んだ向きには、ワークステーションの現状紹介に少々落胆したかもしれない。しかし、その昔化学構造図のトレーシングの費用の高騰に音を上げたCASがコンピュータグラフィックスを実用化し、更にファインアート級のレベルにまで進化させたことを想起してみよう。すれば、米国のバテル研究所で開発されつつあるCOREXという腐食欠陥分析エキスパートシステムのWS上での実行の紹介は、WSが着々と進化し、強力なツールになりつつあることを期待しても損ではなさそうである。

(群馬大学教育学部 飯塚 健)

3XIF25 複数の包括表現による新しい観点からの有機合成設計

(山形大・I) 工藤喜弘・鈴木孝弘

合成経路探索に於ける組合せ数の増大を抑制する為に、包括表現を利用する方法について検討された。包括表現形として4種の包括レベルを用意し、各レベル毎に合成目標の構造を解釈し、変換規則によって4種の合成木を発生させるようにしている。経路選定に当っては、4種の合成木から利用者が対話形式で適当な合成木を指示することによって、反応規則の適用が開始される。反応規則自体はSpecificに記述されており、包括表現は規則適用の前後で利用者に各種の観点を提供する目的で使用されている。

化学構造の一律な包括表現で反応規則を記述しようとしても、現実の反応性の差に十分追従することができない(例えばハロゲン元素といっても、フッ素とヨウ素では相当に異なる反応性となってしまう)。従って、反応規則の適用はSpecificに行なっているということであるが、組合せ数の爆発抑制の定量的評価または具体的事例があれば更に分かり易かったように思う。

3XIF26 有機合成設計システムCASINOの開発(5)立体化学の取扱いについて

(化技研) ○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・林 輝幸

(富士通) 湯田浩太郎・永井利枝子・樋高 透

化技研で開発中の有機合成設計システムCASINOに於ける立体化学の認識の為のアルゴリズムについて報告された。概略的には、平面構造での原子の等価性認識を最初に行い、その結果に対して更に立体化学的観点から解釈することで、ホモトピック、ジアステレオトピック、エナンチオトピックのいずれかの関係を導くという方針である。

立体化学情報の操作性は有機合成設計に於ける重要な機能であり、立体化学の認識機能はその第一前提である。従って、効率的な認識アルゴリズムの開発が強く望まれている。本報告は通常の有機分子を対象を限定して、発見的手法を適用することにより分子の対称要素(回転軸、鏡映面、対称心、反映軸)を抽出している。実用的には十分使用できるシステムに成り得ると思われるので、システムとしての実現を期待したい。

3XIF27 化学構造式の線グラフ表現に基づくグラフ特性量(2)

(豊橋技科大) ○高橋由雅・三浦竜一・佐々木慎一

化学グラフの線グラフ表現の系列(反復線グラフ)に対して特性量を定義し、それを飽和炭化水素類に適用することによって、構造類似性の指標として機能し得ることが示された。特性量は、反復線グラフの各線グラフの構成辺の数を要素とする特性ベクトルとして定義され、類似性はクラスター分析によって比較している。解析結果によると、低分子の骨格については明確なクラスターが分離され、トポロジカルな類似性に対応していることが示された。更に、任意のノード数のグラフについて同様の結果が成立するのか、特性ベクトルの次数と分離性との関係など、理論的な展開についても興味を持たれるので続報を期待したい。

(東工大・資源化学研) ○竹内 恵・黒田千秋・石田 愈

FORTH系言語T I TにP r o l o gの推論機能を持たせたA I . T I Tの性能を、分子結合性インデックスの計算速度を他の言語(T I TおよびP r o l o g)と比較することによって示している。

T I Tという言語に馴染みがなかったせいもあると思われるが、性能比較の基準があまり明確に説明されなかった印象を受けた。部分構造を記述してしまえば、確かにP r o l o gの機能(パターンマッチング、バックトラック)だけで処理が自動的に進む点が有利であり、プログラミング自体も単純化されると思われる。但し、A I . T I Tの「推論機能」の内容をもう少し詳しく説明すれば、分子設計の応用の可能性について説得力が増したのではないかと思われる。例えば、合成経路探索にはそのまま使える可能性がある。

(国際科学振興財団 中山 堯)

3.XI F29 置換クラスターモデルによる三次元アルミノ珪酸塩構造特性の検討(群馬大)佐藤満雄

三次元フレームワーク上でのSi,Alの分配問題に「Al-Alは隣接せず、第二近接以上で分配する」との規則を加えた置換クラスターモデルが、物理化学特性のいくつかをよく説明することがわかった。

3.XI F30 1-オクタノール/水系分配係数の自動推算システム(山形大)鈴木孝弘 他

log P推算システムにおいて汎用性と正確性は両立させにくいのが、約500種の原子団を設定し、実測値から $\Delta \log P_i$ を求めてファイル化する方法で推算値の誤差を小さくした。

3.XI F31 吸入麻酔薬セボフルレン関連化合物における構造活性相関(浜松医大)白石義人 他

麻酔力価と、分子力場法による最安定配座での双極子相互作用エネルギーおよび双極子モーメント等との相関解析の結果、双極子モーメントのX方向成分に強い相関(0.873)を見いだした。

3.XI F32 受容サイトの分子認識機構—アミノ酸の光学異性体の識別(東京農工大)安川民男

バインのL,R体と、受容体サイトにおける三個のアラニンおよびフェニルアラニンとが作る複合体の最適化構造を水和エネルギーも考慮して計算した。アミノ酸全体が相互作用を示している。

(旭硝子機研究開発部 石田 嘉明)

3XIF33 複数半導体ガスセンサーとパターン認識法による化学物質の匂い識別の試み(2)
(豊橋技科大) 阿部ら

6種類のセンサーによって測定した47種類の化合物のセンサーパターンをクラスター分析および主成分分析によって解析し、エーテル臭、刺激臭、はっか臭の3種の匂いのカテゴリーに分類し、匂いという官能特性を客観的に識別した結果を報告した。

3XIF34 パターン認識によるブランド類の分類(豊橋技科大) 宮下ら

ドイツ産8種、フランス産8種のブランドについて15種類の風味成分データをパターン認識により分類するために、オートスケーリングまたはGram-Schmidt直交化を前処理として適用し、Fisher比に基づいて特徴抽出を行った結果、高い予測率で分類できることを示した。

3XIF36 マイクロコンピュータによる分子構造高速表示プログラムMOLFASSの改良(埼玉大工) 杉山ら

マイコン(PC-9801)を用いる分子構造表示プログラムMOLFASSに対し、(1)球棒模型のアニメーション表示機能の導入、(2)高級言語(C言語)の使用、(3)数値を2バイトから4バイトに変更、(4)80286,80386を使用した機種での高速化、の4点の改良を行い、MOLFASSの機能、適用範囲を向上させた結果を報告した。

(化技研 田辺 和俊)

3XIF37 「化学のためのプログラミング言語」

図書館情報大学 石塚 英弘

プログラミング言語は

1. なぜ多数あるのか?
2. 使い分けないといけないのか?
3. なんでもできる言語はないのか?

と言う三つの問題について豊富な経験と知識に裏付けられながら、
意見が述べられた。各種の言語を使いこなし、演者としての「化学者の」仕様の
定してコメントが随所にあっただろうか。確かに「化学者の」仕様の
う修飾語は魅力的ではあるが、ではそれが必要を得たもの
と問われると講演者ならずとも考え込まざるを得ない。結局の
ところ、特定の問題に限定したシステムと
在のころこれにいちばん近そうである。
このようなタイトルのも、良心的な講演者が困惑してい
る様子の方がえる講演でもあった。

3. XIF 4 1 「化学者のためのネットワーク作り」
東京大学 竹内敬人 吉村伸
化学者同士の情報交換のためコンピュータネットワークを
作ろうと提言があった。まずその効用について以下のよう
な実例を挙げて紹介が行われた。

1. メール交換
2. 論文や報告書の交換
3. 論文投稿
4. 会議の運営

次に、米国の現状について報告があり、わが国でこれを始
めるための準備状況が述べられた。よ、これをやるには単に
金銭的な資源だけでなく、人的資源、すなわちボランティア
要求のよなネットワーク作りが必要である。米国の先行動
が、このよなネットワーク作りの遅れを起さねばならない。
を指して「世界一から取り残されそうである。早期の実現
(豊橋技科大) 阿部英次

関連行事

第3回化学PCソフトウェア研究討論会

主催 化学PC研究会

共催 日本化学会・日本化学会情報化学部会ほか

日時 11月14日(月)～15日(火)

会場 姫路工業大学(姫路市書写2167)

化学の研究および教育に関するパーソナルコンピュータのソフトウェアを発表し、討論を行います。発表形式はデモンストレーションを中心とし、ポスターおよび講演発表を併用する予定です。デモンストレーションに必要なパーソナルコンピュータは、特殊なものを除いて主催者が用意します。

講演申込締切 7月30日(土)

申し込み者には講演要旨の原稿用紙をお送りします。

講演要旨締切 9月30日(金)

講演申込方法 葉書に①講演題目、②発表者名(講演者に○印)③所属、④連絡先(郵便番号、住所、電話番号)を記入のうえ下記までお申し込み下さい。

申込先 〒671-22 姫路市書写2167 姫路工業大学 応用化学教室 中野英彦

電話(0792)66-1661 内線325 FAX (0792)66-8868

部会記事

昭和63年度 情報化学部会 第1回 総会 報告

筑波大学 藤原 譲

例年通り、情報化学部会の第1回の総会が日本化学会春の年次大会の会期中に下記のように開催された。

【日 時】 昭和63年4月3日(日) 16:30-17:20

【会 場】 青山学院大学 X1号館 7階F会場

【出席者】 米田部会長他、約40名

【議事概要】

1. 米田部会長の挨拶で始まり、「部会の活動が盛況になり、学会の情報化学、計算機化学のセッションの参加者の増加は、新しい展開の象徴として喜ばしい」ことなどが述べられた。

2. 総務関係(藤原幹事)

- ・62年度までに、Bulletin隔月発行の定着、財務の安定化、諸規定の整備がほぼ完了したこと。
- ・役員を選出も規定、申し合せにより初めて実施され、今後毎年半数が交代となるので、会員から候補者についての積極的自薦、他薦が要請された。

3. 編集関係(内野幹事-鈴木幹事代理)

6巻2号までの報告と3号以降の計画、特集のテーマ、担当について報告があり、「会員のひろば」への寄稿を含めて協力が要請された。

4. 企画関係 (飯塚幹事)

例年の講習会、今年次大会に始まったミニフォーラム、3月に米田部会長によって組織された“化合物反応の表現”ワークショップなどが報告され、新しい展開が試みられていることが述べられた。

5. 第10回情報化学討論会

世話人京都大学薬学部町田勝之輔教授により、12月5日(月)~7日(水)、京都大学において、例年通り構造活性相関討論会(世話人京都大学農学部藤田稔夫教授)と同時開催の予定であることが報告された。

6. 夏期セミナー

初めての情報化学若手の会が、世話人豊橋技科大高橋、船津幹事により“情報化学夏期セミナー”の題目で、約40名の出席者を予定して、7月に開催されることを目標に、準備が進められていることが報告された。

7. Pacifi_chem '89

細矢会員よりシンポジウムの説明と参加呼かけが行われ、引き続きInformation Transfer部門全体の担当の藤原幹事より、全体として以前ニュースで案内した通り、来年12月17日~22日にハワイで開かれること、および本号のニュースにあるように、決定されつつあるシンポジウムの題目の新規提案または既提案実現のための組織化への協力が要請された。

研究会案内

情報化学、計算機化学、あるいは分子設計・材料設計システムを考えるという研究会は東京を中心にいくつか運営されている。ここではそれらをまとめて紹介する。

1. 知識システムによる分子設計研究会

本研究会は知識工学の手法による分子設計関連の共通基盤的システムおよびデータベース、知識ベースを研究し、それらの資源化および具体的応用手段の研究開発に係る研究者の相互啓蒙、交流および共同研究を図ることによってこの分野の進展に寄与することを目的としている。主たる研究対象は次のようなものである：

- (1)分子設計の手法の調査・開発と系統化
- (2)分子設計に必要な化合物、特性・反応性等のデータベース、知識ベース作成
- (3)分子設計システムの評価、開発

研究会の発足は1980年4月であり、当初は毎月研究会を開催していたが、現在は隔月に行い、共同研究の分科会はほぼ毎月行っている。発足当時分子設計も遠い夢の感じがないではなかったが、その後情報処理と通信技術の急速な進展により化学研究開発に対する支援環境も著しく変化し、商用および自家製の分子設計システムが普及し、またワークステーションやパーソナルコンピュータも手軽に入手できるようになった。またシステムの要素であるソフトウェアやデータベース、知識ベースも各種のものが提供されている。一方、国家的プロジェクトもいくつか開始され、また準備されつつある。さらにはこれらを支える関連技術も急速に展開されつつある。

このような現状から1988年度は実用的な分子設計システムの開発と高機能化、またその有効な利用のために役立つ勉強や協同作業を行うことを基本方針としている。具体的には以下に示す。

まず研究会としては新しい手段の紹介や応用事例を中心にするが、学会発表や論文では記述されない具体的な技法に関するものに重点を置くことにすると共に、この分野の展開のキーとなる技術や将来展開に必要な分野の状況についての学習も行う。対象として取り上げる項目は

- (1)構造活性相関と薬品設計
- (2)合成設計と反応条件設定
- (3)材料設計と加工設計
- (4)データベース、知識ベース
- (5)システム事例
- (6)AI技術、理論
- (7)ハードウェア、ワークステーション等の現状
- (8)ネットワーク技術の展開
- (9)内外のプロジェクト紹介
- (10)その他、関連するもの

などである。講師にはそれぞれの分野での第一人者をお願いすることにして

作業を伴う分科会活動は共同研究に適し、かつ公的プロジェクトに関連して次のような

ものを取り上げている：

- (1)有機合成データベース構築分科会
- (2)合成経路選定知識ベースシステムの開発分科会

合成設計は従来から行ってきたOrganic Synthesisのデータ入力がほぼ完了したので、データ構成も含め実際に使えるように不足している基本データの追加と検索、設計、応用のソフトウェアの開発を行う。また、これら2テーマの他に会員の要望または技術環境の変化に応じて新しい分科会を開設する予定である。分科会活動は1つの機関内で実施するには効率のよくないテーマであるが共同作業なら可能なものを取り上げることになっている。

研究会は企業を単位とする会員制によって運営されている。定期研究会は原則として隔月(奇数月)第3月曜日に開催し、招待講師による特別講演および分科会活動についての打ち合わせ検討を行っている。研究会の運営は財団法人国際科学振興財団研究員・藤原譲(筑波大学教授、研究会代表)、会員の有志幹事、関係分野の専門家および財団事務局が担当している。

なお、国際科学振興財団は文部省所管の試験研究法人であり、学術振興の見地からわが国の当面する各種の緊急課題を解明することによって産業経済の発展、国民の福祉の向上に貢献するという趣旨の下に1977年9月に設立された。そして学会、産業界の創意を結集し、各大学および公的研究機関、民間各企業の研究開発能力を総合し、産学の協力体制による学際的研究と広く国際協力を推進して高度な研究開発を行うことを目的として活動を展開している。

分子設計研究会事務局連絡先 〒101 東京都千代田区三崎町2-18-5 京三会館
(株)日制内 Tel 03-263-4641 (藤原 譲)

2. CBI研究会

本会の正式名称は「計算機と化学・生物学の会」であり、その前身を「計算機と化学・生物学の会設立準備事務局ワークショップ」という。後者の設立は昭和56年に遡る。当初は2ヶ年間で目的を達成したら解散するという趣旨で、筆者の研究室(当時、東京都臨床医学総合研究所医療工学研究室)が中心となって諸活動を推進したが、会員の希望により昭和60年に現在の名称に改め、独立した事務局を設置して、発展的に今日に至っている。しかし、会は「目的を達成したら解散する」という建会の精神を堅持するため、2ヶ年毎に目標を立て、存在の意義を見直すこととしている。

本会の目的は、化学および生物学と、それに関連した薬学やバイオテクノロジー、基礎医学、素材研究など、諸領域における研究開発支援システムとして、分子を扱うコンピュータを想定し、これを自分達の身近に実現しようとするところにある。このようなシステムは分子を立体的に表示するグラフィックスを核とし、これと分子モデリングやデータベース、生体分子の配列データベースと解析システムなどを有機的に結合した複合システムであるというのが、本会が最初から掲げていた開発思想であった。この開発思想にもとづき、内外の先駆的なシステムを広く紹介し、また開発者の好意によって会に提供されたプログラムを会員の利用に呈し、ユーザ会的な講習会を開催するというのがこれまでの主たる活動であった。その後、会員の間で実際のシステムが普及するようになってからは、各ソフトウェア・パッケージのよって立つ方法論をより深く吟味するレクチャーにも力を入れる

ようになった。この他、分子素子の提唱者である(故)F. カーターのような異色の講師による講演会も開かれている。また、他の研究会、例えば有機エレクトロニクス材料研究会や、バイオリジカルデータベース研究会などとの交流もある。

会の行事は研究講演会(約月1回程度)、テーマを決めたいくつかの講習会(コンピュータ端末を使った実習、各テーマにつき年1回)、シンポジウム(年2回程度)であり、これらへの出席はテキストも含めて会員にはすべて無料である。会員の資格は法人会員と一般会員(国公立の研究機関および大学の関係者など非営利団体の研究者)よりなる。法人会員は別に法人賛助組合(現代表、日本化薬・宮崎浩氏)を形成し、会の基本的な運営費用を負担している。ただし、非営利機関の研究者であれば、会員でなくても研究講演会や講習会に自由に(これまでは無料で)参加できる。このようなオープン・ポリシーは本会の大きな特徴である。

本会の広報誌としてCBI NEWSが毎月発行されている。法人会員の窓口へは30部ほどであるが、この他約120部が会員と個人の資料送付者に無料で送られている。

本会の運営は世話人として大沢映二(北大)、神沼二真(東京都臨床研)、細矢治夫(お茶大)、田辺和俊(化技研)、宮崎浩(日本化薬)、八尾徹(蛋白工研)、吉本昌文(三共)、渋谷泰一(信州大)、高橋征三(日本女子大)があたり、この他、大学と企業関係の評議員約14名で役員を構成している。この他に、講演会や講習会はテーマ別に複数の世話人を置いて企画運営している。「会員参加、手づくりの会」が本会のモットーであり、活動内容は会員へのアンケートでチェックしながら進めている。この他に、DEC(VAXを使った講習会)、リクルート(スーパーコンピュータを使った講習会)、日本電気コンピュータシステム(パソコンを使った講習会)、DCL(教室)、フジミック(パソコン通信EYE-NETの提供)など、各社の協力を得ている。

法人賛助組合は代表の他、会計幹事・伊藤貴(日本アポロコンピュータ)、岩田卓仁(長銀経営研究所)が財務を担当している。事務局の責任者は藤田正夫(日本科学技術研修所)である。

なお、代表は創立時より現在まで筆者(神沼)が務めていたが、本年度中に新代表(大沢映二氏)への移行が決定している。これに伴い、会則を多少見直し、一層の発展を図る予定である。入会希望は葉書で事務局まで。

連絡先 〒151東京都渋谷区千駄ヶ谷4-30-3(株)日本科学技術研修所内; CBI事務局
電話 03-475-4354 (神沼二真)

3. 化学PC研究会(The Association of Personal Computer for Chemists)

化学PC研究会は、化学者のためのパーソナルコンピュータ用ソフトウェア研究会が昭和57年当時切望されていたので、化学ソフトウェアの開発者と使用者が一堂に会して情報交換する研究会として、昭和57年1月10日に設立された。

本研究会の活動は次の6つの事業からなっている。会員700名の登録者を中心に活動しているが、研究討論会に集まる未登録も数えると1000名を越す勢いで活動している。

(1)会報JAPCの季刊: パソコン(PC)用の化学ソフトウェア研究の論文集を年4回(3,6,9,12月)発行しており、国際刊行物登録ではISSN0289-8497とCODEN:KKPKDIの番号を受けており、国内外で論文集としての評価を受けている。

(2)成果刊行物の発行：会報JAPC等で読者および使用者から評価を受けたソフトウェアについては再編集して出版社より単行本として発行している。例えば丸善の”化学領域のパソコン”。

(3)最新化学PC用ソフトウェア集の発行：PC用の化学ソフトウェアが年間100件強登録されたもの（調査用紙）を編集した年鑑である。どのような内容（化学ソフトウェア）で誰がどこで開発し、頒布しているかを調査したもので、利用目的別に分類している。この年鑑は1985, 1986, 1987年と刊行し、1988年も調査を進めているので、オリジナルな化学ソフトウェアを開発されている方は事務局までご一報下さい。

(4)化学PCソフトウェア研究討論会：PC用の化学ソフトを日本化学会等の討論会でスライドなどを使って口頭発表されているが、本研究会ではソフトウェアの良し悪しを討論するにはそのソフトをデモ使用しながら対話討論が適している。この趣旨で、第1回（京大、1986年7月）、第2回（埼玉大、1987年11月）と実施し、第3回（姫路工大、1988年11月14, 15日）を企画し、講演を募集している。

(5)化学ソフトウェア頒布：この頒布委員会は1988年5月に発足したもので、化学ソフトウェアの無償配布を許可されたものに対して、コピーの希望があれば会員を対象にコピーサービスを実施するものである。現在、無償ソフト（パブリックドメインソフトのようなものであるが、著作権は作者が所有するもの）の募集を行っているので、応募される方はご一報下さい。リクエストの希望が多かったソフトには年間賞などを企画している。

(6)パソコン通信（PC-VANのSIG）：VAN委員会が中心となってパソコン通信を始めている。PC-VANのSIG（化学とコンピュータ）を主催し、化学におけるコンピュータ利用に関するもの全般について相互に情報交換し合うパソコン通信を行っている。PC-VANを利用してSIGにもアクセスしてみして下さい。

主要役員 幹事会委員長・編集委員会委員長：大島栄次（東工大資源化学研究所教授）
事務局（世話役）：吉村忠与志（福井高専講師）
化学ソフトウェア頒布委員会委員長：下沢隆（埼玉大理学部教授）
VAN委員会委員長：中野英彦（姫路工大助教授）
各種委員会には若干名の委員を委嘱している。

詳細な事項に興味のある方は事務局にご連絡下さい。

事務局連絡先：〒916 福井県鯖江市下司町 福井高専内 化学PC研究会事務局
吉村忠与志 電話 0778-62-1111 内線607 (吉村忠与志)

4. 高分子知識システム研究会

高分子知識システム研究会（英文名 Research Group on Knowledge Systems）は高分子学会の22番目の研究会として昭和61年5月の理事会でその設置が承認された。高分子科学、工業の基礎的データおよび個別応用に関するデータの集積とその利用法の開発により、高分子の情報・知識の体系化を通して高分子材料設計の展開に寄与するとともに、高分子科学、工業の分野においても、研究・開発の速度と精度の向上に資することを目的として、昭和60年秋頃から、藤原謙氏（筑波大学電子情報工学系・教授）が世話人となり、大学、官庁、企業の有識者を中心に、設置準備委員会を発足し、数回にわたって、設置に関する打ち合せや活動方針についての討議を行った。

高分子は先端技術材料や特殊機能材料として脚光を浴びているが、従来から衣・食・住のあらゆる面で広く活用されている。したがって、高分子材料の研究開発は多岐にわたり、これまでに蓄積されているデータ、知識も膨大なものがある。一方、計算機とその利用技術の急速な発展により、研究開発に必要な情報の蓄積と高度利用も進んでいる。しかしながら、高分子に関しては、データ、知識の計算機可読化は国際的にも他分野に比して遅れているが、わが国では特に遅れが目立っている。これは直接の専門家が少なく、また技術およびその基礎となる理論が未発達であることに起因すると考えられる。最近、関連研究者も増加しつつあり、産官学の協力で、高分子研究開発用データ、知識の集積、体系化が行われつつあり、これが新しい高分子材料設計の展開に大きく寄与するものと考えられる。この分野の振興と研究交流の場として、本研究会が設置された。

研究会の企画・運営は運営委員会で行っている。第一期の運営委員会の構成は次の通りである。昭和63年度からは松崎啓氏が運営委員長に就任する。運営委員会の任期は2年である。

運営委員長：西岡篤夫（畿徳工業大学）

運営委員：井上祥平（東京大学工学部）、熊崎昌治（三菱化成(株)総合研究所）、
中条利一郎（東京工業大学工学部）、畑田耕一（大阪大学基礎工学部）、
平石次郎（化学技術研究所）、弘岡正明（住友化学工業(株)）、
藤重昇永（繊維高分子材料研究所）、藤原譲（筑波大学電子情報工学系）、
松崎啓、安川民男（東京農工大学工学部）

研究会の活動は年2-3回の研究会（講演と討論を中心とした勉強会）を開催し、毎回充実した内容の講演と活発な討論を行っている。一昨年9月に第1回の研究会を「知識システムとデータベース」の主題で開催して以来、「高分子知識システムの実例」、「生体高分子と知識システム」、「プラスチック、複合材料におけるコンピュータ支援システム」、「高分子知識システム実用化への道」と回を重ねている。昭和63年度は「知識システムによる高分子設計の手法」（6月24日(金)、於：国立教育会館）、「知識システムによる情報材料設計」（10月）、「知識システムによる高分子の展開」（1月）の開催を予定している。

現在、会員数は法人13社、個人63名（内訳：大学14名、官公庁3名、企業36名）である。研究会への入会については高分子関連の方々だけでなく、コンピュータ関連、さらには他分野にも広く参画していただくようPR、勧誘も行っている。

入会、お問い合わせについては下記までご連絡下さい。

〒104 東京都中央区銀座5-12-8 (社)高分子学会 高分子知識システム研究会

担当 大橋広士 電話 03-543-7858

(大橋広士)

5. 「コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会」（略称 CAMM、Computer Aided Materials and Molecular Design Forum）

本研究会の母体である企業研究会は本年創立40周年を迎える経営研究専門団体である。産業界の実務家に官・学の研究者が加わり、日本の産業・企業がかかえる諸課題を業種・規模・組織を越えて集い、共同で経営戦略・マネジメントの指針を究明し、広く普及活動を行っている。中でも研究開発戦略・管理に係わる研究は20数年前から常設の研究組織を設置し、貴重な成果を生みだし、今日の日本の研究開発の進展に貢献してきた。さて、今

日コンピュータ機能の飛躍的向上は経験と試行錯誤を中心とした従来の伝統的な研究手法を一新し、新しい研究手法として計算化学・計算物理が注目されている。近年、この分野の基盤技術研究が積極的に展開され、注目すべき研究成果も次々に出され、研究は一段と活発化している。しかしこの分野の研究は個別的に行われているのが現状であった。

そこで当会では長年の研究開発マネジメントの研究に加えて、あらたな段階を迎えたこの分野の研究の将来性に期待し、先端技術開発を支援する横断的研究組織として本研究会を企画し、関係各位に趣旨をよびかけたところ、名古屋大学教授堂山昌男氏、豊橋技術科学大学副学長佐々木慎一氏をはじめとして、産・学・官の第一線研究者十数名の賛同をいただき、発起人会を経て、昨年7月正式に標記研究会が発足した。

現在、別記のような産・学・官の先端研究者が毎月1回集い、先端動向の研究状況、研究成果、情報・意見の交流等を通じて、ブレイクスルーのための課題の研究、発展のためのアイデア創出、問題解決をねらいとして活発な討議・交流を展開している。また、本会と並行して分科会を設置し、個別テーマも掘り下げていく予定である。一方でこの分野の研究者の不足が叫ばれていることにも応えて本年4月に研究者の養成を目的とした計算物理・計算化学基礎講座を開講した。

本研究会の特徴は第一線の研究者が学問領域、業種、規模、組織を越えて共通の目標に向かって意見交換すること、さらに学際的、業際的研究の重要性を鑑み、計算物理・計算化学を同時に研究するところにあると考えている。

研究会代表：名古屋大学教授堂山昌男（以下敬称略）

研究会代表世話人：豊橋技術科学大学副学長佐々木慎一

世話人：東京大学山本良一、日本電気大西檜平、松下電器産業山崎正人、

住友化学工業吉田元二、金属材料技術研究所星本健一

研究協力委員：大阪大学権田俊一、北海道大学大沢映二、蛋白工学研究所八尾徹、

化学技術研究所田辺和俊、分子科学研究所柏木浩、他数名

参画企業：山之内製薬、三洋電機、住友電工、東レ、味の素、明治製菓、豊田中研、

京セラ、日立製作所、旭硝子、呉羽化学工業、三菱化成工業、昭和電工、他数十社
連絡先：(社)企業研究会研究事業部 井堀邦雄 03-293-6711 (井堀邦雄)

6. プロテインエンジニアリングとモレキュラーデザイン研究部会

近年、遺伝子工学、タンパク質立体構造解析、およびコンピュータの進歩が合流して、タンパク質の特定部分を人為的に改変し、局所の機能分担を積極的に探ることができるようになってきた。そして天然物より高機能のものを作り出すことの可能性が具体化されたことによって、タンパク質工学の基礎応用戦略の国際的展開は目ざましいものがある。その高度の進歩に対応するためには、分子生物学の進展によって蓄積されたタンパク質構造と機能の事実をふまえた基礎応用両面の広い視野に立った組織的取り組みの必要は勿論、産官学の協調と対応を考慮した施策と実行が求められている。

今後ますます増大するこれらの諸問題に積極的かつ効果的に対応し、高度技術の消化は勿論、相互協調の実を図ることの必要から、本「プロテインエンジニアリングとモレキュラーデザイン研究部会」（略称PEMD）が設立された。社団法人日本工業技術振興協会
の要請により協議の上、小生（磯）を部会長に、蛋白工学研究所長・大阪大学名誉教授池

原森男先生を副部長、渡辺格先生（慶応大学名誉教授）を顧問に、また荒田洋治（東大薬）、石黒正路（サントリー生物医学研）、勝部幸輝（阪大蛋白研）、金久実（京大化研）、松原謙一（阪大細胞工学センター）、松沢洋（東大農化）、三井幸雄（東大薬）、三浦謹一郎（東大工）、宮田隆（九大理）、八尾徹（蛋白工研）、中村春木（蛋白工研）の諸先生を幹事に迎えて、昭和63年3月第一回研究部会を初回に活動を開始した。

しかし現在その基礎となるタンパク質の構造原理の詳細や、アミノ酸配列から三次元構造を予測する方途は定かではない。その推進の努力のかたわら、当面高度の工夫により直接目的機能の改造実施による種々の研究の第一歩を踏み出すことも必要である。ここで大切なことは如何に目的に向かって構造改変の分子設計を行うか、またこの改変に対応した合成遺伝子が効率よく発現して、目的タンパク質を必要量得るには如何なる工夫が必要かということである。しかしながら、タンパク質が本来、他物質とは著しく異なる素材であることから、その技術は従来の科学技術とは異質な未知の側面を多く含んでいる。タンパク質なるが故の技術的困難を克服して、特異な立体構造に基礎を置いた技術開発を進めることが必要になる。そこで、タンパク質工学における問題点を整理し、期待に違わぬ有用な技術として発展させるため、広範な問題の検討と研究や調査などが必要である。以上のような趣旨に基づいて、企業のこの分野への参入や研究開発の推進、研究者との交流や協力に役立つ研究部会の設立は多方面の関係者からの要請に応えるものであると考える。

研究課題の主題は次のようなものが考えられる。

- (1) タンパク質立体構造の解明技術と生物機能についての研究
- (2) タンパク質改造設計についての研究
- (3) 組換えDNAの調製、クローニング技術、変異タンパク質生合成の研究
- (4) 変異タンパク質の抽出、機能検定と分析の研究
- (5) タンパク質構造の原理の探索

これらの課題をめぐるテーマ設定の趣旨を以下に列挙した。研究部会活動方針の紹介に役立てば幸いである。

- (1) タンパク質工学技術導入の諸問題の実質的指導と討議
- (2) 各種問題点をめぐる専門研究者と会員との自由討論
- (3) タンパク質立体構造の決定の諸方策とその問題点、ならびにわが国の現状
- (4) 立体構造活用の諸方策および立体構造予測のための戦略と現状の展望
- (5) 立体構造改変の分子設計と遺伝子設計の諸問題と展開
- (6) 産官学協調のための各分野の現状理解と積極的交流の努力

以上の趣旨に基づき、多数の第一線専門研究者を客員会員に迎え、相互の発展に資するため、講演会、セミナー、見学会や調査研究活動、交流活動、その他広範な活動を意図している。定例の研究部会は年6回、隔月の開催を予定している。多数の企業の参加を歓迎し、かつ広範な希望と期待に柔軟に対処し、相互の意志疎通に意をもちい、部会運営の活性化を意図している。

本研究部会への加入、問い合わせは

社団法人日本工業技術振興協会（東京都港区赤坂6-1-20、国際新赤坂ビル西館12階、
Tel 03-584-0207,0480）「プロテインエンジニアリングとモレキュラーデザイン研究部会」担当鈴木健二まで。
（磯晃二郎）

分子力学と分子動力学に関するワークショップ出席報告

(北大理) 大沢映二

昭和63年4月4日から8日にかけてアメリカフロリダ州タラハッセにあるフロリダ州立大学で開かれた「Workshop on Molecular Mechanics and Molecular Dynamics」に出席する機会を得た。ただし新学期の始まる時期と重なったため、会期が半分終わったところで帰国せざるを得なかったため、前半だけに付いてご報告する。

NSFの肝入りで化学技術計算のためのスーパーコンピューター共同利用施設がアメリカ各地にできたが、今回のワークショップを主催したフロリダ州立大学のSupercomputer Computations Research Instituteもその様な共同利用施設の一つである。ただしワークショップはスーパーコンピューター利用だけが対象ではなくて、分子力学、分子動力学におけるソフトウェア、アルゴリズムを中心テーマとしてとりあげた。このテーマはもちろんスーパーコンピューティングとも密接に関連してはいるが、もともとこのワークショップを企画した当大学化学科のD. F. DeTar教授の研究上の興味を中心であり、また彼が長年殆ど独力で編集に当たってきた最も古い計算化学雑誌Computer & Chemistryの編集方針の一つでもある。

第一日は分子力学に当てられた。まず筆者が基調講演を行なったが、この機会にかねてから進めているAb initio力場(UHF)研究の経過報告をした。Ab initio力場に関してはアメリカにおける進捗状況が気になっていたため、この会議の計画についてDeTar教授から相談を受けたときYale大学のWiberg教授とBIOSYM社のHagler氏を是非招待するようお願いしておいたが、残念ながら両人とも出席できなかった。BIOSYM社からはHagler博士の代理でU. Dinurと言う人がきて、水分子二量体の計算の話をしたが、あまり感心したものではなく、この程度であればBIOSYM社恐るるに足らずと言う感を抱いた。

ついで5件の招待講演があった。西独フライブルグ大学のH.-D. Beckhausは昔からRuechardtと一緒に各種炭化水素のラジカル開裂反応に関連したMM計算を行なっている人で、今回もその話であった。ついで南カリフォルニア大学のA. WarshelがQCFFによる酵素反応などのモデリングの話をした。彼はかなり早い時期に極めて困難かつ複雑な生体反応のシミュレーションを始めたが、計算化学上の武器がやや不十分であるために悪戦苦闘していた。最近では自由エネルギー計算に主力を移して活路を見いだしている。

全員で集まって昼食をとったが、この後に地方のテレビ局のインタビューがあった。DeTar教授がどうしても出るようにと言うので、やむを得ず平野恒夫先生(東大工)にご一緒して頂いて一問一答に汗をかいた。午後のセッションではまず近くのルーヴール大学のD. E. Williams教授が結晶のMM計算の話をした。この人は結晶を利用して非結合相互作用ポテンシャルを決めると言う仕事を一貫して行なっている人で地味ではあるが着実な業績を積み重ねている。ついで世話人のDeTar教

授が自ら極めて重要な講演を行なった。それはこれまでばらばらに作られてきたMM力場とプログラムに統一形式を与えると言う提案である。問題点は誰が書き直しの労をとるかと言うことであるが、どうやらDeTar教授自身が引き受けるつもりらしい。第一日目の最後に南フロリダ大学のD. Raberが有機化学へのMMの応用に関して極めて興味深い話をした。彼はたまたま私が昔プリンストン大学でpostdoctoral fellowをしていた時の同僚で仕事の中身もよく知っていたが、驚いたことに最近話題を集めているM. Saundersのstochastic配座発生アルゴリズムを彼の大学院学生が独力で完成していたことを明らかにした。この講演には質問が続いて終らず、とうとう強制終了となった。

5時からポスターセッションがあり、朝話したことの一部を出した。夕食はこのワークショップに日本から参加した田中（伊藤忠）、中馬（呉羽化学）、島内（富士通九州）に私と平野先生が加わって時ならぬ日本人会の会食となった（他に日本からは中村氏（三菱化成）が来ておられた）。

二日目はカリフォルニア大学サンフランシスコのP. Kollmanが基調講演を行なった。彼は日本にも再々来ているのでご存じの方も多いはずだが、計算化学関連の学会におけるスーパースターの一人である。スーパースターの条件が、いつも新しい結果を話すことの出来る研究能力と、巧みなpresentationであることを再確認した。Warshelと同じく凝縮系反応における自由エネルギー計算とそのimplicationに重点を置いていた。この点も、オーガナイザーのDeTar教授が得意とするところである。私自身は以前にDeTar教授が直線自由エネルギー関係に拘りすぎる様な気がしていたが、彼に先見の明があったようである。次にオランダライデン大学の高名なC. Altona教授（彼は意外に若い）がanomeric効果に関して示唆に富む話をされた。彼は非直交化局在化軌道を用いてこの効果の解析を試みている。電子相関を取り入れることができないし、基底関数依存性が明かでない等の問題点があるが、他の多くの定性的な有機化学的概念も素性の解った成分に分割することがいずれ追々可能になって行く様な気がした。

ついでデータベースの話が三件あった。E. E. AbolaがProtein Data Bankについて、F. H. Allenがケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)について、またR. C. HainesがCASについて何れも甚だ明快な説明を行なった。Protein Data Bankの話は日本でもよく聞いていたが、他の二つは珍しかった。特にCASにアクセスするのに便利なネットワークSTN (Scientific and technical information network) にたいして今月からPCを端末とすることのできるソフトウェアパッケージSTN Expressが加わったと言うことであつた。こうなると日本の化学者もIBM PCクローンを持つ価値が出てくる。

昼食後、飛行場に向かうまでの僅かの時間を利用して機器展を覗いたところ、インテル社のハイパーキューブ平行処理型パーソナルスーパーコンピューターiPSC/2が人目を引いていた。ここでは詳しく述べるスペースがないが、いずれこのタイプの「スーパーコンピューター」がワークステーションに続いて研究室または個人単位で普及することであろう。

(昭和63年4月14日)



日本からの参加者（左より，富士通
島内氏，東大 平野先生，伊藤忠テクノ
サイエンス 田中氏，北大 大澤先生）

4月5～8日, Florida州 Tallahassee, Florida State University に100名を超える参加者を迎えて, 分子力場(MM)/分子動力学(MD)計算に関する講演約20件, ポスターセッション約30件の発表が行われた。学会後半(7/8日)は, Glasgow大学のWhite教授から始まり, Florida州立大学のNavon博士の講演までに8件の講演が行われた。7, 8日の講演は, 学会前半に集中していたMM計算以外の発表が主であり, MD計算関連2件, モンテカルロ法によるポリペプチドのfolding, Artificial Intelligenceの応用可能性, 大規模行列の対角化の数値解法, そしてIndiana州立大学Q.C.P.E.のCounts博士より"Tomorrow's Chemistry"という題で化学のなかでcomputerの果たしてきた役割について示唆に富む講演等があった。

この中で, 筆者の仕事と多少なりとも関連しているため, 記憶に残る2～3を紙面が許す限り紹介してみたいと思う。オランダのGroningen大学のvan Grunsteren教授からは, 生体巨大分子へのMD法の適用に際し, 計算負荷を軽減するための手法として, 1. Shake + Multiple time step Algorithm (simulation時間の増大) 2. Stochastic Dynamics (full dynamics regionの回りにrestrained dynamicsさらにその回りにvacuum regionを設定する。計算負荷の軽減とともにvacuum simulationで問題となるedge効果が考慮に入る。)等の説明があった。NIHのB.R.Brooks博士からは, 定温, 定圧下でのMD simulationという題であったが, 実際には, 1. 様々なcomputerによるMD計算のCPU時間の比較(この中で, 最近注目を集めているStellar Machineの(cost/) performanceが飛び抜けていることに驚かされた。) 2. MD simulationは普通, 定積, 全エネルギー保存条件で行われるが, 定温/定圧条件でのsimulationを行うための方法, アルゴリズムについて 3. 生理活性ペプチド等のショートペプチドの安定立体配座の探索へのMDの応用の内容であった。Florida州立大学のMeirovich博士からは, decaglycineを例として, 彼等の開発してきたScanning method (polymer chainを順次, 将来の分布確率を予測しながら組み立てる統計的方法)を用いて, α -helix, hair-pin構造の安定性をMetropolis法と比較してScanning Methodの利点の紹介があった。

全体をとうして, 他にも様々な, MM, MDの新たな方法, 手法, 応用の発表があり, 気候にも恵まれ, 実りある4日間であった。

海外動向

MEETINGS

9-11 May 1988.

Second QCPE Workshop on Vectorization.
Indianapolis, IN.

Contact: Quantum Chemistry Program Exchange, Department Chemistry, Indiana University, Bloomington, IN 47401 (812-235-4784).

15-20 May 1988.

Third International Conference on Supercomputing and the Second World Supercomputer Exhibition.
Boston, MA.

Contact: Prof. Lana P. Kartashev, or Dr. Steven I. Kartashev, International Supercomputing Institute, Inc., 3000 34th St., South, Suite B-309, St. Petersburg, FL 33711. (813-866-2694).

16 May 1988.

Perspectives in Computational Chemistry.
East Lansing, MI.

Contact: Dr. Charles C. Sweeley, Department of Biochemistry, 212 Biochemistry Building, Michigan State University, East Lansing, MI 48824.

24-26 May 1988.

First Naples Workshop on Bioactive Peptides: Conformation-Activity in Peptide: Conformation-Activity in Peptide Relationships and Interaction.
Capri, ITALY.

Contact: Prof. Ettore Benedetti, Dipartimento di Chimica, Via Mezzocannone, 4, 80134 Napoli, Italy.

29 May-3 June 1988.

16th International Conference of Natural Products Chemistry.
Kyoto, JAPAN

Contact: 日本化学会 担当 中野 (☎ 03-292-6168), 北川 (大阪大理) (☎ 06-877-5111)

1-5 June 1988.

International Conference on Computational Physics.
Beijing, CHINA.

Contact: Richard Isaacson, Physics Division, National Science Foundation, 1800 G St., NW, Washington, DC 20550. (202-357-3474).

5-11 June 1988.

3rd Chemical Congress North America (includes 71st Canadian Chemical Conference, 195th National Meeting of the Sociedad Quimica de Mexico).
Toronto, CANADA.

Contact: B. R. Hodson, 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

15-16 June 1988.

Industrial Applications of Computational Chemistry.
Ithaca, NY.

Contact: Ann Redelfs, Cornell University Theory Center, 265 Olin Hall, Ithaca, NY

14853-5201. (607-255-8686).

20-25 June 1988.

The Third International Course and Conference on the Interface Among Mathematics, Chemistry and Computer Science.

Dubrovnik, YUGOSLAVIA.

Contact: A. Graovac, Math/Chem/Comp 1988, R. Boskovic Institute, YU-41001 Zagreb, POB 1016 YUGOSLAVIA.

21-22 June 1988.

Simulation Technology Conference.

Contact: Technical Institute of Japanese Scientists, 5-10-11 Sendagaya, Shibuya-ku, Tokyo 151, Japan (03-352-2231).

4-8 July 1988.

Computational Chemistry Gordon Research Conference.

Plymouth, NH.

Contact: Dr. Donald B. Boyd, Lilly Research Laboratories, Eli Lilly and Company, Indianapolis, IN 46285. (317-276-4232).

10-15 July, 1988

1988 QCPE Workshop on Semi-Empirical and Ab Initio Techniques with Special Emphasis on Graphics and Networking.

The Apollo Computer Corp. Training Center, Chelmsford, Massachusetts.

Contact: Quantum Chemistry Program Exchange, Department Chemistry, Indiana University, Bloomington, IN 47401 (812-235-4784).

13-15 July 1988.

Methods of Molecular Mechanics and Dynamics Biopolymers.

Pittsburgh, PA.

Contact: Biomedical Coordinator, Pittsburgh Supercomputing Center, 4400 Fifth Avenue, Pittsburgh, PA 15213 (412-268-5206)

8-12 August 1988.

Biomedical Workshop on Supercomputing Techniques.

Pittsburgh, PA.

Contact: Cheryl Brooks, User Services, Pittsburgh Supercomputing Center, 4400 Fifth Avenue, Pittsburgh, PA 15213 (412-268-5206 (inside PA) or 800-221-1641 (outside PA)).

10-12 August 1988.

The Seventh Annual Molecular Graphics Society Meeting.

San Francisco, CA.

Contact: Dr. T. Ferrin, University of California, San Francisco, San Francisco, CA 94143.

22-26 August 1988.

6th International Congress on Quantum Chemistry.

Jerusalem, ISRAEL.

Contact: Prof. Joshua Jortner, School of Chemistry, Tel Aviv University, 69978 Tel Aviv, ISRAEL.

12-14 September 1988.

Advances in Protein Design.

Braunschweig, WEST GERMANY.

Contact: Dr. D. Schomburg, GBF, Mascheroder Weg 1, D-3300 Braunschweig, WEST GERMANY.

13-15 September 1988.

International Conference on Computers in Clinical Medicine-Medical Informatics
88. Nottingham, ENGLAND.

Contact: Conference Division, British Medical Informatics Society, 87 Gower St.,
London, WC1E 6AA, ENGLAND.

25-30 September 1988.

196th ACS National Meeting

Los Angeles, CA

Contact: B. R. Hodson, 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).
Program Chariman for Division of Computers in Chemistry: D. Edelson, Department of
Chemical Engineering, FAMU/FSU College of Engineering, P. O. Box 2175,
Tallahassee, FL 32316-2175 (904-644-5062/6262).

25-30 September 1988.

Computer-Based Methods of Molecular Similarity

Los Angeles, CA.

This mini-symposium is under the sponsorship of the ACS Division on Computers in
Chemistry (COMP). It will take place at the fall ACS meeting in Los Angeles,
California.

Contact: Mark Johnson or Gerry Maggiora, Computational Chemistry 7247-267-1, The
Upjohn Company, Kalamazoo, Michigan 49001

25-30 September 1988.

Computational Graph Theory and Combinatorics

Los Angeles, CA.

Under the sponsorship of the ACS COMP Division, this minisymposium will also take
place at the fall ACS meeting in Los Angeles.

Contact: Dennis Rouvray, Department of Chemistry, The University of Georgia,
Athens, Georgia 30602 (404-542-1933), or Milan Randic, Department of Mathematics
& Computer Science, Drake University, Des Moines, Iowa, 50311 (515-271-2163)

26-29 September 1988.

11th International CODATA Conference.

Karlsruhe, FEDERAL REPUBLIC OF GERMANY.

Contact: DECHEMA, Attn. CODATA Conference, P. O. Box 97 01 46, D-6000 Frankfurt/M.
97, FEDERAL REPUBLIC OF GERMANY.

10-14, October 1988

Computational Methods in Chemical Design.

Elmau, FEDERAL REPUBLIC OF GERMANY.

Contact: Prof. Dr. Carl Krüger, Max-Planck-Institute für Kohlenforschung, Kaiser-
Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a.d. Ruhr, FEDERAL REPUBLIC OF GERMANY.

14-18 November 1988.

International Physico-Chemical Conference.

KYOTO, JAPAN.

Contact: Kinki Chemical Institute IKCOC-4, c/o Osaka Technical Science Center
Building, 1-8-4 Nishi-ku, Osaka 550, JAPAN (06-44-5531).

23-25 January 1989.

Drug Information Association's 5th Biennial Computer-Assisted Chemistry Workshop.
San Francisco, CA.

Contact: Drug Information Association, P. O. Box 113, Maple Glen, PA 19002 or Dr.
"Babu" Venkataraghavan, (914-735-5000, x 3406)

9-14, April 1989.

197th ACS National Meeting.

Dallas, TX.

Contact: B. R. Hodson, 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396) .
Program Chairman for Division of Computers in Chemistry: A. L. Smith, Department
of Chemistry, Drexel University, Philadelphia, PA 19104 (215-895-1861).

14-19 April 1989.

Computer Modelling of Carbohydrates.

Dallas, TX.

Contact: Dr. Alfred D. French, Southern Regional Research Center, U. S. Department
of Agriculture, P. O. Box 19687, New Orleans, LA 70179, (504-286-4250) .

10-15 September 1989.

198th ACS National Meeting.

Miami, Fl.

Contact: B. R. Hodson, 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396) .

October, 1989.

9th International Conference on Computers in Chemical Education and Research
(ICCCRE).

Contact: Mario Marselli, Computer Chemistry, Area Della Ricerca, 00016,
Monterotondo 5, 1-1000 Rome, ITALY.

Third Chemical Congress of North America

Toronto, Canada

June 5-10, 1988

D. Edelson, M. Peterson, Program Chairman

DIVISION of COMPUTERS IN CHEMISTRY

1. A STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP STUDY OF ORGANOPHOSPHORUS COMPOUNDS. R. H. Rohbangh and P. G. Jurs, and W. P. Ashman, E. G. Davis, J. H. Lewis
2. SIMULATION OF CARBON-13 NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE SPECTRA OF 2-NORBORANANOLS. Debra S. Egolf and Peter C. Jurs
3. MICROCOMPUTER IMPLEMENTATION OF 3-D FLUORESCENCE SPECTROSCOPY. Garon C. Smith and Edward J. Fennessy, Jr.
4. CHEMICAL COMPUTER GRAPHICS: HOW SEEING PROMOTES UNDERSTANDING. R. Potenzzone, Jr., and B. R. Gelin
5. POTENTIAL ENERGY SURFACE AND REACTION DYNAMICS ON MACINTOSH MICROCOMPUTER, H. Douglas Kurtz and Kelley E. Watson
6. COMPUTERIZED INSTRUMENTATION FOR SOLUBILITY STUDIES. D. B. Tucker, E. M. Standifer, R. J. Silva, and H. Nitsche
7. ENGINEERING SPREADSHEET MACRO PROGRAMMING, Bradley M. Cassollato.
8. THE USE OF CHEMTALK TO ACCESS CAS ONLINE , ORAC , REACCS , SYNLIB , AND CHIRON . Robert E. Harmon, Maria Munera, Glenn L. Heise

COSPONSORED SYMPOSIA
COMPUTERS IN CHEMISTRY AND
RELATED ABSTRACTS FROM
COMPUTER SECRETARIAT

1. COMPUTERS IN CHEMISTRY: A PERSONAL PERSPECTIVE. William A. Lester, Jr.
2. HOW CHANGES IN COMPUTER TECHNOLOGY ARE REVOLUTIONIZING THE PRACTICE OF CHEMISTRY IN 1988. George C. Levy
3. MODULAR LIBRARY FOR AB-INITIO ATOMIC AND MOLECULAR ELECTRONIC STRUCTURE. Carlos F. Bunge.
4. SOURCES OF PROGRAMS FOR CHEMICAL RESEARCH. Delos F. Detar
5. COMPUTERS, CHEMISTRY AND SOCIETY: A CURIOUS TRIANGLE. William J. Joel
6. NEW EXPERIMENTS, NEW SOLUTIONS. Raymond E. Dessy
7. THE IMPACT OF COMPUTERIZED DATA ACQUISITION AND CONTROL SYSTEMS ON INDUSTRIAL CHEMICAL OPERATIONS: A HISTORICAL PERSPECTIVE. Gary R. Strickler
8. HOW THE USE OF COMPUTERS HAS AFFECTED CHEMICAL EDUCATION: PAST, PRESENT, AND FUTURE. G. Scott Owen
9. CHEMICAL INFORMATION AND NEW TECHNOLOGY: PAST, PRESENT AND FUTURE. Eugene Garfield
10. NEW ANALYTICAL REAGENTS. Raymond E. Dessy
11. CHEMICAL INSTRUMENTATION BASED UPON THE FOURIER TRANSFORMATION. James A. de Haseth
12. CHEMICAL IMAGING USING ION MICROSCOPY AND DIGITAL IMAGE PROCESSING, Young-Chien Lieng, Dan N. Bernardo and George H. Morrison
13. PREDICTION OF PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF ORGANIC COMPOUNDS BY COMPUTER-ASSISTED METHODS. P. C. Jurs, D. S. Egolf, M. N. Hasan, R. H. Rohbaugh, G. P. Sutton
14. SPECTROSCOPY AND MULTIVARIATE CALIBRATION ARE CREATING NEW ROLES FOR THE ANALYTICAL CHEMIST. James B. Callis
15. AN EXPERT SYSTEM FOR METHODS DEVELOPMENT IN LIQUID CHROMATOGRAPHY. S. R. Crouch.
16. THE USE OF ISI REACTION DATA BASES AS LEARNING TOOLS IN ORGANIC CHEMISTRY. Robert E. Harmon
17. COMPUTER SOFTWARE FOR CHEMICAL EDUCATION: EVALUATION, DEVELOPMENT, AND USE. Allan L. Smith
18. LABORATORY SIMULATIONS FOR FRESHMAN CHEMISTRY. R. J. Balahura, N. J. Bunce and U. M. Oehler
19. CHANGING THE FOCUS OF CHEMICAL EDUCATION WITH THE INTERACTIVE VIDEODISC. Loretta L. Jones and Stanley G. Smith
20. THE ROLE OF EXPERT SYSTEMS IN CHEMICAL EDUCATION. F. A. Settle, Jr., L. B. Altman, D. M. McClintock, and Tracy Staller
21. AN ASSISTANT PROBLEM SOLVER FOR IR ANALYSIS. D. Cabrol, J-P. Rabine, T. P. Forest
22. KC EXPERT: A NATURAL LANGUAGE INTERFACE TO A CHEMICAL DATABASE, G. Scott Owen and Taylor Binkley

23. A COMPREHENSIVE COMPUTER-ADMINISTERED INTRODUCTORY CHEMISTRY COURSE. John S. Martin and Edward V. Blackburn
24. TWO YEARS OF PLATO AT THE U OF C -- A CHRONICLE, SOME CONCLUSIONS, FUTURE PLANS. Anthony W. Kirk
25. COMPUTERS IN PHYSICAL CHEMISTRY. A. Pines
26. SOLUTIONS TO CHEMICAL PROBLEMS MADE POSSIBLE BY SUPERCOMPUTERS. C. W. Bauschlicher, Jr., S. R. Langhoff, H. Pattridge, D. W. Schwenke and P. R. Taylor
27. COMPUTER SIMULATIONS IN PHYSICAL CHEMISTRY AND PHYSICAL BIOCHEMISTRY. J. Andrew McCammon
28. THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE PREDICTIONS OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES, A COMPARISON OF METHODS. Bernard R. Brooks
29. THE EVOLUTION OF COMPUTING IN INDUSTRIAL CHEMICAL RESEARCH OVER THE LAST TWENTY-FIVE YEARS. Thomas M. Dyott
30. RESEARCH COMPUTING--A STRATEGIC APPROACH, Peter M. Smith
31. STRATEGIC APPLICATIONS OF INFORMATION TECHNOLOGIES IN PHARMACEUTICAL RESEARCH & DEVELOPMENT. Harold H. Shlevin and W. F. Waite
32. IMPACT OF INFORMATION TECHNOLOGY ON PHARMACEUTICALS RESEARCH, Andrew J. Stuper
33. FINITE ELEMENT SOLUTIONS TO CHEMICAL INDUSTRIAL PROBLEMS, Mario Blanco, John J. Brisbane, Midey Chang-Mateu
34. LOCAL AREA NETWORKING IN A RESEARCH ENVIRONMENT. Lawrence J. Kaetzel, Kimberly A. Hockey
35. BETTER LIVING THROUGH COMPUTERIZATION, Stephen R. Heller
36. SOFTWARE DEVELOPMENT-- A DECADE OF CHANGE. Stuart Marson
37. IMPACT OF THE MICROCOMPUTER ON CANADIAN UNIVERSITY CHEMICAL RESEARCH--PRESENT AND FUTURE: A SURVEY. R. B. Yeats.
38. COMPUTERIZED CHEMICAL INFORMATION: CHANGING THE FACE OF INDUSTRIAL RESEARCH, Philip D. Kutzenco
39. FUTURE TRENDS IN CHEMICAL INFORMATION MANAGEMENT. Myra N. Williams
40. COMPUTER TECHNOLOGY IN THE DAILY LIFE OF AN ORGANIC CHEMIST. Albert Padwa
41. DRUG DESIGN AND SYNTHESIS. K. Steliou, Y. Gareau, P. Salama, and G. Milot
42. PROTEIN FOLDING BY SIMULATED ANNEALING. Edward M. Burgess
43. A GENERATOR OF PROPOSALS FOR SYNTHETIC REACTIONS. M. Bersohn
44. MOLECULAR ORBITAL MODELING OF FREE RADICAL REACTIONS. J. J. Dannenberg

Gordon Research Conference on Computational Chemistry

The second biennial Gordon Research Conference on Computational Chemistry will be held the week of July 4-8, 1988, at Plymouth State College, Plymouth, New Hampshire, USA.

The goal of the conference is to present a current perspective of research on chemistry by computer-based methods. The program will include sessions on macromolecular simulations of proteins and other biomolecules, molecular graphics, molecular mechanics of organic molecules, distance geometry, semiempirical and ab initio quantum mechanics, and modeling of polymers and inorganic compounds.

The following scientists have agreed to participate: N. L. Allinger (U. Georgia), Jeffrey M. Blaney (Dupont), Werner Braun (ETH, Zurich), Axel T. Brunger (Yale U.), Jeremy K. Burdett (U. Chicago), Michael J. S. Dewar (U. Texas), J. Scott Dixon (SKF), Nobuhiro Go (Kyoto U.), Stelian Grigoras (Dow Corning), Thomas A. Haigren (Merck), Kendall N. Houk (UCLA), William L. Jorgensen (Purdue U.), I. D. Kuntz (U. Cal., San Francisco), Joseph W. Lauher (SUNY, Stony Brook), Tommy Liljefors (U. Lund), Klaus Muller (Hoffmann-LaRoche, Basel), Yoshikazu Oka (Takeda, Osaka), Robert S. Pearlman (U. Texas), John A. Pople (Carnegie Mellon U.), Michael J. E. Sternberg (U. London), W. Clark Still (Columbia U.), Terry Stouch (Naval Research Lab), Wilfred F. van Gunsteren (U. Groningen), John J. Wendeloski (Dupont), Shoshana J. Wodak (Free U., Brussels), and Michael C. Zerner (U. Florida).

Two poster sessions will be held for approved contributed papers. Scientists who would like to present a poster paper should prepare a one-page abstract, including title, the name of the intended presenter, the names of all other co-authors, and their addresses. The abstracts must be sent to Dr. Boyd by May 1, 1988.

Information about registration and housing will appear in the first March issue of Science. All inquiries and applications should be sent to the Director, Gordon Research Center, University of Rhode Island, Kingston, RI 02881-0801, USA, or telephone (401) 783-4011.

Dr. Donald B. Boyd
Lilly Research Laboratories
Eli Lilly and Company
Indianapolis, IN 46285 USA

Professor Peter Kollman
Department of Pharmaceutical
Chemistry
University of California
San Francisco, CA 94143 USA

Co-chairmen, 1988 Gordon Research Conference on Computational Chemistry

図 書 紹 介

計算化学ガイドブック-3 大分子計算プログラムの解説-

Tim Clark 著

大澤映二、田辺和俊、杉江正昭、水野正城 共訳
1988, 丸善, 4200 円

本書は西独Erlangen大学のTim Clarkによる“A Handbook of Computational Chemistry” (1985)の邦訳である。著者Clarkによれば、本書は“次のようなハミルトニアンを考えよう・・・”といった調子の文章を見ると鳥肌の立つような人に向けて書かれたものであるという。だから本書にはこの種の本にありがちな数式によるオドロオドロしい説明は一切なく、それぞれの計算方法の背景の説明、プログラムの大要と計算の流れ、入力データの作り方、出力の解釈の仕方、それに各計算方法での注意点がきわめて実践的に書かれている。

今日、応用理論化学ともいふべき計算化学の分野の進展は著しく、高性能のコンピュータと洗練されたプログラムのおかげで、計算化学は手を伸ばしさえすれば誰にでも容易に使える「道具」になりつつある。ただ、科学の他の手法と同様に、その原理の少なくとも概要を知り、計算の実際に慣れ、その結果の解釈の仕方を覚える必要がある。本書はそうした目的に格好の「案内書」である。しかも、日常の研究でこうした計算化学の手法を使っている人達の翻訳であることが心強い。

計算化学の三本柱は「分子力学」、「分子軌道法」および「分子動力学」である。本書のカバーしている分子力学と分子軌道法の分野での三大プログラムとしてよく挙げられるのが分子力学のためのMMP2、半経験的分子軌道法のためのMOPACおよび非経験的分子軌道法のためのGAUSSIAN82である。本書はこの三大プログラムに限定して、基本原理を言葉で説明し、入力データの作り方を化学者にもわかりやすく述べ、出力リストの読み方を詳しく解説している。中にはMOPACやGAUSSIAN82のマニュアルにも載っていない使い方(たとえばFOGO法)さえも書いてある。

邦訳もよくできている。特に分子力学の章は訳者が斯界の権威であるだけに原著者の著述をカバーしての名訳である。原著との違いは決して英語がわからなかったわけではないと断わっているが、訳者の経験に基づいたこうしたいき届いた配慮は日頃MM2を使っている評者にとってもありがたい。分子軌道法の部分もよく訳されている。幽霊原子(ghost atom)とか、分割原子価基底関数(split-valence basis function)など意欲的な訳語もあるが、その幾つかは分子軌道法の日常化と共に定着してゆくことであろう。

評者はかつて原本を手にした時、ぜひ多くの人に読んでいただいて計算化学に慣れたいしんでほしいとそう思った。よき訳者を得て上梓されたことを喜ぶと共に、計算化学が有用な道具であること、それがきわめて簡単な入力データで多くの有用な結果が得られるようになってきていること、そして未完成であるとはいえ計算化学の発展によって、とうてい存在しそうな化学種についてさえも時には実験よりも正確な結果が得られるようになっていく現状を知っていただけたらと思うのである。実践的な解説書なのでHandbookと名付けられている本書に「ガイドブック」という訳をあてた訳者の意図を評価したい。これから計算化学を始めようとする人、現に計算化学に携わっている人にお奨めしたい良書である。

[評者：平野恒夫(東大工学部)]

最近、分子設計や反応設計支援のためのコンピュータ利用が研究開発の効率化のツールとして注目を集めているのは周知の通りである。その中でも、化合物の物性、活性発現のメカニズム、反応性の解析のための方法として計算化学の利用が非常に盛んになってきた。このことは今年1月の本誌(Vol.6, No.1)の「計算化学特集号」を見ても明白である。

しかし、実際に企業での利用の現状を見ると、Q C P Eなどからのソフト導入は盛んに行われてはいるが、それを十分に活用しているとはいえないのではないかと思われる。その理由としては、計算機の能力不足といった点もあろうかと思われるが、最大の問題は適切に計算化学の手法を利用できる人材の不足ではないかと思われる。

すなわち、ある問題に対してどの手法を用いたらよいか、どのような入力をすればよいか、出力をどう解釈すればよいかといったことを、的確に判断できる人材が非常に少なく、また勉強したくても適当なテキストがなかったというのが現状であろう。

本書は、このような現状においてまさに研究者が求めていた格好のテキストである。本書は副題にもあるように、分子力学、半経験的分子軌道法、および *ab initio* 分子軌道法の3大分子計算プログラムの解説書である。

CHAPTER 1 の「計算化学」では、計算化学とはどのようなものであるかを簡単に説明し、代表的なプログラムについて述べている。

CHAPTER 2 の「分子力学」では、分子力学の考え方、分子力学でしばしば問題となるパラメータについてわかりやすく説明している。また、分子力学の代表的なプログラムである MMP2 をどのように使ったらよいかを、実際の例題をもとに、その入力データの書き方、出力の見方を中心に詳しく述べている。

CHAPTER 3 の「分子軌道理論」では、分子軌道法の基本的な考え方を述べ、プログラムの仕組みについて簡単に説明し、分子軌道法プログラムの入力で大切となるZ行列による構造入力を実際の幾つかの化合物を例にとり説明している。さらに、分子軌道法における構造最適化について例示し、ポテンシャル表面という重要な概念についても解説している。また、グループ軌道、Walshダイアグラム、フロンティア分子軌道理論などの軌道間相互作用をわかりやすく説明した定性的分子軌道理論の記述も実際の計算結果を正しく解釈するために非常に有用である。

CHAPTER 4 の「半経験的方法」では、半経験的分子軌道法の代表的なプログラムである MINDO/3 と MNDO の2つを取り上げ、その考え方と特徴について説明している。さらに、MINDO/3 と MNDO の両方の計算を行うことのできる MOPACプログラムについて実際の化合物を例にとり、入力データの書き方と出力の見方、解釈を中心に詳しく説明している。また、512件にもおよぶ MINDO/3, MNDO 関連の文献は、実際の計算にあたって大変参考になるものと思われる。

CHAPTER 5 の「*ab initio*法」では、まず *ab initio* 分子軌道理論についてわかりやすく説明し、代表的なプログラムである GAUSSIAN プログラムの特徴を述べている。そして実際の GAUSSIAN82 の入力と出力例につき詳細な説明が施されている。さらに、実際の解析においてしばしば利用される電子相関を考慮した配置間相互作用(CI)法の考え方についても言及している。

以上述べたように、本書は理論の説明は平易に、必要最小限に抑え、計算化学の実際の使い方をよく使用されるプログラムによりわかりやすく解説したものであり、計算化学の実務家にとって必携の書といえるであろう。【評者：吉田元二(住友化学・大阪研究所)】

文 献 紹 介

" Tetrahedron Computer Methodology " 発刊のお知らせ

This is a new journal published by Pergamon Press under the editorship of W Todd Wipke (U. of California Santa Cruz)

The journal will focus on new methods for handling chemical information, representations, algorithms, and methods for solving chemical problems, particularly related to organic chemistry.

Topics covered include: Chemical Information Science · Application of Artificial Intelligence in Chemistry · Chemistry Simulation Methods · Storage/Retrieval Systems · Synthesis Planning · Structure Elucidation · Chemical Pattern Recognition · Scientific Document Production.

The electronic version of the journal will contain the full text as published in hard copy, but will also provide supplementary information, including: atomic coordinates of molecules · tables of parameters · actual executable program code · source code, in a form directly useful to the subscriber.

· AVAILABLE IN HARD COPY & ELECTRONIC VERSION

· RAPID PUBLICATION

· ELECTRONIC SUBMISSION

· GUARANTEED PUBLICATION OF ACCEPTABLE MANUSCRIPTS WITHIN 90 DAYS

· TYPESET QUALITY

· CONTRIBUTIONS TO INCLUDE:

Full papers, communications, reviews, programs and important news of developments in the field.

· OF PRIME INTEREST TO:

Chemical information scientists, development teams in the chemical software industry and organic chemists who are developing new programs or applications.

Pergamon Office in Tokyo:
5th Floor, Matsuokao Central Bldg.,
1-7-1, Nishi shinjuku, Shinjuku-ku,
Tokyo 160

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

1987年 第6卷第3号 发表题目、著者、頁

A Pharmacophore Hypothesis for Antidepressant Activity, *P. R. Andrews, D. J. Cralk and S. L. Munro*, p.97

Conformational Analysis of Flexible Antidepressant Drugs, *S. L. Munro, D. J. Cralk and P. R. Andrews*, p.104

An Extended QSAR Analysis of Some 4-Aminodiphenylsulfone Antibacterial Agents Using Molecular Modeling and LFE-Relationships, *A. J. Hopflinger, R. L. Lopez de Compadre, M. G. Koehler, S. Emery and J. K. Seydel*, p.111

A Substituent Steric Effect Index Based on the Molecular Graph, *L. B. Kler*, p. 117

1987年 第6卷第4号 发表题目、著者、頁

A Quantum Chemical Study of Insect Juvenile Hormone Mimics: The Active Conformation and the Electrostatic Similarities, *A. Nakayama and W. G. Richards*, p.153

Multivariate Characterization of Amino Acids by Reversed Phase High Pressure Liquid Chromatography, *B. Skagerber, M. Sjoström, and S. Wold*, p.158

Multiple Regression Analysis of Antimalarial Activities of Sulfones and Sulfonamides in Cell-Free Systems and Principal Component Analysis to Compare with Antibacterial Activities, *M. Wiese, J. K. Seydel, H. Pieper, G. Kruger, K. R. Noll and J. Keck*, p.164

Description of Heterocyclic Substituents: A Free-Wilson Type Approach Using D-Optimal Designs, *C. Cativiela, J. I. Garcia, J. Elguero, D. Mathieu and R. Phan Tan Luu*, p.173

Systematic QSAR Procedures with Quantum Chemical Descriptors, *O. Kikuchi*, p.179

1988年 第7卷第1号 发表题目、著者、頁

Molecular Modelling of the Active Site of Enkephalin-Degrading Neutral Endopeptidase-24, 11 (Enkephalinase) An Active Site Model for Neutral Endopeptidase-24.11, *P. R. Andrews, M. N. Isakander, J. Issa and J. A. Reiss*, p.1

Quantum Chemical Studies of H₂-Antagonist-Receptor Complexes. Clmetidine and Related Compounds, *Q. M. Donne-Op den Kelder, E. E. J. Haaksma and H. Timmerman*, p.7

Quantitative Structure-Activity Relationships in a Set of Local Anesthetic Agents, *M. Recanatini, P. Valenti and P. Da Re*, p.12

Crossvalidation, Bootstrapping, and Partial Least Squares Compared with Multiple Regression in Conventional QSAR Studies, *R. D. Cramer III, J. D. Bunce, D. E. Patterson and I. E. Frank*, p.18

Electronic and Hydrophobic Constants of Azoxy Groups Containing Electron Withdrawing Functions, *R. Calvino, R. Fruttero, A. Garrone and A. Gasso*, p.26

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1988年 第2卷第1号(2月) 发表题目、著者、页

Theory and computational application of Fibonacci graphs, *S. El-Basil*, p.1

Computer-assisted structure generation from a gross formula: II. Multiple bond unsaturated and cyclic compounds. Employment of fragments, *I. P. Bangou and K. D. Kanev*, p.31

The shift operator matrix method applied to the two-dimensional nearest and next nearest neighbor problem, *R. B. McQuistan and J. L. Hock*, p.49

Tree pruning and lattice statistics on Bethe lattice, *K. Balasubramanian*, p.69

A note on some coefficients of the Chebyshev polynomial form of the characteristic polynomial, *E. C. Kirby* p.83

COMPUTERS & CHEMISTRY

1988年 第2卷第2号 论文题目、著者、页

Modular libraries and literate programming in software for *ab initio* atomic and molecular electronic structure calculations, *Carlos F. Bunge and Gerardo Cisneros*, p.85

New algorithm and FORTRAN module to carry out the four-index transformation of atomic and molecular physics wholly in central memory, *Carlos F. Bunge, Annik Viver Bunge, Gerardo Cisneros and Jean-Piere Daudey*, p.91

V4ITD: a portable and efficient FORTRAN implementation of the 4IT algorithm using virtual memory and an external storage device, *Carlos F. Bunge, Annik Viver Bunge, Gerardo Cisneros and Jean-Piere Daudey*, p.109

E4ITD: a general FORTRAN implementation of the 4IT algorithm, *Gerardo Cisneros, Carlos F. Bunge, Annik Viver Bunge, and Jean-Piere Daudey*, p. 141

L'utilisation du langage Prolog pour la decomposition des grands procedes climiques, *D. Cabrol, J. P. Caire et P. Ozil*, p.165

Frank-Condon analysis on the IBM PC/AT, *V. M. Miskowski, M. Albin, M. D. Hopkins, D. E. Brinza and H. B. Gray*, p.171

Positive compositional algorithms in chemical reaction systems, *David J. M. Park Jr.*, p.175

A microcomputer program for second-order simulation EPR spectra, *Heikki Joela*, p.189

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
 Chemical Information and Computer Sciences
 The Chemical Society of Japan

日本化学会
 情報化学部会
 Volume 6, Number 4
 July 1988

目 次

部 会 行 事	
有機化学者のためのパソコン利用講習会.....	1
計算化学ワークショップ「機能物質・材料設計のための 計算化学手法」報告.....	田 辺 和 俊 2
年会プログラム	15
関 連 行 事	
「1989年情報学」シンポジウム論文募集.....	16
国 内 の 動 き	
量子化学におけるコンピューターワークステーションから スーパーコンピュータまで.....	安 藤 勲 17
会 員 の 広 場	
「パソコンでもできる本格的分子計算」のためのMM2 プログラム頒布について.....	大 澤 映 二 19
学 会 報 告	
「第16回天然物化学国際会議」報告.....	田 辺 和 俊 20
海 外 動 向	
Meetings.....	21
国 際 会 議	24
文 献 紹 介	
Journal of Chemical Education (Vol. 65, No. 1~No. 4).....	29
Computers & Chemistry (Vol. 12, No. 3).....	30
Journal of Molecular Graphics (Vol. 6, No. 1~No. 2).....	30
Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol. 1, No. 3).....	31
Journal of Mathematical Chemistry (Vol. 2, No. 2).....	31
Journal of Computational Chemistry (Vol. 9, No. 2~No. 5).....	32
Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol. 28, No. 2).....	35

部 会 行 事

「有機化学者のためのパソコン利用講習会」

主催 日本化学会情報化学部会
後援 豊橋技術科学大学、新世代研究所
とき 昭和63年11月30日(水) 午前9時～午後5時
ところ 豊橋技術科学大学計算機センター
〒440豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1
☎ (0532)47-0111(代表)
[交通] JR豊橋駅前③乗り場から豊鉄バス細谷線(細谷東行き、技科大前行き又は福祉村行き)に乗車。技科大前で下車。所用時間約25分

午前の部

1. 反応検索 (東洋情報) 三枝利隆
2. 人工知能的分子表示 (IBM) 小出昭夫
3. 分子計算法 (北大理) 大澤映二

午後の部

4. 立体配座解析 (東工大) 中浜精一
5. 反応選択性の予測-その1 (東工大) 高橋孝志
6. 反応選択性の予測-その2 (広大理) 深沢義正

一人一台づつパソコンを使用して実習を行ないます。

参加費 日本化学会、同情報化学部会および新世代研究会会員：企業体社員 15,000円、学校、官公庁公益法人職員 8,000円、学生 2,000円。非会員：会員の倍額。

参加申し込み方法 葉書大の用紙に「パソコン利用講習会申し込み」と題記して①氏名②勤務先③電話番号④連絡先並びに所属する団体名と会員番号を記入し下記宛にお申し込み下さい。参加費は当日頂きます。

定員 35名。但し、申し込みが定員を超過した場合、一機関から複数の参加を御遠慮頂くかも知れません。

申し込み先 101東京都千代田区神田駿河台3-6-1菱和ビル4階 新世代研究所分子設計研究会 (☎(03)255-5922)

計算化学ワークショップ「機能物質・材料設計のための計算化学手法」報告

世話人 大沢映二（北大理）、田辺和俊（化技研）

当部会主催の表記ワークショップが7月13日（水）日本化学会4階講堂にて行われた。このワークショップ開催の趣旨は会告に記したように、「MO, MM, MDなど計算化学のプログラムは多数開発されているが、依然として分子レベルの計算にとどまっており、企業などで要求される機能物質・材料の設計のための道具としてはまだまだ距離がある。しかし、欧米は勿論、わが国でもこのような分子集合体計算の試みが企業研究者を中心に最近行われるようになり、新素材メーカーの関心を引きつつある。このワークショップでは、表記のテーマに関連して最近研究を行っている企業研究者に話題を提供してもらい、機能物質・材料設計のための計算化学手法の現状と問題点を探る。」ということであり、学会発表とは違ったインフォーマルなミーティングを企画した。

参加費を無料にしたせいもあって当日は80人を越える参加者があり、話の途中でも質問を認めるというフランクな雰囲気のもとに、具体的な話題提供と活発な質疑応答が行われた。参加者には今回の感想および今後の企画などについてアンケートを書いてもらったところ、多くの回答があったが、それらを集約すると次のようになる。

①内容については「企業での研究成果という点で内容が具体的で興味深かった。このような企画は有意義であり、今後行ってほしい。」という意見が多かった。「関西地区で」という要望もあった。

②形式については雰囲気がインフォーマルであり、発表時間が適当であり、討論も十分行えた、などの点で好評であった。

③参加費については「企業の研究発表は宣伝要素もあるので無料でよい」、「今後も是非無料で行ってほしい」という意見の方が多かった反面、「スピーカーの交通費などを負担するために有料でよい」という意見もあった。

④今後の企画については「ab initio法の材料設計への応用」、「各種MOプログラムの比較」、「MOによる化学反応予測」、「MOとMMの相互比較」、「MDの応用（タン

バク質、結晶、溶液)」、「MCの利用法」、「集合体系の化学計算」、「薬物設計」、「タンパク工学への応用」、「Photochemical Hole Burning設計」、「液晶設計」、「高分子材料設計」、「データベースによる材料設計」、「パソコンによる分子計算や材料設計」、「材料設計におけるコンピュータグラフィックス」、「パターン認識と材料設計」、「材料設計へのAIの応用」など、集約しきれないほど種々の要望があった。

以下に、プログラムと話題提供要旨を採録する。

- 10:00-10:30 AMPACに依る電気化学的重合過程の反応解析とポリフッ化ビニリデン(PVDF)の分子軌道計算(リコー中研) 高窪正明
- 10:30-11:00 フォトクロミック・スピロ化合物の分子軌道法による研究(昭和電工) 〇川内進・植田忠夫
- 11:00-11:30 スピロピランの構造: 分子軌道法からスピロオキサジンと比較して(三菱化成総研) 中村振一郎
- 11:30-12:00 α -2,5-ジメチル-3-フリルエチリデン(イソプロピリデン)無水コハク酸の分子構造と電子構造(鐘化中研) 〇吉岡泰規(阪大産研) 入江正浩
- 13:00-13:40 光物理的性質から見た有機非線形光学材料(NTT光工研) 鈴木博之
- 13:40-14:10 有機非線形光学材料の分子設計と合成(東レ高分子研) 恒川哲也
- 14:10-14:50 二次有機非線形光学材料の分子設計(日立 日立研) 〇大野佳代・伊藤雄三・磯貝正人・角田敦
- 15:00-15:30 Pariser-Parr-Pople(PPP)MO法による二次分子非線形光学定数 β の計算予測(住友電工基盤技研) 清水洋
- 15:30-16:00 ニトロフェニルアゾール類とニトロベンゾアゾール類の分子軌道計算による分子超分極率(β)に関する考察(富士写真フィルム足柄研) 〇岡崎正樹・福永宏雄・久保寺征一
- 16:00-17:00 有機非線形光学材料の分子軌道/分子軌道法によるトランスポリアセチレンのソリトン付近の振動計算(ATR光電通研) 森裕平

I/ ピロール、チオフェン、及びフランの電気化学的重合反応に於ける相対反応速度の、分子軌道法に依る研究。

導電性高分子は、ポリマーバッテリー、表示素子、エレクトロニクスデバイス等への応用として多方面から盛んに研究されているものの、実験に依る反応性の解析は、電気化学的重合反応が複雑である為、必ずしも十分でない難い状況にある。そこで、本研究では、分子軌道法を用いて、代表的導電性高分子の材料である、ピロール、チオフェン、及びフランの各重合反応に於ける反応性を、計算に依って比較検討する事を試みた。

化学反応の難易に関するBader-Pearson理論に基づいて考察し、分子の対称性が C_s 、或いは C_2 の時に、カチオン二量反応が、対称性許容となる事が判明した。そこで、 C_s 対称性下で、 α 、 α' -炭素原子間の結合距離(反応座標)の函数として各カチオンダイマーの全エネルギーを計算する事に依って、二量反応を追跡した。実際、 α -炭素-水素原子間の結合距離及びその二中心エネルギーの、反応座標に沿った変化は、水素原子、或はプロトンが、カチオンダイマーから脱離する事を示唆している。更に、ピロール、及びフランの各カチオンの場合、二量過程の活性化エネルギーは大きく、これが律速段階であるの対して、チオフェンカチオンの場合、脱離反応の活性化エネルギーがより大きく、律速段階であると考えられる。この事は、ポリピロール膜に較べ、ポリチオフェン膜が作成しにくい事を、少なくとも部分的に説明していると思われる。従って、全反応の相対反応速度は、チオフェン < フラン ~ ピロール であろう。

II/ ポリフッ化ビニリデン(PVDF)及びそのモデル化合物に関する分子軌道計算

強誘電性を示すPVDFは、応用上重要な機能性高分子の一つである。一般的に云って、強誘電性の本質は必ずしも十分明らかにされていないものの、この性質は結晶及び分子の構造と双極子モーメントとに深く関わっている事が知られている。そこで、本研究では高分子の構造と双極子モーメントの関係に力点を置いて、分子軌道計算を行なった。

最も簡単なモデル化合物である2,2-ジフルオロプロパン(1)の双極子モーメントは、 8.97×10^{-30} C m (2.69 D)と計算された。既に実験で求められている値(8.01×10^{-30} C m)との一致は、満足ゆくものである。他のモデル化合物:テトラフルオロペンタン(2)及びオクタフルオロノナン(3)の双極子モーメントは、夫々、 1.70×10^{-30} 及び、 3.24×10^{-30} C mと求められた。(1)のモーメントに対する、(2)及び(3)の単位モノマ-当りのモーメントの比は、夫々、0.95 及び、0.90であった。これは、炭素鎖が成す正四面体角の自由回転が許されている時、モノマ-のモーメントに対する、(高)分子の単位モノマ-当りのモーメントの比、0.96に非常に近い。

PVDFの三つの多形、I型、II型及びIII型のモノマ-当りの双極子モーメントは、夫々、7.64, 5.64 及び、 5.07×10^{-30} C mと計算された。(1)のモーメントに対する、これら三種のモーメントの比は、夫々、0.85, 0.60 及び、0.57であった。これは、PVDFの立体配座が、I型からIII型へ変化するにつれて、ポリマ-鎖内に於ける双極子モーメントの自由回転が、益々、制限される事を示唆している。上記多形三種の電荷分布は酷似しており、双極子モーメントの差異は、主に、炭素鎖の立体配座変化に基づく事が確認された。

フォトクロミック・スピロ化合物の分子軌道法による研究
(昭和電工) ○川内 進・植田忠夫

1. はじめに
電子スピロ化合物の吸収極大波長の定量的予測ができれば、ある程度化合物の
色が予測できるため、PPP、CNDO/S、INDO/Sといった半経験的
分子軌道法がよく用いられる。しかし、これらのプログラムより近い程度が
高基底状態の計算に定評のあるMINDO/3、MNDOがここのような計算
に用いられる例はほとんどない。従って我々は電子励起のCIを組み込んだ
MINDO/3-SCI¹⁾、MNDO-SCI²⁾を検討した。
今回はフォトクロミズムを示すスピロ化合物についてこれらのプログラムを
適用して得られた結果を紹介する。

2. 結果

1) 閉環体 (紫外線照射前の無色体)

Fig. 1に示すように計算結果は実測のスペクトルの形をよく再現した。

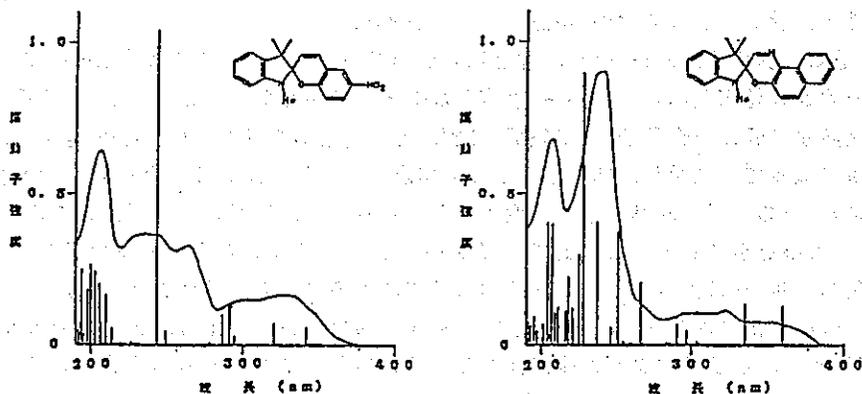


Fig. 1 MINDO/3-SCIによる結果 (棒グラフ)

スペクトルは実測値 (2×10^{-6} M シクロヘキサン溶液、25°C)

2) 開環体 (紫外線照射後の着色体)

開環体の構造は現在明確ではないので Fig. 2に示すようなモデル化合物
について想定した基底状態の反応経路を計算した。

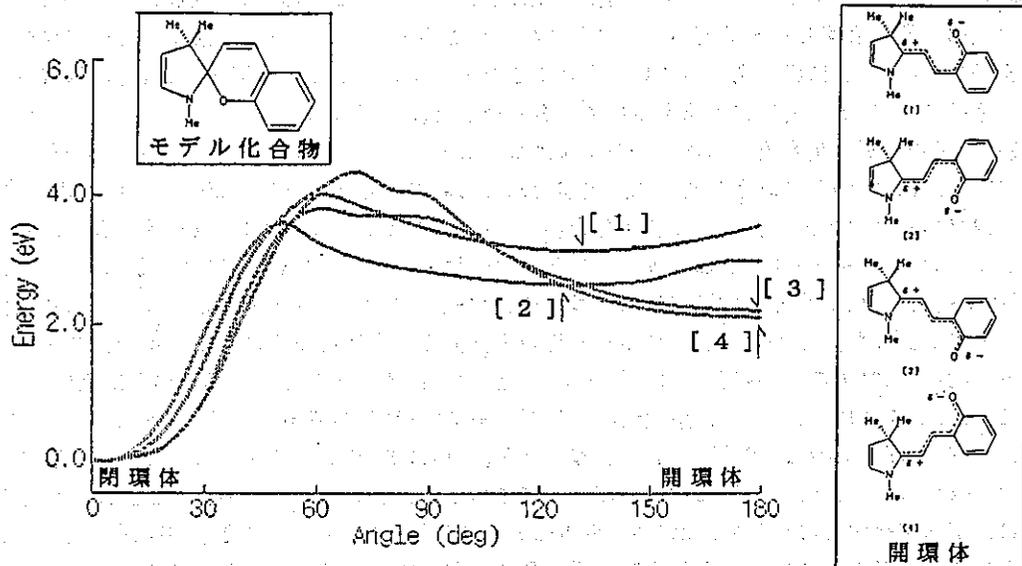


Fig. 2 ポテンシャル・エネルギー曲線

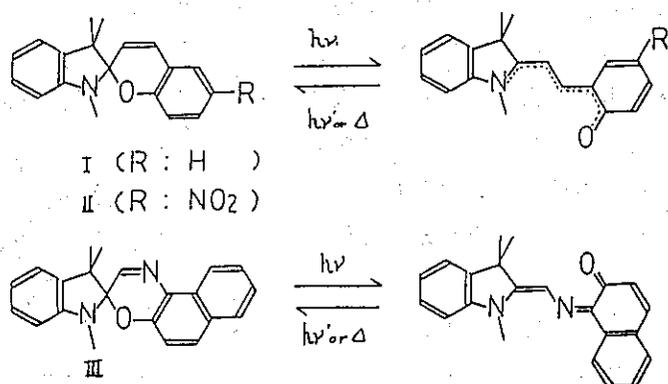
1)、2) プログラム開発は早稲田大学理工学部化学科伊藤礼吉研究室による。

スピロピランの構造；分子軌道法から スピロオキサジンと比較して

三菱化成・総合研究所 中村 振一郎

ホトクロミズムを示す化合物の存在は、古くから知られており実用化されているものも少なくない。しかし化合物を無機、有機と区別すると、実用化されているのは、専ら無機化合物である。有機化合物は近年盛んに研究が進められているが、実用化には幾つかの問題点が残されている。残された問題点を解決するために、我々はこれまで、ほとんど行われていない分子軌道法を用いた反応機構の研究を試みている。対象のスピロ化合物は、スピロピラン (I)、ニトロスピロピラン (II)、そして、スピロオキサジン (III) である。(III) は、(I) や (II) に比べ繰り返し耐久性が非常に高く興味深い化合物である。

スピロ化合物は、炭素-酸素間の結合が、光エネルギーによって失われ開環体となる。この開環体は可視部に吸収帯を持つ。一方、開環体は光、または熱エネルギーによって閉環体(無色)に戻る。開環体には少なくとも4種の構造異性体の存在が予想されるので、それらの構造を半経験的分子軌道法である、MND O法により求め、それぞれについて考察をした。尚、閉環体については、X線構造解析の結果に基づき、その構造について考察を行った。



開環体については、より安定に存在する Transoid 型の四種の構造異性体 (EE, EZ, ZE, ZZ 体) の最適構造を、MOPAC (Ver. 3.1) から MND O C を用いて、求めた。

α-2, 5-ジメチル-3-フリルエチリデン (イソプロピリデン)

無水コハク酸の分子構造と電子構造

(鐘化中研) 吉岡泰規 (阪大産研) 入江正浩

フォトクロミック化合物は光子モードの情報記録材料として期待されており、フルギド類とスピロピラン類が注目されている。情報記録材料に要求される特性の一つに、既存化合物の吸収域の長波長化がある。熱的に安定であるフルギド類に注目し、量子化学計算で吸収波長(励起エネルギー)を計算し、長波長側に吸収域を有する新たな化合物を探索している。

まず図1に示す既知化合物である3-フリルフルギド¹⁾の分子構造と吸収波長の計算を行なった。プログラム MOPAC を用いて MNDO 分子軌道法²⁾より分子構造を最適化し、各異性体の分子構造を決定した。E体とZ体はX線構造解析も行なったので併せて報告する。励起エネルギーは、一電子、二電子励起を含めた配置間相互作用(MNDO-SDCI)より求めた。

図2に最適化されたE体の分子構造を示す。フラン環部は平面構造を保持しているが無水コハク酸部は平面からずれている。フラン環部と無水コハク酸部とは互いに共平面的でなく立体角 41.9° と大きくずれており、π-共役がない事を示している。この構造を反映して HOMO はフラン環のπ軌道、LUMO は無水コハク酸部のπ*軌道と局在しており、CI 計算より、光閉環反応は各部間のπ-π*遷移によって生じる事が解る。更にZ体についても同様の事が言える。

また、E体とZ体の分子構造はX線から得られた分子構造と良く一致している。閉環体は単離できないために、我々の構造は理論的な予測である。閉環体はE体と異なり、分子全体が平面的となり、π-共役が分子全体に広がっている。

更に吸収波長は、理論値と実測値とがよく一致しており、新規なフルギド化合物の分子設計に使用できると考えられる。種々の置換基を導入するだけでなく、異なった骨格を持つ化合物の吸収波長の評価も可能であると考えられる。

1) H.G.Heller et al., J.C.S.Perkin I, 197, 202(1981); J.C.S.Perkin II, 341(1981).

2) M.J.S.Dewar et al., J.Am.Chem.Soc., 99, 4899(1977).

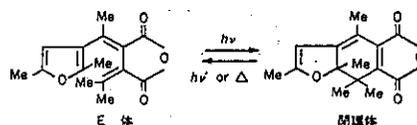


図1 3-フリルフルギドの光化学反応

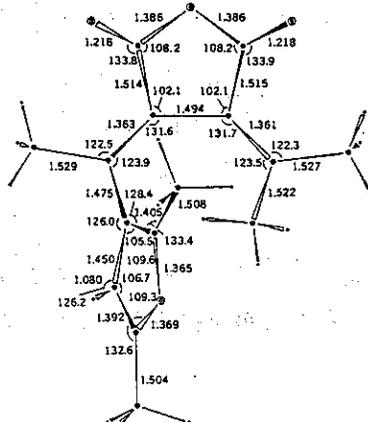


図2 3-フリルフルギド E体の分子構造

【序論】 有機非線形光学材料の材料設計及び評価には分子及び結晶レベルの2つのフェースがあるが、材料設計をより効率的に行うためには、特に材料の分子レベルでの電子構造や光物理的性質などの知見が不可欠である。本ワークショップでは、代表的な有機非線形光学材料であるスチルベン及びパラニトロアニリン(p-NA)誘導体を例にとり、これらの材料の2次の光非線形性について光物理的性質に基づき議論する。

【結果・考察】 分子レベルでの2次の光非線形性を表す分子分極率 β を求める方法のうち最も簡単且つ分子設計にフィットし易いのは2準位モデルであり、このモデルでは、遷移エネルギー ω 、振動子強度 f 及び励起に伴う双極子モーメントの変化 $\Delta\mu$ の3つのパラメータを必要とする。我々は電子スペクトルの測定を中心にさらに分子軌道法(MNDO法)も併せてこれらのパラメータを決定し、まず2準位モデルにより β 値を求め2次の非線形性を評価した。表1に光物理的パラメータと β の2準位モデルによる値(β_{TW})及びOudarらによるdcSHGによる実測値(β_{00})を示すが、両者の一致は悪い。またMONAにおいて認められる β 値の減少は、 f 値及び $\Delta\mu$ 値の減少に現れているようにNH(CH₃)基とOCH₃基との間の立体障害の反映であり、この立体障害の存在はMNDO法を用いた構造最適化計算により確認することができた。

2準位モデルで計算した β 値と実測 β 値が一致しない原因を明らかにするためにさらに詳細に電子スペクトルを検討した結果、これらの分子の第一吸収帯が実際は複数個の電子遷移を含むことを見いだした。そこでまず基底状態と第一励起状態に加え、さらに第二励起状態まで含めた3準位モデルによる β 値を与える式を導出し β 値を求めたところ(表1の β_{TH})、実測値と極めてよい一致が得られた。3準位モデルの場合、基底状態から第二励起状態への励起に伴う $\Delta\mu$ 値が必要であるが、この値を実験的に求めるのは難しく分子軌道法による計算が必要である。

表 1

	ω (nm)	f	$\Delta\mu$ (D)	β_{TW} (10^{-30} esu)	β_{TH} (10^{-30} esu)	β_{00} (10^{-30} esu)
4-AS	374	0.791	3.5	18.5	14.7	12
p-NA	431	0.318	10.1	49.0	36.3	34.5
MNA	436	0.365	9.3	56.5	44.6	42
MNMA	445	0.379	7.6	56.3	—	—
MONA	466	0.342	4.9	46.6	—	—
PAN	458	0.387	6.6	64.2	—	—

2次の有機非線形光学材料の設計指針は比較的明確であり、計算化学が大きな力を発揮し得る分野である。

【参考文献】

- (1)第54回日本化学会(1987)
- (2)第55回日本化学会(1987)
- (3)APL, 51, 401(1987)
- (4)第35回応用物理学会(1988)

1. 有機材料は、その光非線形性が分子内 π 電子に起因しているため、 LiNbO_3 等の無機材料を遥かに凌ぐ大きな光非線形性、高速応答性が期待でき、またレーザー耐性にも優れていることから有望視されている。

非線形光学材料には波長変換素子、電気光学素子等に应用可能な2次材料と光双安定素子等に应用可能な3次材料とがある。最近、特に早期の開発が期待されているため、材料探索が活発になってきた2次材料の分子設計では、分子の光非線形性、すなわち2次の超分極率(β)を大きくすると共に、非中心対称性結晶の形成、紫外可視吸収の短波長化、レーザー耐性の向上等を実現するための工夫をいかに行うかがキーポイントとなる。

2. 一般に2次材料の分子設計では π 電子共役系にドナー基、アクセプター基を導入し、分子に光非線形性を付与する方法がとられており、 β は置換基のドナー性、アクセプター性が強い程、また π 電子共役系が長い程大きくなることが知られている。従って、長い π 電子共役系の共鳴効果の大きい位置に強いドナー基、強いアクセプター基を導入すれば、 β は大きくなるが、この場合には紫外可視吸収が第2高調波の領域まで長波長化する。

我々は π 電子共役系の長さを固定し、 π 電子共役系の構成原子としてヘテロ原子を導入した場合の効果について検討した。

2レベルシステム近似¹⁾を用いると β は遷移エネルギー(W)、振動子強度(f)、基底状態と励起状態の双極子モーメントの差($\Delta\mu_{g-e}$)により表される。そこで、アミノ基とニトロ基を導入したベンゼンおよびピリジン誘導体をモデル化合物とし、その W 、 f 、 $\Delta\mu_{g-e}$ をCNDOS/CI法により計算し、 β を算出した。

3. 計算結果(表1)より、2位にアクセプター基の導入されたピリジン誘導体で β が大きくなることがわかった。そこで、 N -[5-(2-ニトロピリジル)]-(L)-アプロリノール(IPNP)²⁾および、既知化合物では最大のSHGが報告されている N -4-ニトロフェニル-(L)-アプロリノール(NPP)³⁾と N -[2-(5-ニトロピリジル)]-(L)-アプロリノール(PNP)⁴⁾を合成し、比較検討した。

粉末法により評価したこれら化合物のSHGを表1に示す。ほぼ同等であると報告されているNPP、PNP型の結晶構造はIPNPでは崩れ、このためSHGも小さくなっている。このことは双極子モーメントを可能な限り小さくするという分子設計指針の重要性を示唆していると言える。

(引用文献)

- 1) Oudar, J. L. et al., J. Chem. Phys. 66, 2664 (1977).
- 2) 岩本, 恒川, 江川: 日本化学会第54春季年会予稿集 I 711 (1987).
- 3) Zyss, J. et al., J. Chem. Phys. 81, 4160 (1984).
- 4) Iwieg, R. J. et al., J. Chem. Phys. 85, 3537 (1986).

表1 CNDOS/CI法による μ , β の計算値とSHGの実測値

化合物	計算 μ^*	計算 β^{**}	化合物	実測値SHG ^{***}
	6.9	15	NPP	270
	6.3	10	PNP	130
	8.1	20	IPNP	80

* 双極子モーメント [Debye], ** 二次の超分極率 [10^{-30} esu],
*** SHG ($\lambda=1.06 \mu\text{m}$, ウレア比)

2次有機非線形光学材料の分子設計

(日立 日立研) ○大野 佳代 伊藤 雄三 磯貝 正人 角田 敦

1. 序 汎用半導体レーザー(発振波長800nm帯)の高効率SHG変換素子の開発を進めているが、この目的のためには、分子単独で大きな超分極率 β と、短いカットオフ波長をもち、分子の凝集状態では、分子の β が有効に反映されるように結晶化する材料を得ることが重要である。我々はこれらの要求を満たす材料を選定するために分子単独の光学特性、および分子構造と結晶構造との関係の理論予測を前者には分子軌道法、後者にはエネルギー計算を用いて検討している。今回は、これらの検討結果と適用例について報告する。

2. 計算方法 分子の超分極率 β は、時間に依存した摂動論により求めた式に、半経験的分子軌道法CNDO/S3法と一電子励起CI法を用いて計算した。分子間相互作用エネルギーの計算にはVan der Waalsエネルギーとして、Lennard-Jones型ポテンシャルを、静電相互作用エネルギーとして、Coulomb型ポテンシャルを用いた。各原子の部分電荷は半経験的分子軌道法MNDO法により、最適化したものを用いた。

3. 結果 まず、分子軌道法による計算結果をFig.1.に示す。一般の共役系化合物では β が大きくカットオフ波長が長波長化する傾向があるが、複素環化合物の中に、適度に β が大きく、カットオフ波長の短いものがあることが判る。次に、分子間相互作用エネルギー計算においては、まず2分子の安定配置について検討した。計算結果と粉末のSHG測定結果をTable 1.に示す。この結果より本計算法が、結晶の中心対称の有無の予測に関しては有効であることが判る。以上の結果により、我々は目的を満足する化合物として、キサントン、ベンゾフェノン誘導体を見出した。

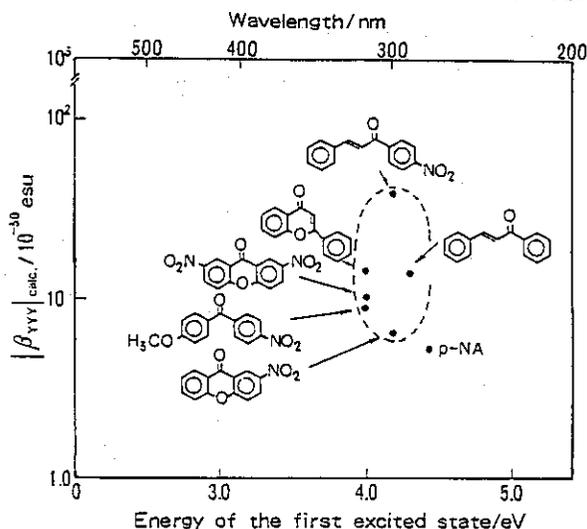


Fig.1 Calculated values of $|\beta_{YYY}|$.

おのおのかよ いたうゆうぞう いそがいまさと かくたあつし

Table 1. SHG activity and results of intermolecular energy calculation

Compounds	Structure	χ_{eff}	l
p-nitroaniline	<chem>Nc1ccc(cc1)[N+](=O)[O-]</chem>	0	y
m-nitroaniline	<chem>Nc1cccc(c1)[N+](=O)[O-]</chem>	8	n
nicotinic acid	<chem>N#Cc1ccc(cc1)C(=O)O</chem>	0	y
isonicotinic acid	<chem>N#Cc1ccccc1C(=O)O</chem>	0	y
xantrone	<chem>O=C1C=CC2=C(C=C1)C(=O)C=C2</chem>	1.1	n
POM	<chem>Cc1ccc(cc1)C(=O)N</chem>	13	n
MNA	<chem>Cc1ccc(cc1)C(=O)N</chem>	22	n

Pariser-Parr-Pople (PPP) MO 法

による2次分子非線形光学定数 β の計算予測

住友電気工業(株) 基盤技術研究所 清水 洋

無機材料に勝る有機材料として非線形光学材料が注目されており、2次の非線形光学材料の探索が広範に行われている。有機非線形光学材料には、分子集合体としての非線形光学定数の大きな材料が望まれている。特に、2次の非線形光学材料では対称心の無い分子配列が必要であり、大きな非線形光学定数を持つ材料を得る為には、(1)分子配列の最適化 及び (2)分子非線形光学定数の大きな分子構造の分子設計が必要である。

2次の分子非線形光学定数 β に関して、最近になって種々の分子軌道法を用いた計算による予測が行われている。

我々は、分子非線形光学定数に対して分子内電荷移動 (CT) 型の分子構造が大きな寄与を有することに着目し、分子内CT型構造を持つ代表的な材料である色素分子の発色 (光吸収波長) の予測にその精度の良さから広く用いられている Pariser-Parr-Pople (PPP) MO 法を J. Oudar の2準位モデルに適用した。

これらの計算値は、dc-SHG法による測定値と良い一致を示した。更に、Benzylideneaniline, 1,3-Dithiole-2-ylidencyanoacetate系化合物に適用した例を中心に述べる。

(富士写真フィルム足柄研) ○岡崎正樹・福永宏雄・久保寺征一

コヒーレントな青色光を、レーザーと第二高調波発生素子(SHG素子)との結合によって得ようとするとき、Azémaらの報告¹⁾に見られるような、SHG素子の吸収による効率の低下を回避しなければならない。しかしながら、従来から知られているp-ニトロアニリン誘導体を始めとする、有機非線形光学材料の多くは黄色であり、青色光を吸収してしまい、青色光の発生には相応しくない。そこで我々は、青色光透過性が高く、高効率の新規な有機非線形光学材料の開発を目指して研究を行なった。

青色光透過性を高める、即ち極大吸収波長を短波長化するための手段として、p-ニトロアニリンの最長波長吸収帯の原因である分子内電荷移動を弱めることを考えた。そしてその方策として、アミノ基の窒素原子を5員複素芳香環に相込むことを検討した。化合物の構造として、フェニルアゾール型(Type I)およびベンゾアゾール型(Type II)が考えられる(図1)。しかし、分子内電荷移動の減少は分子超分極率(β)の低下を招く恐れがある(表1)²⁾。そこでまず分子軌道法による β の計算(PPP法とWardの式³⁾を用いた)を行なった。その結果Type Iにおいては、p-ニトロアニリンと遜色のない結果を示すものが多くみられたが、Type IIにおいては β の低下を招いてしまった(表2)。

この両者間の差異について、分子軌道からの考察を行なった。一例としてピロール誘導体について示した。1-(4-ニトロフェニル)ピロール(1)、5-ニトロインドール(2)のいずれにおいても、p-ニトロアニリン(3)のHOMOおよびLUMOと同形の分子軌道が、NHOMOおよびLUMOに現れている(図2)。Type Iの1においては、これらの軌道間の遷移が主遷移($f=0.90$)であり、分子内電荷移動が大きく寄与しているのに対し、Type IIの2においては、これらの軌道間の遷移は弱まり($f=0.226$)、インドール環内での変化に留まった。HOMOからNLUMOへの遷移が主遷移($f=0.745$)になり、分子内電荷移動の寄与が大きく低下している。 β の大きさを左右する因子の一つである、励起状態と基底状態での双極子モーメントの差($\Delta\mu$)は、インドール環内での遷移では、分子内電荷移動型の遷移に比べて小さくなる(各々、4.93D, 9.41D, 2では16.92D, 3では11.65D)ため、 β が小さくなってしまったものと考えられる。

表3に、より好ましい構造であるType Iの誘導体についての、実験結果を示す。

文献

- 1) Alain Azéma, et al. Proc. SPIE-int. Soc. Opt. Eng., (1983) 400 183
- 2) D. S. Chemla, J. Zyss, Nonlinear Optical Properties of Organic Molecules and Crystals Vol. 1 p76, (Academic Press 1987)
- 3) J. F. Ward, Rev. Mod. Phys., 37 1 (1965)

表1 β の比較

化合物	$\beta_{PPP}/10^{24} \text{esu}$	$\beta_{Ward}/10^{24} \text{esu}$	$\beta_{exp}/10^{24} \text{esu}$
p-NO ₂ -An	2	18.9	12.7
p-NO ₂ -Ph	1.1	4	7
p-NO ₂ -Ph	1.5	19.6	23

表2 PPP法による $\beta/10^{24} \text{esu}$

誘導体	フェニルアゾール型 (Type I)				
	1	2	3	4	5
nitroazole	22.18	27.51	31.70	19.23	18.51
インドール型 (Type II)	6				
	7	8	9	10	11
nitroazole	13.99	11.61	8.00	2.92	22.42

表3 性能評価 (B=200nm, L=400nm vs. 400nm とする)

	1	2	3	4	5
λ_{max}	337	312	267	285	374
吸収係	410	402	388	390	456
G	9.6	1.6	6.4	12.9	22
B	3.6	6.7	5.3	10.7	5.1
B/G	0.38	0.42	0.83	0.84	0.23

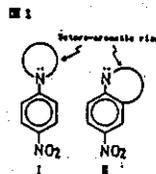
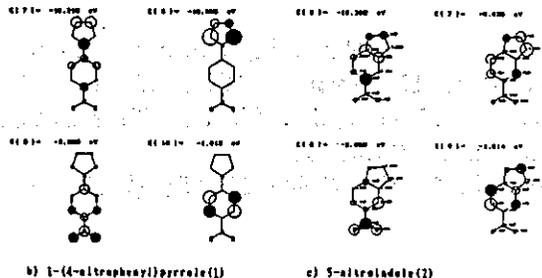
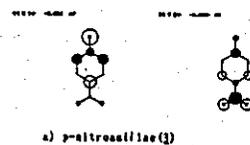


図2 分子軌道



有機非線形光学材料の分子軌道

ATR光電波通信研究所 森 裕平

電子供与基と吸引基をもつ共役系分子が大きい非線形光学効果をもつことが知られており、この仕組みや系統性を明らかにすることが必要である。その手法として、分子軌道法を用いて、2次の非線形光学定数 β を予測することが、Garitoら(1)によって示されていた。分子軌道の形態に注目することは、複数の置換基を持つ分子が非線形効果を持つ場合、どの置換基が寄与しているかを調べるために有効と考えられる。本研究ではニトロ基と電子供与基を含む共役系分子、Nオキシドを含む共役系(2)、およびベンゾキサジアゾールを含む分子(3,4)について、分子軌道法により、非線形光学効果に寄与する軌道の形を求め、置換基との関係を調べた。

Wardの展開式(5)によると、2次の定数 β が大きい値を持つためには、励起状態と基底状態の双極子モーメントの差と、遷移双極子の両方が大きいことが必要である。本計算は、初めにMNDO法により分子構造を最適化し、次にCNDO/S-CIによりそれぞれの励起状態を計算して、各種双極子を求めた。これをもとに、Wardの展開式に代入して β を求めた。また、 β 値に寄与の大きいCI状態を調べ個々のCI状態に寄与の大きい軌道間の電子遷移を調べた。

その計算結果、ニトロ基と電子吸引基が長い共役系でつながっている場合、励起状態で、ニトロ基へ電子が移動し、各ベンゼン環をキノイド構造にし、2重結合が順次ずれるような形の軌道が使われていた。これは、2次の効果の大きい有機物の最も典型的な場合である。この場合、励起に伴う分極の方向と、遷移双極子の方向が同一である。

Nオキシドについては、前者とは逆に、基底状態の方が酸素上に多く分布していた。ニトロ基とNオキシドの両方を含む場合は、ベンゼン環からニトロ基への電荷の移動が主であるが、励起に伴いニトロ基は電子を受け取り、Nオキシドは押し出す形をしていた。

ベンゾキサジアゾールを含むベンゼン環の場合、ニトロ基を含んでいてもいなくても、軌道の形から見て、ニトロ基の影響が主ではなく、オキサジアゾール環の影響が主であった。つまり励起とともにベンゼン間からオキサジアゾール間へと電子が移動している。また、励起にともなう双極子モーメントの変化の方向と、遷移双極子の方向とが垂直であった。

Reference (1) S.J.Lalama and A.F.Garito, Phys.Rev.A20(1979)1179. (2) 森、日本化学会、1987年春、4VIC31. (3) 森、戒能、応用物理学会、1987年春、30a-ZG-8. (4) Y.Mori and T.Kaino, Phys.Lett.127(1988)259. (5) Ward, Rev.of Mod.Phys.37(1965)1.

(*) 本研究は報告者・森がNTT茨城研究センターに滞在中に行った。

分子軌道法によるトランスポリアセチレンのソリトン付近の振動計算

ATR光電波通信研究所 森 裕平

荷電ソリトンを含むポリアセチレン $(CH)_x$ および $(CD)_x$ ($X=1\sim 41$) について、全振動モードを計算し、ソリトン付近に局在化したモードを解析した。方法は半経験的分子軌道法MNDO法を利用して、分子構造を最適化し、次に各原子の位置をシフトしながらエネルギーを求めることにより力の定数行列を求めて解く方法で行った。従来の計算方法、SSHモデルや連続体モデルなどが、1次元のみの動きの近似であることに対して、この方法は、各原子の位置を離散的に取り入れ、3次元的な自由度で行う方法である。

得られた振動モードのうち、ソリトン付近に局在化したモードの、振動数の鎖長依存性を見たところ、一つのモード(T)のみが、鎖が長くなるとともに低振動数側へとシフトし、ソリトンを移動させるモード(T)になることがわかった^(3,4)。この鎖長依存性ができる原因は、鎖の末端の影響である。有限鎖の中のソリトン、有限の箱の中にある量子力学的な粒子と考え、両方でエネルギーは長さの2乗の逆数になるという面が一致する^(4,5)。その際の傾きから、ソリトンの有効質量 $2.2m_e$ が得られた。他の局在化振動モードは鎖長依存性は非常に小さい。

これらソリトンの近傍に局在化した面内振動に注目しながら、移動モード(T)、振幅変調モード(AO)、スタガードモード(Gs)や、それらの分岐モードを分離した。これらの振動モードをもとに、ドーピングしたポリアセチレンの赤外線吸収スペクトルのピークを、 880cm^{-1} はTモード、 1397cm^{-1} はTモードの水素変角ブランチ、 1288cm^{-1} は鎖の厚みを変える光学フォノンと帰属した^(6,7)。

次に重水素置換した分子についても同様に計算した⁽⁷⁾。この分子においても、鎖が長くなるとともに、Tモードが顕著に低振動数化していた。しかし、長さ $x=17\sim 21$ 付近で、Tモードと、このブランチモードである水素の変角振動モード(TH)とが交差しており、両方のモードがカップルしていた。このことから、ドーピングした $(CD)_x$ の赤外吸収スペクトルにおいて、 $790, 1140\text{cm}^{-1}$ 両方のピークが強くブロードになること等が説明できた。

以上の方法によると、ポリアセチレンが有限鎖であることによって、スペクトルが説明できることになる。他方、ドーバントのクーロン力によるソリトンのピンニングで、赤外スペクトルを説明している従来の研究が多くあり、これらの比較のために、ドーバントを近づけたポリアセチレン鎖についても、各振動モードを計算した⁽⁷⁾。その結果、ドーバントが鎖に近いほど、Tモードの高振動数化や、水素の変角振動モードとのカップリングが起こっていた。つまり、有限鎖であることと、ドーバントピンニングとで、同じ結果を引き起こし、どちらと考えてもスペクトルが説明できるが、最近、鎖の長さを変化させてスペクトル線のシフトを測った例があり⁽⁸⁾、有限鎖の説が有力である。

Reference (1) 森、栗原、日本化学会、1987年春、2III-125. (2) 森、栗原、日本物理学会、1986年秋、30P-QA8、1987年秋、26P-J9、1988年春、31P-G410. (3) Y. Mori, H. Tabei and F. Ebisawa, *Synth. Met.*, 17 (1987) 447. (4) Y. Mori and S. Kurihara: *Solid State Commun.* 64 (1987) 947. (5) Y. Mori and S. Kurihara, *Synth. Met.*, 22 (1987) 219. (6) Y. Mori and S. Kurihara, *Synth. Met.*, 24 (1988) 357. (7) Y. Mori, *J. Phys. Soc. Japan*, 57 (1988) 1327. (8) P. Piaggio, G. Dellepiane, E. Mulazzi and R. Tubino, *Polymer*, 28 (1987) 563.

年会プログラム

57秋季年会 化学情報・計算機化学プログラム

日 時 昭和63年9月27日(火)～30日(金)

会 場 東北大学教養部(仙台市川内)

B4会場(化学情報・計算機化学)

9月27日 午前

座長 阿部 英次(9:50～11:00)

- 1B401 固体構造のファイル・システムと画像表示について(1)(東工大総理工)山崎陽太郎
- 1B402 ^1H -NMRスペクトルデータベースによる定性分析の試み(3)ステロイド化合物への適用(日立計測・日立那珂)○田中保子・橋本正雄・笹淵 仁・服部忠鐵
- 1B403 $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ -NMRスペクトルデータベースによる検索同定システム(1)機能とアルゴリズム(日立計測・日立那珂)田中保子・○橋本正雄・笹淵 仁・服部忠鐵
- 1B404 X線粉末回折データより格子定数及び可能な空間群を求めるプログラム(阪教大)○高木義人・谷口友彦・山口 弘・仲田和明
- 1B405 パーソナルコンピューターによるX線結晶構造解析の自動化システムの開発(リコー・東理大工・近畿大理工)○岡田健二・岡田幸子・小山裕三
- 1B406 パターン認識による多環式芳香族炭化水素類の構造と変異原性の相関(豊橋技科大・未来工研)○宮下芳勝・大迫広征・近藤 悟・佐々木慎一
- 1B407 計算機を利用した反応中間体の予測と反応機構の解析(豊橋技科大)○遠藤智明・船津公人・佐々木慎一

座長 山下 善之(11:00～12:00)

- 1B408 エキスパートシェルによる有機合成支援システム構築の試み(富士通)馬場雅浩○湯田浩太郎
- 1B409 有機合成設計CASINOの開発(7)標的化合物と候補出発物質の間の反応行列の設定方法および実行検証例について(化技研・富士通)○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・林 輝幸・湯田浩太郎・樋高 透
- 1B410 アミノ酸・核酸配列解析システムの開発(1)ホモロジー解析のためのプログラム(大日本製薬)○藤原 巖・安福 勉・福永 茂・川島 和
- 1B411 環系部分構造の自動認識(豊橋技科大)○高橋由雅・内山峰隆・佐々木慎一
- 1B412 複数種半導体ガスセンサーシステムによる、ある環境物質の存在下による特定の物質の検出(豊橋技科大)○金谷重彦・阿部英次・高橋由雅・佐々木慎一
- 1B413 活性点のトポケミカルな分布を有する微粒子固体の反応速度過程の解析(慶大理工)○町田方隆・仙名 保

※ 講演時間は1件10分(講演7分、討論3分)です。

関 連 行 事

「1989年 情報学」シンポジウム論文募集

- 目 的** 科学における情報の円滑な流通と高度利用を促進するため、データ・知識に関する基本的問題とその整備・利用に関する討議を行い、研究交流をはかることを目的とする。本シンポジウムは1984年以来毎年開催されているものである。
- 内 容** データ・知識に関する課題を具体化し、その理論化と体系化をめざした下記のような論文を募集する。
1. データ・知識の整備：記述、表現、評価、識別、蓄積など
 2. データ・知識の流通：標準化、媒体変換、分類など
 3. 基礎理論：アルゴリズム（並列・分散コンピューティング、データ構造、分類、暗号理論）、推論、モデリングなど
 4. 応 用：情報工学の枠にとらわれない個別的な専門研究、データベース、AI、言語処理、ソフトウェア工学での応用（分散データベース、オブジェクトデータベース、ハイパーメディア）、統合システム構築法
- 共同主催** 日本学術会議 学術データ情報研究連絡委員会
(予定) 学術文献情報研究連絡委員会
情報学研究連絡委員会
情報工学研究連絡委員会
- 情報処理学会、人工知能学会、日本医学会、日本化学会、日本数学会、日本地理学会、日本物理学会、情報知識学会
- 後 援** 学術情報センター、計測自動制御学会、国際電信電話㈱、情報科学技術協会、情報通信学会、電子情報通信学会、日本医療情報学会、日本科学技術情報センター、日本機械学会、日本金属学会、日本原子力学会、日本材料科学会、日本材料学会、日本生化学会、日本電信電話㈱、日本動物学会、日本農学会、日本分子生物学会、日本分析化学会、日本薬学会、化学情報協会
- 場 所** 日本学術会議講堂（地下鉄千代田線 乃木坂駅下車）
- 参加申込** 氏名、連絡先、職名、資料必要の有無を葉書に記入し、12月20日迄に下記に申し込む。（当日受付もあるが、資料不足の際は事前登録者を優先する）
- 参加費** 共催学協会員 5,000 円、学生 1,500 円、一般 7,000 円（資料代として）
- 講演申込方法** ワープロ使用でA4判用紙4～10枚の論文と題目、氏名、連絡先、職名を記入した別紙を添えて下記宛に申し込む。
- 講演申込締切** 昭和63年9月16日（金）必着
- 採否通知** プログラム委員会で審査し、採否は昭和63年10月1日までに通知する。
- 最終原稿締切** 昭和63年11月30日（水）必着
- 宛 先** 情報処理学会 シンポジウム担当 木村保明
〒106 東京都港区麻布台2-4-2 保科ビル3F ☎03(505)0505

国内の動き

量子化学におけるコンピュータ — ワークステーションからスーパーコンピュータまで

東工大工 安藤 勲

分子の物性量、構造の安定性、反応性などの評価および予測をすることが量子化学の発展とコンピュータの高速化と記憶容量の著しい大規則化によって高い精度で可能になった。最近ではスーパーコンピュータの出現によって演算速度の向上が見られ、量子化学の分野で大きく期待されている。参考のために表1にコンピュータの演算速度および記憶容量の推移を年代順に示した。

私共が取り扱っている高分子の電子構造を実際に計算する上でもっとも重要な点の1つは当然ながらコンピュータの計算スピードであるが、それと同様に重要な点が記憶領域である。高分子と固体物理でよく知られているバンド理論、すなわちtight-binding 分子軌道 (MO) 法で取り扱う場合、高分子鎖の構造の周期性はMOの虚数部で評価するために記憶領域を必要とする。また、*ab-initio* MO法でも、分子積分の値を必要とする計算ではかなりの領域が必要である。このために計算時間の面からは計算可能な時間内にできる計算でも、必要な記憶領域が確保できないため実行できないことも起こっている。いくつかの計算機センターでは拡張領域を用いることによってある程度この困難を解消しているが、拡張領域を用いることによって外部記憶装置との入出力のための時間がかかり、多くの時間を必要とする高分子のMO計算がさらに時間を必要とすることになる。このために、演算速度についてもさらに向上することを必要としない(つまりInput/Outputの回数を減らすことのできる) 主記憶領域の大きいコンピュータが望まれる。ちなみに、ポリエチレン($(\text{CH}_2)_n$)鎖の電子構造をtight binding CNDO/2 MO法で計算したときの計算時間はHITAC280 コンピュータで10秒、S810スーパーコンピュータで3秒程度である。スーパーコンピュータを使用するとき、プログラムをどれだけベクトル化できるかによって計算時間を短縮できることになる。

最近高性能な32ビットワークステーションが安価に手に入るようになってきた。たとえば、SONY NEWSは10数年ほど前の大型コンピュータにも匹敵する計算スピードを持ち、計算可能な記憶領域の大きさも(オペレーティング・システムがUNIXであるため)事実上、無制限であり、50MB程度ならば問題なく確保できる。このようなコンピュータの最大の特徴は、個人が占有できることである。計算機センターで大型ジョブを実行する場合、混んでいる時は実際の計算時間は2時間程度であったとしても、ジョブをサブミットしてから結果が得られるまで2週間もかかることがあり、実質的にNEWSの方が結果が得られるまでの時間が短いということも起こりうる。さらに大型コンピュータ上でのデバッグはかなり能率の悪い作業であることが多く、デバックなどは、NEWS上で行い、大規模な計算のみ大型コンピュータで実行することが能率的であると思われる。ちなみに、上記のポリエチレンの電子構造についての計算時間は3分程である。スーパーコンピュータに比べて計算時間は60倍程になるが、ワークステーションとしては極めて短いとも云える。しかし、大きな計算程大きな差となる。これはコンピュータの価格を考えれば当然のことである。それにもかかわらず、今後上記のようなワークステーションの利用形態が増々多くなっていくものと予想される。

表1 コンピュータの性能の推移

年	コンピュータ名	演算速度 (MFLOPS) ^{a)}	主記憶領域 (MB)
1966	HITAC 5020E	0.57	0.256
1972	HITAC M200H	12.8	16
1982	HITAC M280H	16.6	64
1983	スーパーコンピュータ HITAC S-810/20	630	256
1983	スーパーコンピュータ CRAY X-MP	200	64
1987	スーパーコンピュータ CRAY2	1900	512
1987	スーパーコンピュータ HITAC S-820/80	2000	256

a) 1MFLOPS: 浮動小数演算を毎秒 10^6 回



会員の広場

「パソコンでもできる本格的分子計算」のためのMM2プログラム頒布について

大澤映二（北大理）

3年程前に16ビットパソコンを用いて研究レベルの分子計算が個人レベルで出来るようになった事情を紹介し^{1, 2)}、個人的に手直しして使っていたMM2プログラムのコピーを差し上げる旨発表したところ^{2, 3)}、驚くほど多くの方々から希望があり、現在までに500以上のコピーを送付した。

MM2はAllinger教授が独力で作り上げたプログラムであるので、このような頒布を行なうことに対しては勿論同教授の了解を頂いてあった。この間に計算化学に対する一般の関心が急速に高まって^{2, 4)}、特にMM2については入出力操作を便利に行なうためのアプリケーションプログラムが幾つも市販されるようになり⁵⁾、またMM2プログラムそのものに民間のソフトハウスが改良を加えて販売するような動きも出てきた。ここにいたって次のような問題点が発生した。

(1) ユーザーの立場からすると入出力補助プログラムを購入する際にMM2ロードモジュールと一緒に付いている方が便利である。

(2) しかし、MM2はAllinger教授が研究者に広く使われることを願ってQCPEを通じて公開しているものであるから、これを無断で商品に組み込むのは道義上望ましくない。

そこで、Allinger教授と協議した結果次のような方式をとることにした。

(1) 1977年版のMM2およびその改良版（たとえばMM2'）をそのまま、あるいは商品に組み込んで販売する事を認める。

(2) その際に少額のRoyaltyをAllinger教授に支払う。

(3) Allinger教授はRoyaltyに対する見返りとしてMMシリーズの改良に関する情報を提供する。

これらの事務を司るための公共的な研究会を設立する準備を進めているが、それまでは筆者と連絡をとって頂くようお願いしたい。また、この方式が始まれば日本国内でもMM2を容易に入手する事が可能になると思われるので、これまで個人的に行なってきたMM2パソコン版の頒布は中止させて頂くことにする。但し、研究上のご質問などはこれまで通り出来る限りお答えしたい。

1) 大澤映二、望月裕志、化学、40, 703 (1985).

2) 大澤映二、有合化、45, 1033 (1988).

3) 大澤映二、化学、41, 273 (1986).

4) 大澤映二、化学総説、50号、128 (1986); 「計算化学特集」大澤映二、田辺和俊共編、日本化学会情報化学部会ブレットン、6, 1 (1988).

5) たとえば小川桂一郎他「分子のモデリングと分子力場計算入門」サイエンスハウス、1986; 村上武、尾崎茂、大澤映二「三次元座標簡易発生法」第10回情報化学討論会ポスター要旨集7P06.

「第16回天然物化学国際会議」報告

表記の国際会議が5月29日から6月2日まで国立京都国際会館で開催された。この国際会議では「Computer Use in Natural Product Chemistry」というコロキウムがあり、著名な内外の研究者6人の招待講演があった。その他にもポスターセッションでコンピュータ利用の研究発表が幾つか行われたので、ここではそれらを簡単に紹介する。

[招待講演]

- J.B.Hendrickson (USA): Systematic Synthesis-The SYNGEN Program
彼が永年開発を進めている合成設計プログラムSYNGENの現状を発表。
- P.A.Kollman (USA): Computer Simulations on Organic Molecules
彼のプログラムAMBERをクラウンエーテル、ボルフィリンなどに適用した結果を述べた。
- E.Osawa (Jpn): Application of Molecular Mechanics to Natural Product Chemistry
大員環環状分子や長鎖鎖状分子の配座解析に分子力学計算を応用した結果を発表。
- D.A.Pensak (USA): Molecular Modeling-Scientific and Technological Boundaries
分子モデリングのためのコンピュータ利用技術の現状を総括。
- S.Fujita (Jpn): The Description of Organic Reactions Based on Imaginary Transition Structures-A Novel Approach to the Computer-Oriented Taxonomy of Organic Reactions
彼が創案した虚遷移構造(ITS)による有機化学反応の記述の概念を発表。
- S.Sasaki (Jpn): Application of the Automated Structure Elucidation System (CHEMICS) to the Chemistry of Natural Products
CHEMICSシステムの現状とその天然物化合物への応用について紹介した。

[ポスター発表]

- M.Miyakado et al.(Jpn): Chemistry and Insecticidal Action of a New Polyhalogenated Monoterpenoid, Telfairine from a Red Alga, Plocamium Telfairiae
ACACSシステムを用いて薬理活性分子の構造を解析。
- Y.Uchino et al.(Jpn): A New Ichthyotoxic Cembranokide from the Soft Coral
毒性を示す大員環環状分子の配座を分子力学法で解析。
- T.Chuman et al.(Jpn): Shape Analysis of Serricornin, the Sex Pheromone Produced by Female Cigarette Beetle (*Lasioderma serricorne* F.)
同じく環状分子の配座を分子力学法で解析。
- Y.Fukazawa et al.(Jpn): Evaluation of Stereoselectivity by ab initio-MM2 Method- Stereochemistry of Meli Addition to Cyclohexanone Having Flexible Long Chain
ab initio法とMM法を組み合わせて反応の立体選択性を予測。
- Y.Kato (Jpn): Superposition of Teleocidins and Phorbol Esters by a New Computational Method
三次元グラフィック端末を用いて2分子の構造の類似度を解析。
- S.Tsuzuki et al.(Jpn): Refinement of Molecular Mechanics Parameters.XV.Ester and Ether Groups
ab initio計算値を用いてMM2'のパラメータを最適化。
- T.Uchimarui et al.(Jpn): A Novel Computer-aided Design System for Organic Synthesis (CASINO).VI.Generation of Chemical Reaction Sequences
合成設計システムCASINOにおける反応経路探索方法。

田辺 和俊 (化技研)

MEETINGS

4-8 July 1988.

Computational Chemistry Gordon Research Conference.
Plymouth, NH

Contact: Dr. Donald B. Boyd, Lilly Research Laboratories, Eli Lilly and Company,
Indianapolis, IN 46285. (317-276-4232).

13-15 July 1988.

Methods of Molecular Mechanics and Dynamics of Biopolymers.
Pittsburgh, PA.

Contact: Biomedical Coordinator, Pittsburgh Supercomputing Center, 4400 Fifth
Avenue, Pittsburgh, PA 15213 (412-268-5206).

8-12 August 1988.

Biomedical Workshop on Supercomputing Techniques.
Pittsburgh, PA.

Contact: Cherolyn Brooks, User Services, Pittsburgh Supercomputing Center, 4400
Fifth Avenue, Pittsburgh, PA 15213, (412-268-5206 (inside PA) or 800-221-1641 (outside PA)).

10-12 August 1988.

Molecular Graphics Society Annual Conference.

The Molecular Graphics Society will hold its Annual Conference in San Francisco,
California, USA, on 10-12 August 1988. This seventh annual meeting will be the
first to be held in the United States.

Schedule of Events:

Technical Sessions Wednesday-Friday, 10-12 August 1988, 9 A.M.-5 P.M.

Vendor Exhibition Wednesday, 10 August 1988, 3 P.M.-7 P.M.

Thursday, 11 August 1988, 10 A.M.-6 P.M.

Conference Reception Thursday, 11 August 1988, 7 P.M.-10 P.M.

Contact: Graphics Conference Office, P. O. Box 385, 16951, Pacific
Coast Highway, Sunset Beach, CA 90742, USA (213-592-1382)

21-26 August 1988.

9th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry.
Regensburg, FRG.

Contact: Dr. J. Wendenburg, ICPOC 88 Secretariat, Gesellschaft Deutscher
Chemiker, Abt. Tagungen, Varrentrapp-Strasse 40-42, P. O. Box 90 04 40, D-6000,
Frankfurt/Main 90, FRG.

22-26 August 1988.

6th International Congress on Quantum Chemistry.
Jerusalem, Israel.

Contact: Prof. Joshua Jortner, School of Chemistry, Tel Aviv University, 69978 Tel
Aviv University, 69978 Tel Aviv, Israel.

4-17 September 1988.

Computer Simulation of Fluids, Polymers and Solids.
Bath, ENGLAND.

Contact: C. R. A. Catlow, Dept. of Chemistry, University of Keele, ST5 5BG,
ENGLAND.

12-14 September 1988.

Advances in Protein Design.
Braunschweig, WEST GERMANY.
Contact: Dr. D. Schomburg, GBF, Mascheroder Weg 1, D-3300 Braunschweig, WEST GERMANY.

13-15 September 1988.
International Conference on Computers in Clinical Medicine-Medical Informatics
88. Nottingham, ENGLAND.
Contact: Conference Division, British Medical Informatics Society, 87 Gower St., London, WC1E 6AA, ENGLAND.

25-30 September 1988.
196th ACS National Meeting.
Los Angeles, CA.
Contact: B. R. Hodson, 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396)
.Program Chairman for Division of Computers in Chemistry: D. Edelson, Dept. of Chemical Engineering FAMU/FSU College of Engineering, P. O. Box 2175, Tallahassee, FL 32316-2175 (904-644-5062/6262).

25-30 September 1988.
Computer-Based Methods of Molecular Similarity.
Los Angeles, CA.
Contact: Gerry Maggiora or Mark Johnson, Computational Chemistry, 7247-267-1, The Upjohn Company, Kalamazoo, MI 49001 (616-358-7830 or 384-9350).

26-29 September 1988.
11th International CODATA Conference.
Karlsruhe, FEDERAL REPUBLIC OF GERMANY.
Contact: DECHEMA, Attn. CODATA Conference, P. O. Box 97 01 46, D-6000 Frankfurt/M. 97, FEDERAL REPUBLIC OF GERMANY.

5-6 October 1988.
5th European Seminar and Exhibition on Computer-Aided Molecular Design.
Nice, FRANCE.
SPEAKERS TO INCLUDE:

Dr. J. Baum, Univ. of London, UK
Dr. A. Bloomer, MRC Laboratory of Molecular Biology, UK
Dr. T. Clark Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, W. Germany
Dr. R. Dwek, Univ. of Oxford, UK
Dr. J. -E. Dubois, Institut de Topologie et de Dynamique des Systemes, Université de Paris, France
Dr. F. Gago, Univ. of Alcala de Henares, Spain
Dr. M. Hibert, Merrell Dow Research Institute, France
Prof. B. Honig, Columbia Univ., USA
Dr. P. Madden, Univ. of Oxford, UK
Dr. J. O. Morley, ICI Plc, UK
Dr. E. Westhof, Institute de Biologie Moleculaire et Cellulaire, CNRS, France

Contact: Penny Robinson, IBC Technical Services Ltd., Bath House, 56 Holborn Viaduct, London EC1A 2EX, ENGLAND (01-236-4080; TELEX: 888870).

10-14 OCTOBER 1988.
Computational Methods in Chemical Design.
Elmau, FEDERAL REPUBLIC OF GERMANY.
Contact: Prof. Dr. Carl Krüger, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a.d. Ruhr, FEDERAL REPUBLIC OF GERMANY.

25-27 October 1988.

Scientific Computing & Automation Conference and Exposition.
Philadelphia, PA.

Contact: The Program Committee, Scientific Computing & Automation, Box 1952,
Dover, NJ 07801-0952 (201-361-9060; Telex: 710-986-7492).

1-4 November 1988.

IV Informatic Argentine Meeting on Chemical Sciences.

La Plata, ARGENTINA.

Contact: Dr. Eduardo A. Castro, INIFTA, Sucursal 4--C. C. 16, La Plata 1900,
ARGENTINA.

14-18 November 1988.

International Physico-Chemical Conference.第4回国際有機化学京都会議

Kyoto, JAPAN.

連絡先: 550 大阪市西区靱本町1-8-4 大阪科学技術センタービル 近畿化学協会 IKCOC-4係
(06-441-5531)

23-25 January 1989.

Drug Information Association's 5th Biennial Computer-Assisted Chemistry
Workshop. San Francisco, CA.

Contact: Drug Information Association, P. O. Box 113, Maple Glen, PA 19002 or Dr.
"Babu" Venkataraghavan, (914-735-5000, x3406).

9-14 April 1989.

197th ACS National Meeting.

Dallas, TX.

Contact: B. R. Hodson, 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396)
. Program Chairman for Division of Computers in Chemistry: A. L. Smith, Dept. of
Chemistry, Drexel University, Philadelphia, PA 19104 (215-895-1861).

14-19 April 1989.

Computer Modeling of Carbohydrates.

Dallas, TX.

Contact: Dr. Alfred D. French, Southern Regional Research Center, U. S. Department
of Agriculture, P. O. Box 19687, New Orleans, LA 70179 (504-286-4250).

1-11 June 1989.

Three Dimensional Molecular Structure and Drug Action.

Erice, Trapani, ITALY.

Contact: Prof. L. Riva di Sanseverino, Istituto de Mineralogia, Piazza Porta San
Donato 1, 40127 Bologna, ITALY.

10-15, September 1989.

198th ACS National Meeting.

Miami, FL.

Contact: B. R. Hodson, 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

INTERNATIONAL CONFERENCE ON MATHEMATICAL CHEMISTRY

March 5-9, 1989 In Galveston, Texas

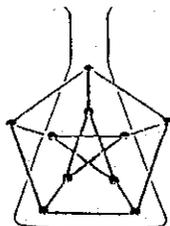
This is the third conference in a sequence, the first two of which were held in 1983 and 1987 at the University of Georgia and entitled

Chemical Applications of Graph Theory and Topology.

For the present conference, various mathematical chemical applications are solicited. Reports on novel computational techniques are welcome.

Invited plenary speakers

A.T. Balaban* (Bucharest)
M. Eigen* (Gottingen)
M.E. Fisher (Maryland)
R.L. Graham* (AT&T, New Jersey)
H. Hosoya* (Tokyo)
D.E. Knuth (Stanford)
N.H. March* (Oxford)
J. Paldus* (Waterloo, Ontario)
R.G. Parr* (Chapel Hill, N. Carolina)
L. Pauling* (Stanford)
E. Ruch* (Vienna)



Additional Speakers

F. Harary* (Las Cruces, New Mex.)
W. C. Herndon* (El Paso, Texas)
Y. Jiang* (Changchun, China)
R.B. King* (Georgia)
M. Levy* (New Orleans)
F.A. Matsen* (Austin, Texas)
M. Randić* (Des Moines, Iowa)
D.H. Rouvray* (Georgia)
J. Simon* (Iowa City)
O. Sinanoglu* (Yale)
D. Summers* (Tallahassee, Florida)
N. Trinajstić* (Zagreb)
F. T. Wall* (San Diego)
M.C. Zerner* (Gainesville, Florida)

* (at least tentatively) accepted

Short papers or posters are being accepted for the conference.

Location : the historic Galvez Hotel on the beach-front of Galveston Island.
Accommodations at a conference rate of \$55/night either single or double .
Conference fee : \$125 (US) ; Checks payable to Mathematical Chemistry Conference;
Texas A&M University at Galveston

IXth International Conference on Computers
in Chemical Research and Education

May 28 - June 2, 1989

Riva del Garda, Italy

SCIENTIFIC PROGRAMME

The conference will be devoted to the following main topics:

1. Classical Chemometrics
2. Expert Systems in Chemometrics
3. Synthesis Design, Reaction Prediction
4. Structure Elucidation
5. Computer Graphics
6. Intelligent Instrumentation and Automated Laboratory Equipment
7. Molecular Modelling
 - Physico-chemical Parameters
 - Molecular Mechanics
 - Molecular Dynamics
8. Supercomputers in Chemistry
9. Personal Computers, Workstations
10. Drug Design and QSAR
11. Data Acquisition, Data Banks
12. Computers in Protein Design
13. Computer Chemistry in Industry

LECTURES AND POSTERS

World-known scientists will be invited to present lectures about the state-of-the-art in the main areas of Computer Chemistry. A number of key-note lectures and oral poster presentations will cover the whole spectrum of topics. A parallel poster session, on display during the whole conference period will enrich the global scientific content of the meeting.

WHAT IS NEW

A special session will be dedicated to Computer Chemistry applications on real problems encountered in industry, a reality that cannot be bypassed. This special session includes lectures from organizations that are sponsors of the IXth ICCRE. Space will be also dedicated to computer-assisted protein design and super-computers in chemistry.

EXHIBITION

Hardware and software manufacturers wishing to present their products will get this opportunity at the Exhibition Section inside the conference building.

LOCATION

The IXth ICCRE will be held in Riva del Garda, a nice lake-shore town at the north end of the Lake Garda, one of the most beautiful natural scenarios of the world. A short drive from magnificent Verona and Venice.

RE-REGISTRATION

For further information, in particular for receiving the second circular, contact the ICCRE office at:

Prof. Dr. Mario Marsili
IXth ICCRE
Piazza Gondar, 14
00199 Roma, Italy

BIO FAIR TOKYO '88

東京国際バイオ・フェア

主催 バイオインダストリー協会

協賛 日本化学会ほか

日時 シンポジウム 昭和63年10月19日(水)～22日(土)

バイオ展 昭和63年10月20日(木)～23日(日)

会場 サンシャインシティ・コンベンションセンター

(東京都豊島区東池袋3-1)

10月21日(金)会場Ⅱ

○データベースのバイオインダストリーにおける新しい役割と展望

- ・現状と展望
- ・新しいデータベースの構築と展開 DNA、蛋白質、細胞、その他
- ・ネットワークの確立、試論、国際協調 ソフトウェア、人工知能
- ・バイオインダストリーへの浸透と応用

James C. Cassatt (米国、NIH)

Peter Friedland (米国、NASA)

Richard J. Feldmann (米国、NIH)

金久 實 (京大)

太田隆久 (東大)

菅原秀明 (理化学研究所)

連絡先 〒105 港区新橋5-10-5 同和ビル(財) バイオインダストリー協会 ☎03-433-3545

第2回蛋白工学国際会議

Protein Engineering '89

2nd International Conference

開催期間: 昭和64年8月20日(日)～25日(金)

開催場所: 神戸国際会議場(兵庫県神戸市)

会議主要テーマ: 1. Theoretical aspects of protein
2. Structural aspects of protein
3. Functional aspects of protein
4. Medical and industrial aspects of protein

ワークショップテーマ:

1. Data base
2. Expression of protein

連絡先: 〒103 中央区日本橋小伝馬町12-5 小伝馬町佐工ビル6F

(株)蛋白工学研究所 気付 日本蛋白工学会

「Protein Engineering '89 事務局」 ☎03-663-6401 FAX 03-663-4260

BEILSTEIN WORKSHOP
The Estimation of Physical Data for
Organic Compounds

上記はBeilstein Institute の主催で下のとおり開催された。
日 時 昭和63年 5月16日～20日
場 所 Schloss, Korb, Bolzano, Italy

— プログラム —

Chemical Information-Promotion of Innovation in Science and Technology. J. M. Czermak

The Importance of Data Estimation for the Beilstein Information System. C. Jochum

Data about the Data. L. Domokos

Questions and Issues about the Process of Estimating Properties of Chemicals, S. R. Heller

Numeric Features of the Beilstein Data Base on STN, A. Barth

The Thermodynamics Research Center Database on Original Measurements and Evaluated Data, K. N. Marsh

Estimation of Biological Properties of Organic Molecules. G. W. A. Milne

Physico-Chemical Property Data Bank for Science and Technology. P. Chuchavalec

Molecular Orbital and Froce-Field Calculations for Structure and Energy Predictions. T. Clark.

Estimation of Thermodynamic Properties of Organic Compounds in the Gas, Liquid and Solid Phases at 298.15 K. E. S. Domalski.

Empirical Methods for the Calculation of Physicochemical Data of Organic Compounds. J. Gasteiger.

Statistical Thermodynamics: Current Perspectives and Limitations of Fluid Property Estimation. K. Lucas.

One and Multidimensional Numerical Interpolation Methods. P. Jopchum.

A Fuzzy Approach to Predicting Chemical Data from Incomplete, Uncertain and Verbal Compound Features. M. Otto.

Ranking and Clustering of Chemical Structure Databases. P. Willett.

Prediction of Physicochemical Properties of Organic Compounds from Molecular Structure. P. C. Jurs.

Current Problems in Quantitative Structure-Activity Relationships. H. Kubinyi.

Computation of Volumes and Surface Areas of Organic Compounds. M. Marsili.

A Total System for Molecular Design. S.-I. Sasaki.

Physico-chemical Data Estimation for Environmental Chemicals. R. Brüggemann.

Application of Molecular Topology for the Estimation of Physical Data for Environmental Chemicals. A. Sabljic.

Industrial Use of Group Contribution Methods for Prediction of Physical Properties. P. M. Mathias.

Experience with the Development of a Group Contribution Equation of State for the Evaluation of Physical Properties Process Engineering Purposes. H. Landeck.

Application of Group Contribution Methods for the Estimation of Pure Component and Mixture Properties. J. Gmehling.

Computer Analysis of Thermochemical Data of Organic Compounds. J. B. Pedley.

Prediction of Physicochemical Properties Using a Semiempirical Group Contribution Approach. H. Rytting.

Estimation of Aqueous Solubility. S. Yalkowsky.

Recommended gE-Model Parameters by Simultaneous Fitting of Different Excess Properties. J. Rarey.

Aqueous Solubility Database of Non-electrolytes. R. Dannenfelser.

Correlation and Extrapolation in Chemical Engineering of Vapour Pressure Data Using Thermal Data. F. Mascarello.

Establishing Consistent Thermodynamic Data on Vaporization Equilibria for Organic Compounds. V. Majer.

A Project of Critical Compilation of Heat Capacities of Liquids. V. Ruzicka.

Characterization of the Atomization Behaviour in Electrothermal Atomic Absorption Spectrometry by Physical Data. W. Wegscheider.

参加者 約80名 (11ヶ国)
フルペーパーは Springer-Verlage 社から出版の予定

以上

文 献 紹 介

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

JANUARY 1988 Vol. 65, No.1

Computer Series, 89: Bits and Pieces, 36

edited by John W. Moore

The Microcomputer as a Teaching Tool for Molecular Orbital Theory, *Susan M. Colwell and Nicholas C. Handy*, p.21

Orbital Plots of the Hydrogen Atom, *Michael Liebl*, p.23

Visualizing Boltzmann--Like Distributions, *Fred M. Hornack*, p.24

Establishing a Computerized Database for Laboratory Chemicals, *Anthony L. Felio*, p.25

SPEC20: A Highly Interactive Simulation of a Manual Spectrophotometer, *Ralph W. Gable*, p.26

MARCH 1988 Vol. 65, No.3

Computer Series, 90:

Statistical Analysis of Alternative Models, *Estel D. Sparague and C. E. Larrabee, Jr.*, p.238

APRIL 1988 Vol.65, No.4

Computer Series, 91: Bits and Pieces, 37

edited by John W. Moore

Computer Assisted Scheduling of Teaching Assistants, *James P. Birk*, p.341

Microcomputer-Generated Interactive Repeatable General Chemistry Examinations, *Bernhard Binder and Timothy M. Maffet*, p.342

Computerized Checking Data in Undergraduate Laboratories, *D. A. Aikens, R. A. Bailey, and R. L. Strong*, p.343

A Student-Generated Database for the Physical Chemistry Laboratory, *J. A. Wood*, p.343

A Microcomputer-Based Temperature Probe, *Chia-yu Li and Qun-meng Zhuang*, p.344

Microcomputer-Controlled Automated Sampler, *Shahrokh Ghaffari*, p.344

A Simple Electronic Interface for Wireless Chemical Data Communications, *Lee Hin-Fat, Hin-Cheung Lee, Kuen Cheong Au-Yeung, and Hon-Tsang Chan*, p.344

The Group-of-Tree Phenomenon: Does It Work With Computers?, *Geoff Rayner-Chanham*, p.345

COMPUTERS & CHEMISTRY

- 1988年 第12卷第3号 論文題目、著者、頁
Voronoi polyhedra as structure probes in large molecular systems--VII. Channel identification, *Carl W. David*, p.207
- Automatic analytical differentiation for nonlinear least-squares calculations, *Iwao Fujita*, p.209
- Development of a low-cost interface for coupling a microcomputer with a fluorescence spectrophotometer. Computer-assisted fluorimetry, *A. Munoz de la Pena, J. A. Murillo, J. M. Vega and F. Baringo*, p.213
- The computation of the distance matrix and the Wiener index for graphs of arbitrary complexity with weighted vertices and edges, *Peter Senn*, p.219
- Variational calculations on a correlated helium wave function using MAPLE, *Carl W. David*, p.229
- An improved SCF iteration scheme, *P. Badziag, and P. Solms*, p.233
- Intramolecular voids and intermolecular channels, *E. Wigderson and A. Y. Meyer*, p.237
- Electronic Publishing and chemical text processing--I. A survey of software for two-dimensional chemical structure editing, *A. C. Norris and A. L. Oakley*, p.245
- Electronic publishing and chemical text processing--II. Character and vector representations of chemical structures, *A. C. Norris and A. L. Oakley*, p.253
- A curve-fitting program set for handling of differential pulse polarograms, *J. M. Rodriguez Mellado, M. Blazquez and M. Dominguez*, p.257
- CONTAB--a program for connection table generation from linear input, *T. Forster, B. Atzberger and C. W. v. d. Lieth*, p.267

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

- 1988年 第6卷第1号(3月) 論文題目、著者、頁
The MIDAS database system, *T. E. Ferrin, C. C. Huang, L. E. Jarvis, and R. Langridge*, p.2
- The MIDAS display system, *T. E. Ferrin, C. C. Huang, L. E. Jarvis, and R. Langridge*, p.13
- Molecular recognition: blind-searching for regions of strong structural match on the surface of two dissimilar molecules, *P. M. Dean, P. Callow, and P.-L. Chau*, p.28
- RMS: Programs for generating raster molecular surfaces, *D. S. Goodsell*, p.41
- Shape group studies of molecular similarity: relative shapes of Van der Waals and electrostatic potential surfaces of nicotinic agonists, *G. A. Arteca, V. B. Jammal, P. G. Mezey, J. S. Yadav, M. A. Hermsmeier, and T. Gund*, p.45
- Displaying functions of three variables, *J. Bulland, and A. R. Leach*, p.54
- 1988年 第6卷第2号(6月) 論文題目、著者、頁
Looking at macromolecules: hints from the artificial intelligence of vision, *C.*

Trindle, p.67

Conformational analysis using a truth maintenance system, *T. Koschmann, J. P. Snyder, P. Johnson, T. Grace and M. W. Evens*, p.74

Predicting metabolic pathways by logic programming, *F. Darvas*, p.80

Multidimensional explorations into chemical reactivity: the reactivity space, *J. Gasteiger, P. Rose and H. Saller*, p.87

Electrostatic potentials for surfaces of inorganic and molecular crystals, *J. D. Foot and E. A. Colbourn*, p.93

Description of molecular surface shape using Fourier descriptors, *S. E. Leicester, J. L. Finney and R. P. Bywater*, p.104

Calculating CPK images on a UNIX workstation, *L. H. Pearl*, p.109

MOL3D, a modular and interactive program for molecular modeling and conformational analysis: I- basic modules, *D. Pattou and B. Maigret*, p.112

JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN

1987年 第1卷第3号(10月) 論文題目、著者、頁

Towards an identification of the pyrethroid pharmacophore. A molecular modelling study of some pyrethroid esters, *Jette R. Byberg, Flemming S. Jorgensen and Per D. Klemmense*, p.181

A method for fast energy estimation and visualization of protein-ligand interaction, *Nobuo Tomioka, Akiko Itai, and Yoichi Itaka*, p.197

Energy minimization and molecular dynamics studies of Asn-102 elastase, *Bodgan Lesyng and Edgar F. Meyer Jr.*, p.211

Molecular dynamics simulation of cyclosporin A: The crystal structure and dynamic modelling of a structure in apolar solution based on NMR data, *J. Lautz, H. Kessler, R. Kaptein and W. F. van Gunsteren*, p.219

Designing novel nicotinic agonists by searching a database of molecular shapes, *Robert P. Sheridan and R. Venkataraghavan*, p.243

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1988年 第2卷第2号(4月) 論文題目、著者、頁

The new pictorial structural covariance method for qualitative quantum chemistry. II: Arenes with or without polyene side chains and polyene bridges, *O. Sinanoglu*, p.117

The new pictorial structural covariance method for qualitative quantum chemistry. III. Fused polycyclics and their ions, *O. Sinanoglu*, p.137

Linear notation for benzenoid aromatic hydrocarbons. Molecular similarity based on notation similarity, *W. C. Herndon and A. J. Bruce*, p.155

The role of the reference state in nonlinear kinetic models: Network thermodynamics leads to a linear and reciprocal coordinate system far from equilibrium, *D. C. Mikulecky and F. Sauer*, p.171

- Ab-Initio* Vibrational Transition Dipole Moments and Intensities of
Formaldehyde
H. C. Hsieh and W. C. Ermler , p. 95
- The Dynamic "Level Shift" Method for Improving the Convergence of the
SCF Procedure
A. V. Mitin , p. 107
- A Molecular Mechanics Study of Neutral Molecule Complexation with Crown
Ethers
J. R. Damewood, Jr., W. P. Anderson and J. J. Urban , p. 111
- Intermediate Water Structures in Solution of N^α-Acetyl-N-
methylphenylalaninamide
S. Kim, C. N. Yoon, and M. S. Jhon , p. 125
- A Molecular Mechanics-NMR Pseudoenergy Approach to the Solution
Conformation of Glycolipids
J. N. Scarsdale, P. Ram, J. H. Prestegard, and R. K. Yu , p. 133
- Integral Data Compression for FPS 64-Bit Processors: Improved I/O and
Reduced Storage
G. J. B. Hurst and M. Dupuis , p. 148
- Parallel Computation of the Moller-Plesset Second-Order Contribution to the
Electronic Correlation Energy
J. D. Watts and M. Dupuis , p. 158
- The Rigorous Computation of the Molecular Electric Potential
R. J. Zauhar and R. S. Morgan , p. 171

- Effect of the Substituents on the Conformational Behavior of Five-Membered
Rings: Application to the Cis- and Trans-2,5-Dimethoxytetrahydrofuran
*Ernesto Diez, Jesús Palma, Jesús San-Fabián, Joaquim Guilleme, Angel L.
Esteban, and Maria P. Galache* , p. 189
- On Velocity Scaling in Molecular Dynamics Simulations
Kersti Hermansson, George C. Lie, and Enrico Clementi , p. 200
- Computer Generation of Characteristic Polynomials of Edge-Weighted
Graphs, Heterographs, and Directed Graphs
K. Balasubramanian , 204
- A Theoretical Study of the Rotational Isomers of Nitrosomethanol by
Semiempirical (AM1) and *Ab initio* Methods
Derek Higgins and Colin Thompson , p. 212
- Application of Finite-Element Method to the Two-Dimensional Schrödinger
Equation
Nobuyuki Sato and Suehiro Iwata , p. 222

A Novel Approach to the use of Graph Theory in Structure-Activity Relationship Studies. Application to the Qualitative Evaluation of Mutagenicity in a Series of Nonfused Ring Aromatic Compounds
Gilles Klopman and Chandan Raychaudhury, p. 232

Charge Calculations in Molecular Mechanics. V. Silicon Compounds and π Bonding
Raymond J. Abraham and Guy H. Grant, p. 244

An Efficient Algorithm for Solving Eigenvalue Problems of the Type $HC = SCe$ or $FC = SCe$
M. Masamura, p. 257

YETT: An Interactive Molecular Mechanics Program for Small-Molecule Protein Complexes
Angelo Vedani, p. 269

Volume 9 Number 4 June 1988

The Stepwise Heats of Hydrogenation of Barrelene, an *Ab Initio* Study
L. R. Schmitz, N. L. Allinger, and K. M. Flurchick, p. 281

Charge Calculations in Molecular Mechanics IV: A General Method for Conjugated Systems
R. J. Abraham and P. E. Smith, p. 288

One-Center Expansion for Pseudopotential Matrix Elements
M. Pelissier, N. Komih, and J. P. Daudey, p. 298

Combinatorial Models and Algorithms in Chemistry. Search for Isomorphisms and Automorphisms of Molecular Graphs
M. I. Stankevitch, S. S. Tratch, and N. S. Zefirov, p. 303

Conformational Preferences in Alkylbenzenes and Aryl-alkylamines: A Comparative Study Using CAMSEQ, MM2 and Molecular Dynamics Methods
G. L. Grunewald, M. W. Creese, and H. J. R. Weintraub, p. 315

Calculating the Electrostatic Potential of Molecules in Solution: Method and Error Assessment
M. K. Gilson, K. A. Sharp, and B. H. Honig, p. 327

Quantum Mechanics of Pseudoration in Ring Systems: An Application of the MuMATH Symbolic Algebra System
C. Trindle, p. 336

The Multiple Minimum Problem in Molecular Modeling. Tree Searching Internal Coordinate Conformational Space
M. Lipton and W. Clark Still, p. 343

Construction of the Best Set of Four Orthonormal $2s-2p$ Hybrid Orbitals by Least-Squares Methods
T. Laube, p. 356

Characteristics of the Watson-Crick Type Hydrogen-Bonded DNA Base Pairs: An *Ab Initio* Molecular Orbital Study
M. Aida, p. 362

AM1 Calculations of Rotation around Essential Single Bonds and Preferred Conformations in Conjugated Molecules
W. M. F. Fabian, p. 369

Automatic Classification of Chemical Structure Databases Using a Highly Parallel Array Processor
E. M. Rasmussen, G. M. Downs, and P. Willet, p. 378

Numerical Sensitivity of Trajectories across Conformational Energy
Hypersurfaces from Geometry Optimized Molecular Orbital Calculations:
AM1, MNDO, and MINDO/3
D. B. Boyd, D. W. Smith, J. J. P. Stewart, and E. Wimmer, p. 387

A Method for Calculating Atomic Charges in Large Molecules
J. Mulay, p. 399

Computer Generation of Spectra of Graphs: Applications to C_{50} Clusters and
Other Systems
K. Balasubramanian and X. Liu, p. 406

Modified MINDO/3 ^{13}C Chemical Shift Calculations for Simple
Hydrocarbons
D. B. Chesnut and C. Zhang, p. 416

Electrostatic Interactions in Molecular Mechanics (MM2) Calculations via
PEOE Partial Charges I. Haloalkanes
L. G. Hammarström, T. Liljefors, and J. Gasteiger, p. 424

Volume 9 Number 5 July/August 1988

Ab Initio Vibrational Analysis of Three Rotamers of 2-Propen-1-Imine,
 $H_2C=CH-HC=N-H$, and Methanimine $H_2C=N-H$
Yurii N. Panchenko, Sergei V. Krasnoshchiokov, and Charles W. Bock, p. 443

Fast Algorithm for Ring Perception
Luděk Matyska, p. 455

Rotation around the C1-C2 Bond of Propylamine, an *Ab Initio* Study
Lawrence R. Schmitz, Norman L. Allinger, and Salvatore Profeta, Jr., p. 460

An Algorithm for the Location of Branching Points on Reaction Paths
J. Baker and P. M. W. Gill, p. 465

Efficient Calculation of Electrically Based Intermolecular Potentials of
Weakly Bonded Clusters
Clifford R. Dykstra, p. 476

Barriers to Rotation Adjacent to Double Bonds. 4. Effect of Basis Set on
Structures, and of Electron Correlation on Relative Energies
Kenneth B. Wiberg and Mark A. Murcko, p. 488

Basis Set Effects and the Choice of Reference Geometry in *Ab Initio*
Calculations of Vibrational Spectra
D. Michalska, L. J. Schaad, P. Čársky, B. Andes Hess, Jr., and C. S. Ewig, p. 495

General Algorithm for Calculating Vibrational-Librational States of a Rigid
Molecule in an External Potential. Application to Benzene-Water
Complexes
Per Linse, p. 505

Ab Initio Pseudopotential Study of the Fluxional Behavior in
Tetrahydroborate Complexes. Many-Body Contributions to the Energy
Barriers of $NaBH_4$, AlH_2BH_4 , and GaH_2BH_4
Vincenzo Barone, Camilla Minichino, Francesco Lelj, and Nina Russo, p. 518

Determination of the Major Solution Conformation of Tyrocidine A, using
Molecular Mechanics Energy Minimization and NMR-Derived Distance
and Torsion Angle Constraints
*Alan P. Tonge, Peter Murray-Rust, William A. Gibbons, and Lesley K.
McLachlan*, p. 522

- Electron Donor-Acceptor Complexes: Evaluation of MNDO as a
Computational Tool to Probe Intermolecular Interactions
William A. Glauser, Douglas J. Raber, and Brian Stevens, p. 539
- Shape Characterization of Some Molecular Model Surfaces
Gustavo A. Arteca and Paul G. Mezey, p. 554
- MC-SCF and CI Calculations on Four Isomers of Si₆H₆
Alexander F. Sax, Josef Kalcher, and Rudolf Janoschek, p. 564
- On the Second-Order Terms of Perturbation Theory
P. Froelich and F. T. Chan, p. 578
- Surface Model for ZnS Thin Films: ZnS Clusters and Chemisorption of
ZnCl₂ on ZnS Surface
Marina Lindblad and Tapani A. Pakkanen, p. 581

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

- 1988年 第28卷第2号(3月) 发表题目、著者、页
Cooperative Intelligence Ecosystems: A Proposed Design, *Charles L. Bernier*, p.41
- Supply of Information on Chemical Reactions. An Advanced, Topology-Based Method, *R. Fugmann, G. Ploss, and J. H. Winter*, p.47
- Data Access Subroutine Package for Spectrometric Data Bases, *Cheng Qian and Charles L. Wilkins*, p.53
- Search for Useful Graph Theoretical Invariants of Molecular Structure, *Milan Randic, Peter J. Hansen, and Peter C. Jurs*, p.60
- End-User Searching of CAS ONLINE. Results of a Cooperative Experiment between Imperial Chemical Industries and Chemical Abstracts Service, *Wendy A. Warr and Angela R. Haygarth Jackson*, p.68
- Method for Clustering Proteins by Use of All Possible Pairs of Amino Acids as Structural Descriptors, *Shin-ichi Nakayama, Satoko Shigezumi, and Masayuki Yoshida*, p.72
- A New Algorithm for Selection of Synthetically Important Rings. The Essential Set of Essential Rings for Organic Structures, *Shinsaku Fujita*, p.78
- Knowledge Representation Using an Augmented Planning Network: Application to an Expert system for Planning HPLC Separations, *A. L. Ananda, S. M. Foo, and Hari Gunasingham*, p.82
- Structure Generation by Reduction: A New Strategy for Computer-Assisted Structure Elucidation, *Bladley D. Christie and Morton E. Munk*, p.87
- The Free Flow of Information: A Utopia? Ways To Improve Scientific and Technological Information and Its International Exchange, *Reiner Luckenbach*, p.94
- Chemical Inference. 3. Formalization of the Language of Relation Chemistry: Ontology and Algebra, *John E. Gordon*, p.100

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
 Chemical Information and Computer Sciences
 The Chemical Society of Japan

人工知能 特集号 I

日本化学会
 情報化学部会

Volume 6, Number 5
 September 1988

目 次

特集：人工知能

人工知能特集にあたって.....	宮原 显 中	1
企業における AI の現状.....		2
用語解説.....		25
アンケート.....		26
ニュースから		
AI 特集誌リスト.....		31
AI 関連新聞記事.....		31
バイオ(ニューロ)コンピュータ関連新聞記事.....		34
コンピュータケミストリーシステム関連新聞記事.....		35
データベース関連新聞記事.....		36

部 会 行 事

第11回情報化学討論会プログラム.....		37
第1回情報化学夏期セミナー(情報化学入門)を終えて.....	高橋 由 雅 船津 公 人	42

関 連 行 事

第16回構造活性相関シンポジウムプログラム.....		44
第3回化学PCソフトウェア研究討論会プログラム.....		48

学 会 報 告

Gordon Research Conferenceに参加して.....	朝 永 惇	51
--------------------------------------	-------	----

文 献 紹 介

Tetrahedron Computer Methodology(Vol.1, No.1).....		52
Quantitative Structure-Activity Relationships(Vol.7, No.2).....		52
Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol.1, No.4 ~ Vol.2, No.1).....		53

特集 人工知能

人工知能特集にあたって

宮原景中 (三井東圧化学機)

人工知能についてはすでに本誌でも

人工知能エキスパートシステム 特集号 Newsletter Vol.4 No.4 (July 1986)

で特集したが、この時はまだ人工知能にこう希望する的な、あるいは将来こうあってほしいという内容のものであった。その後も昨年は

CICSJ Bulletin Vol.5 No.4 (July 1987)

で人工知能関連の情報を掲載して来た。そして、本年日本化学会で

特集：人工知能と化学 化学と工業 Vol.41 No.5 (1988)

が特集された。本CICSJ Bulletinでの特集の企画は今年初め企画していたので、「化学と工業」との重複が可成り気になったが、どうやらその狙いが違う所にあるらしいことが判り予定通り本号を組む運びとなった。

新聞によると昨今はエキスパートシステムは実用期に突入したとして毎日といってよい程の記事が出ている。そのうち化学に関連あるものは本号に掲載したが、それらのうちからはほとんど全部の60社を選びユーザー事例を紹介してもらったとの目論見が本企画のスタートであった。ユーザー事例としては新聞の他雑誌、学会誌、各種ショー、パンフレット、その他からも会社を探しお願いした。記事等はあるが、紹介はできないという会社にはアンケート回答してもらうことにし、それも会社記名無記名共許し、できる文情報を収集するよう努めたつもりである。

人工知能特集号としてより内容の充実したものにするために、最近新しく開発されたツール、改良されたツールなど続々と開発紹介されているものについて紹介してもらい、使用例をも併せて特集とした。ツールはメインフレーム用、ミニコン、ワークステーション用、マイコン用と区分けするのが適当であろうと考え、それらのツールメーカーに掲載の依頼をした。

その他法人会員会社にもお願いすることはしたが、これらの会社は必ずしも人工知能にとり組んでいる会社とは言えず満足すべき回答では無かった。しかし、可成りなご協力が得られたものと思う。

依頼にあたって多くの会社にご協力頂いたため大変充実した内容の特集になったものと自画自賛している。このため、本号のみでは特集を終えられず次号と2号にわたることとし、本号ではユーザー事例中心とし、アンケート、新聞情報等を、また次号ではツールの紹介を中心とするよう編集した。嬉しい悲鳴を上げることになった結果、査読の段階から石田嘉明、石塚英弘両編集委員にもお手伝いをお願いし、両委員のご努力で立派な編集が出来たと思う。

特集には読者の便宜をはかるため用語解説を付け加えたが、これは石田委員の提案である。なお、新聞情報等の新規性はうすれたものと思い本号(本年)をもって終わりとしたい。

本号と次号のご活用を願って止まない。

「企業における A I の現状」

目 次

アイ・シー・アイ・ジャパン	濱 昭夫	3
旭硝子	日野水 孝	3
旭化成情報システム	天達 洋文	4
出光興産	加勢田 茂	5
	石田 和文	
出光石油化学	花熊 克友	6
大阪ガス	平山 輝	7
大阪石油化学	宮本 和男	7
花王	関根 史磨	8
化学技術研究所	藤原 一郎	9
新日本製鉄	斉藤 豊一	10
住友化学工業	森 章	11
	矢島 徹	
住友金属工業	酒井 俊彦	12
積水化学工業	川合 修平	13
秩父セメント	斉藤 巧	13
中部電力	松村 司郎	14
東洋エンジニアリング	金納 文治	15
東亜合成化学工業	田中 明志	16
日本鋼管	幸田 和郎	17
日本ゼオン	脇 一郎	18
日本分光工業	大久保優晴	19
三井石油化学	松村 春生	20
三井東圧化学	小口 梧郎	20
三菱化成	山路 泰	21
三菱重工エンジニアリングセンター	船越 亮平	22
千代田化工建設	仁井田和雄	23

アイ・シー・アイにおけるAIへの取り組み方について紹介する。私企業としては、比較的短期間に成果が期待できるエキスパート・システムに関心が集中するのは仕方のないことで、AIとはいっても殆ど全てがエキスパート・システムに拘わるものである。アイ・シー・アイでも1980年代初めにエキスパート・システムに対する関心が高まり、エディンバラ大学等との交流が盛んに行なわれた。1984年秋に至り、ソフトウェア・ハウスのISIS Systems Ltdとの共同出資でIntelligent Systems International (ISI) Ltdを設立した。ISIの最初の製品がSAVOIRであり、以降アイ・シー・アイ内部で数多くの実用的エキスパート・システム開発に利用されている。例えば、冬小麦の病害予防や診断に用いられるWheat Counsellorは、SAVOIRを使って6カ月で開発され、Videotexを通じて各所の農家に直接提供され好評を博した。

エキスパート・システムの開発目的として最も多いのは生産性向上である。続いてプロセス制御及び品質管理、顧客サービス、希少専門知識の確保、整理等が目立つ。また完成度から見れば試験段階のプロトタイプ、実用化を目指して実証中のもの、そして対象者を絞って実用に供しているものの3グループにはほぼ等分される。その他、社外リソースを使って基礎研究中のものもある。また実証試験の結果、期待された性能を発揮できずに消滅したのも少なからずある。実際に作られた、或は使用中のエキスパート・システムの総数は100前後になると思われるが詳細な数は不明である。

ハードウェアとしてはパソコン及びVAXが殆どであるが、中にはホスト・コンピューターに搭載されているものもある。言語としては一般にSAVOIR等エキスパート・システム構築用ツールを使っているが、これは主に試作効率を高めるためであり、推論速度の面から直接PASCALやFORTRANに書き直すこともある。

アイ・シー・アイとしては、今後こうして浮かび上ってきた有力なエキスパート・システムの中から、日本市場の特性に合ったものを選別し、販売したいと考えている。

エキスパートシステム開発の現状

旭硝子(株)中央研究所 日野水 孝

当社では、約2年程前より人工知能の一分野であるエキスパートシステムの開発に取り組んで来ている。取り組んでいるテーマは、生産計画・プロセス異常診断および既存システムの利用ガイダンスシステムなどであり、専門家の支援による業務の効率化ないし、ノウハウの共有化による業務のレベルアップをねらいとしている。

取り組み初期は、ツールの調査・テーマの選択を重点に行ない、約1年前よりプロトタイプシステムの開発に着手している。ツールについては、2~3種類をテスト使用し、EUREKA-II(日立社製)を導入している。

現在、生産計画・プロセス異常診断の2システムについてプロトタイプシステムの開発を終え、オンフィールドのテストを行っているが、それぞれ実用化迄には6カ月~1年程度のルールのチューンナップ期間が必要であると感じている。

当社では、業務の専門家と研究部門および既存システム開発者の3者体制で開発を行っているが、これは既存システムとの結合を強く意識してのことである。

研究部門と既存システム開発者がKEとしての役割を担当し、システムの設計・既存システムとのインターフェイス設計を行ない、3者でツールの学習およびコーディングを行った。業務の専門家をコーディングに加えたのは、将来のシステムの改良・保守の担当のためである。

今後は、上記2システムのチューンナップを継続すると共に、分析支援・材料設計支援など新しい分野のシステムを開発していきたいと考えている。

また、さらに、開発を通じて感じた現状市販ツールの不備と思われるユーザーインターフェイス（特にグラフィック）開発支援機能および知識獲得支援機能についても、ユーザーの立場から研究をしていきたいと考えている。

旭化成情報システム(株) 天達 洋文

旭化成情報システム(株)(AJS)は、1987年4月、旭化成工業(株)のシステム部門を母体に設立されたソフトウェア会社である。AJSは現在、主に旭化成グループ各社のシステム開発を担当しており、AIについても同様である。

AJSがAIに取り組み始めたのは1984年からであるが、本格的には、85年からと言ってよい。現在、旭化成グループの各社と協力しながら、

- (1) エキスパートシステムの開発
 - ・工場生産計画・故障診断 など
- (2) エキスパートシステムの普及活動
- (3) AI技術の研究
 - ・エキスパートシステムのC言語への移植
 - ・ドメインシェルの開発プロジェクトへの参加
 - ・海外の技術研究および提携

などに取り組んでいる。変わったところでは、

- (4) 高圧ガス施設のコンサルティングシステム

を、神奈川県高圧ガス協会のご指導で開発し、販売する予定である。

専任のKEは数名だが、十数名がトレーニングを受けている。旭化成グループ全体での数はわからない。シェルとしては、富士通(株)のESHELLが多いが、日本電気(株)のEXCORE、DEC社のOPS5なども使われている。

実用システムは作れるが、実用化の段階にあるとはいえない。1990年には実用として気楽に開発できると思われる。

問題点は、開発に人員がかかり過ぎることである。満足の行くシステムになるには1年以上専任者を張り付けておく必要がある。このため、もう少し開発のし易いツール(SHELL)を海外より直接導入することも検討している。開発が容易になった場合、KEの数を急速に増加する予定である。

KEの育成は主に、AJSの企画部を中心に行っており、社内および社外の講習会を利用しているが、やはり自社開発のシステムでOJTで育成する機会が多い。また、海外の著名な研究所や学会には、できるだけ出掛けたり、派遣したりして質の向上に努めている。

今後の課題は、CIM・LAとの連携だが、相当に難しいと思われる。

1. はじめに

出光興産(株)に於けるエキスパートシステムの開発事例を紹介する。事例-1は熟練オペレータの知識を蓄積し活用するオンラインでの運転異常診断システム、事例-2ではプラントの制約条件の中での日毎のタンク運用計画を立案するスケジューラの以上2件について述べる。

2. 事例-1

愛知製油所の重油流動接触分解装置を対象に、次のような機能を持つ、運転支援システムである。

- ① 分散計装システムとの通信
- ② 異常監視・診断(浅い知識と深い知識により、異常原因の推定、進展予測、対処ガイドの提供)
- ③ モデル計算(深い知識)
- ④ 音声告知、画面情報提供、ファンクションキーによる画面切替
- ⑤ 知識構築・メンテナンスサポート

評価として

本システムは、昭和62年4月より稼働を開始し、現在約1年経過し、次のように評価している。

- ① 運転支援システムは、人間より異常検知能力は高い。
- ② "深い知識"の活用は適確な診断上必要である。
- ③ 音声告知は、優れたマンマシンインターフェースである。
- ④ ドメインシェルであり、使い易いシステムである。

効果は、

多量の情報を短時間に、しかも"浅い知識"と"深い知識"を活用して処理することにより安定した運転・生産の実現に寄与している。

3. 事例-2

千葉製油所でのLPGタンクの運用計画を立てるシステムを開発した。このシステムは輸入品や装置で生産されるLPGをどのタンクに受け入れるか、ローリや船への出荷をどのタンクから払い出すかといったことを在庫量、生産状況、入出荷状況から判断して計画を立てるものである。

評価として

本システムは昭和63年4月よりフィールドテストを重ね現在に至っているが、次のように評価している。

- ① 現在フィールドテストを終了し、ほぼ専門家に代わる業務のスケジュール化が可能であり、実運用のメドは立ったと判断する。

S.63.7 プロパン系実運用開始

S.63.8 ブタン系実運用開始予定(LPG系システムとして統合)

- ② 2週間分の計画立案業務を行う場合、担当者では1時間程度かかるが、今回のシステムでは5分程度で与えた知識通り正確に計画が立案される。

効果は、

計画立案業務の高速化とスケジュールの質的向上が図れ、又、副次的には業務ノウハウの整備と資産化が可能となった。

(1) AI導入の現状

当社におけるエキスパートシステム関係では、生産・管理部門における導入が最も多く、化学プラントの異常診断システム、生産計画システムなどで5件となっている。次に、設備保全、設計部門における回転機の故障診断、プロセスガスクロマトグラフの故障診断システムなど3件と流量計器選定支援システムの1件となっている。

その他としては、営業・販売部門での支援システムやプロセス制御ならびにプラントの自動起動・停止システムなどに応用すべく検討している。

(2) AIの適用の内容

化学プラントの異常診断システムに関しては、業界で最も早くから開発に着手し、現在稼働しているオンライン・リアルタイムシステムも含め4件ある。これらは、エチレン、芳香族装置などの蒸留塔群、シクロヘキサン装置、受配電設備を対象にした異常診断システムである。これらのシステムは、プラント内で起こる計器、設備機器類などの故障の原因をプラントで発生した異常現象を入力することにより、異常原因との因果関係から確信度というファクターを用いて原因を探し出す。構築ツールは、全て「BRAINS」を使用し、FACOM M380SのTSSにて運用されている〔参考文献：オートメーション、30、(19)、50(1985)／計装：29、(7)、51(1986)／出光石油技術、30、(6)、65(1987)〕。また、これらの蓄積をベースに最近、蒸留塔を対象としたオンライン・リアルタイム異常診断システムを開発し、現在稼働している。このシステムは、汎用の構築ツールを使わずに分散形制御システムの専用ソフトを使い実現させた〔参考文献：出光石油技術、31、(4)、65(1988)〕。

一方、プラントの生産計画分野では、非連続プロセスを対象に、月間の出荷計画、月初在庫などを与件として、装置、および貯蔵設備上の各種の制約条件を考慮しながら生産スケジュールを立案するための支援システムを開発し運用している。構築ツールは、「ESHELL」を使用し、FACOM M380SのTSSにて運用している。まだこのシステムは、プロトタイプであるため、今後運用におけるノウハウを蓄積しながら実用タイプにしてゆかねばならない〔参考文献：出光石油技術、31、(3)、16(1988)〕。

また、工場から出荷される製品の出荷検査時の合否判定（製品規格、納入規格、仕分け基準など）を自動化した製品判定システムが運用されだした。このシステムは、汎用の構築ツールは使わず、知識がかなり標準化出来ていたためFORTRANにて作成した〔参考文献：出光石油技術：31、(2)、71(1988)〕。

その他では、ポンプなどの回転機械の故障診断とプロセスガスクロマトグラフの故障診断システムのテスト運用もしている。構築ツールは、[COMEX]を使用し、PC9801上で稼働できる。また計装設計業務の応用として、流量計選定支援システムのテスト運用も始まった〔参考文献：出光石油技術、31、(1)、36(1988)〕。

大阪ガス(株)では、昭和59年より各種のAIシステムの開発を開始し、現在では開発済み及び開発中のものを含めて約20以上のシステムがある。化学関連では、化学分析の計画のためのエキスパートシステム、ES-EPA (Expert System for Environmental Pollutant Analysis)がある。ES-EPAは、サンプルの種類、状態、分析項目などのインプット情報から、適切な分析法、前処理法、サンプル採取法などを含む複雑なテスト計画を、自動的に作成することが出来る。またテスト結果から、機器の測定限界、分析項目の法規制値などと照合して、再テストを指示することもできる。これにより、これまでこの分野の専門家しか出来なかったテスト計画を、非専門家でも行なうことができるようにしたものである。

このシステムは、元素や化合物などの分析項目の知識、JISに規定されている試験方法などの知識、発光分光分析計やイオンクロマトグラフィーなどの分析機器の知識、分析に必要な前処理の知識等の知識を知識ベースとして持っている。知識表現、および推論方法として、プロダクションルールやフレームなどのほかに、オブジェクト指向型プログラムを多用した。また、複雑なテスト計画の生成を、正確に、また効率良く行なうために、複雑な計画を、抽象的な計画から、より具体的な計画へと、段階的に拡大していく推論方法を開発した。

現在のシステムは、リスバマシンおよびKEEの上に実現しているが、今後、知識ベースの拡大と共に、デリバリー環境に移植して、63年の秋頃から実際に使用する予定である。また、今回開発した計画のための推論機構は、他の計画業務にも適用できる、汎用性の高いもので、計画型のエキスパートシステム開発用のツールとして独立させることも検討している。

大阪石油化学(株) 泉北工業所
生産課主務 宮本和男

当社のプラント管理は、プロセスコンピューターやDCSによる分散制御という形で、信頼性、制御精度の向上を計って、安定操業を維持している。

然しながら非定常作業(運転変動、トラブル等)の対処は、その大半が運転者の経験による判断に依存しているのが現状であり、しかも運転者は合理化と世代交替によるベテランの減少と共に、トラブルに対する経験が不足して来ているため、異状時の判断能力は低下傾向にある。こうした傾向は、運転者のみならず、メンテナンス担当者にも共通のことと考えられる。

こうした状況の中で今後のプラント管理に対しては更に、運転、保守に関するノウハウの反映及びデータの蓄積、解析による適切な運転状態の確保と予防、予知保全対策の確立が重要な課題となってくる。

これらの問題を解決する一手段として、AI技術を利用した運転異状診断、保守診断及び履歴データ管理システムを東洋エンジニアリング(株)殿と共同で開発した。

対象とした設備は、保守作業が集中していること、運転中のアラーム発生やトラブル頻度が高いこと等からプラントのメインユニットである熱分解炉とした。

開発に当たって、ツールとしてはESHELL及びオンラインを指向したESHELL/SB（共に富士通）、言語はLISP, C, BASIC等各機能毎に使い分けている。

ハードウェアは初期の段階においては、大型計算機を利用し、適用機種としてA-70及びFMR-60（共に富士通）を組み合せ使用した。一方、システムとしての実用性を考えた場合、診断の正確さは当然のことながら、診断速度、診断内容等運転者への情報伝達をどの様に行うかが重要なポイントとなってくる。このため本システムでは2つの画面を使用して、一方で診断結果と対処指示を表示し、同時に別の画面にグラフィック表示することによって視覚で感知できる様にしている。更に異常を検知してから結果を表示するまで30秒以内で診断が完了する様にも考慮している。

本年4月から実用化に向けて本システムを現場に設置し、プラントデータの収集を行ないながら、しきい値の調整及び診断ルールの見直し等システムのチューニングを行なっている。

今後の方針としては、DCSと一体化したシステムの構築は勿論であるが更に、全炉（16炉）に適用したいと考えている。

花王㈱での知識システム開発

花王㈱ 知識情報科学研究所
関根史磨

1. 花王㈱では、情報（ソフトウェア）の研究部門として位置づけられる知識情報科学研究所を有している。人工知能応用システムの研究開発は、知識工学研究室を中心に全研究室で取り組んでいる。人工知能応用システムの中でも、知識システム（エキスパート・システム）の開発は主要な研究課題のひとつであり、知識工学研究室では現在10名程の知識システム技術者がいる。応用分野としては、研究部門からマーケティング部門まで広く応用展開をめざしている。当社で開発中の知識システムの例を表1に示した。

表1. 開発中の知識システム

応用分野	知識システム	システムのタイプ	ツール/マシン	開発段階
研究	最適分子計算法選択支援	解析型	OPS5/VAX8600	プロトタイプ
	調香支援システム	合成型（設計）	—	開発中
製造	配船スケジューリング	合成型（計画）	ESHELL	実用（88/4-）
	生産スケジューリング	合成型（計画）	ESHELL/G150	開発中
	プロセス故障診断	解析型（診断）	OPS5/VAX	実用
マーケティング	肌診断システム	解析型（診断）	自社開発/ PC98	フィールドテスト
	育児相談システム	解析型（診断）	BRAINS/ PC98	フィールドテスト

2. 知識システム開発の動向

当研究室で知識システムの開発を始めてから4年目になる。当初は、診断に代表される解析型システムの開発から手がけた。解析型システムは知識システムの構築技術からみると比較的容易だが、専門家の知識を整理・体系化し予め問題の解（故障診断の場合は可能性のある原因と対処法）をすべて列挙しておかねばならない。したがってプロトタイプの開発は簡単だが、実用的に役立つシステムとするには、多くの開発工数を必要とする。実用レベルに達しても、解は既知のものしか得られず、また故障診断のような場合、故障自体はそう頻繁に発生するわけでもないが、製造部門の合理化・省人化には有効である。

一方、計画・設計など人間の創造的な仕事を支援する合成型システムは、構築技術自体は解析型システムと比較すると難しいが、業務の効率化への寄与は大きい。我々は昨年より合成型問題の検討を始めたが、合成型問題の中でも現在のAI技術で比較的定式化の容易なスケジューリング問題をテーマとして取り上げ、システムの実用化をめざしている。今後のテーマとしてはこれらの合成型問題を中心に、自己学習機能をもつシステムの開発を進めたいと考えている。

3. 開発上の問題点

問題点は数多くあるが最近痛感しているのは、LISP等のプログラミング能力をもち開発ツールを使いこなせる知識技術者の数がシステム化のニーズに比べて少ないことと、開発において最も工数を要する専門家からの知識獲得の方法論が無いことである。

化学技術研究所 藤原 一郎

複数の化学反応を組み合わせる熱化学サイクルを構成し、これらの反応熱を利用してケミカルヒートポンプやケミカルヒートパイプなどとして熱エネルギーの改質を行うこと、あるいは一段では進行させることが困難な正味反応をよりおだやかな反応条件で起こさせ、目的とする物質の生成または分解等を行わせることはエネルギーの有効利用に大いに役立つものと考えられる。この反応サイクルは系全体の物質の流れから“クローズドサイクル”と“オープンサイクル”とに大別できるが、多数の反応群のなかから目的の機能を有する組み合わせを経験的な手法のみで能率よく見出すことは極めて困難であるといえる。このため筆者らは新しく見出した反応サイクルの探索手法[1,2]に基づいて、エキスパートシステムによる熱化学反応サイクル検索システムの開発を行っている。従来の合成法は、熱力学データのみに基づく評価基準によって反応の選定を行っているのに対し、本手法はさらに、反応に関する経験的な知見や傾向、法則などの「知識」を導入し、より確からしい熱化学サイクルを得ようとするものである。

このシステムは大きく分けて、既知反応（反応が進行することが既に知られているもの）を収納した反応データベース、およびこれを参照し、かつ「知識」により探索を進める検索プログラムの二つの部分から構成される。この「知識」（あるいはルール）は、いかに表現するかの問題はあるが、プログラムの構造的には容易に追加でき、漠然とした知識表現も許されるなど推論機能を徐々に強力にしていけることができる。その結果、データベースに無い反応を含んだ新規な反応サイクルをも見出すことが可能である。詳細は文献[3～5]に譲る。なお、エキスパートシステム構築支援ツールには富士通製「ESHELL」を用い、計算が必要な部分は FORTRAN で作成している。プログラムの実行は工技院共同利用大型電算機（RIPS）の TSS またはバッチ処理にて行える。

現在は無機化学反応を中心として、所定の反応式や温度条件等を満足するケミカルヒートポンプサイクルの探索を行っているが、さらにデータベースや知識ベースの拡充を図ることにより、より汎用性を備えた探索システムとするための開発を進めている。

- [1] 樽田；日本化学会第50春季年会，特1401(1985)
- [2] 藤原ほか；化学工学シンポジウムシリーズ，8，85(1985)
- [3] 藤原ほか；化学工学協会第19回秋季大会，S0-201(1985)
- [4] I. Fujiwara et al.; Proc. World Congress III of Chem. Eng., Tokyo, 6f-352(1986)
- [5] 藤原ほか；第10回情報化学討論会，6I03(1987)

新日本製鉄㈱ 齊藤 豊一

企業活動の情報システム化の更なる進展を支える一つの新技术であるとの期待感から A J（現状ではエキスパートシステム）の導入を以下のように取り組んでいる。

1. 導入分野・・・次ぎの各分野を対象として進めている。
 - 工程管理・品質管理
 - エンジニアリング支援
 - プロセス制御・設備診断支援
2. 導入の目的と狙い
システム化が進んでいる中で依然として人手介入に頼っているヒューリスティックな判断・決定のロジックを計算機化することによって自動化とシステム性能の向上を目的とする。またシステム機能の改善は対象とするプロセス自身や操業技術の改善とともに限りなく続くとの考えのもとと簡便で効率的なシステム開発環境とメンテナンスしやすいシステム構築を狙っている。

3. 導入の具体例

前述の考え方で種々の導入を開発・試行・実用化と進めているが、実用化又はそれに近い代表例を以下に述べる。

(1) 高炉操業支援システム

機能として日常操業・非正常操業・休風ガイド・設備トラブル時のガイド等から構成。ツールはEUREKA使用。

実データを使用した検証を経て63年度初めより実用化。現在2基の高炉で稼動中。

(2) 転炉吹煉制御システム

溶鋼の成分・温度の終点制御にヒューリスティックな知識ベースを導入。62年度オンラインフィールドテストを実施し効果確認完了。

(3) 設備診断支援システム

トラブルシュートを主機能として、電気設備・油圧機器・回転機器・特殊計器・制御機器等、各種の故障診断支援システムを開発しいずれもフィールドテスト中。

(4) 連続鑄造キャスト編成支援システム

一貫製鉄所の工程管理の要である連続鑄造の生産計画立案支援を機能とし61年度初めより実用化。ツールはHPGS。

住友化学工業㈱
技術システム部 森 章
矢島 徹

当社では、AIの適用の一貫として化学プラントの運転支援にエキスパートシステムを適用し、実用化に向けて検討を行っているので紹介する。

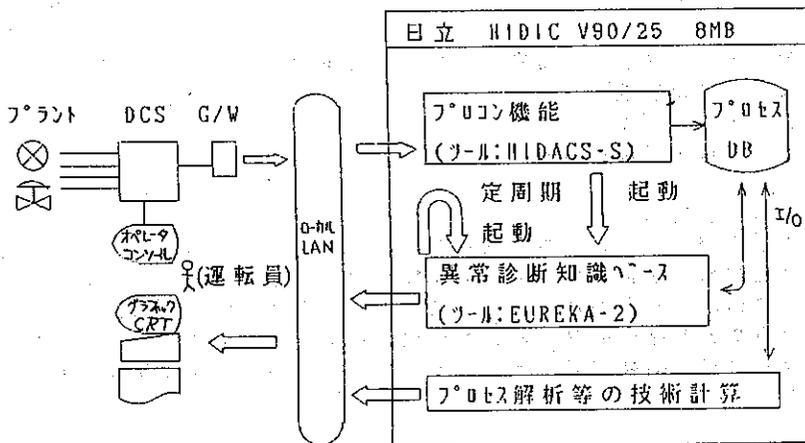
対象プラントは愛媛工場内のプラントの反応工程を当面の対象としている。この工程は時間遅れの大きいリサイクルがいくつかあり、アドバンスド制御では押さえ切れない運転の難しい系である。

運転支援として必要な機能は次の2点を考えているが、Phase.1 がエキスパートシステムを使って実現しようとするものである。

Phase.1：異常診断機能：プラントの常時監視・異常の早期発見・進展の予測・原因の推定・運転員へのガイダンスを行う。

Phase.2：解析機能：平常時の利用として、プロセス解析・最適化計算等の技術計算を誰でも使える様にする。

システム構成は次の通り。プロコン機能と異常診断機能を連動させた所に特徴がある。



知識ベース（プロトタイプ）の概要は次の通り。

・プロセスデータ	30 Tag	・前向き推論が主	
・主な異常事象	15	・C言語での計算リカーブとリンク	
・ルール数	800	・知識の中心となるルール数	400
・フレーム数	20	・スロット数	60

63年4月末にDCSと接続しオンラインでの調整を開始した。現在は知識ベースの詳細な動作チェック中である。（しきい値のチューニング作業が主である。）今後は、対象工程全体への拡張とPhase.2へ取り組む予定である。

住友金属工業(株) 酒井 俊彦

住友金属工業では、AI技術実用化の強力なツールとして、エキスパートシステム構築ツールSMI/MARKS-IIを独自に開発し、社内で標準ツールとして活用するとともに、外部への販売を行なっている。現在、リアルタイムFA用としてインテル社32ビットマイコン上で稼動するSMI/MARKS-II・RTと、IBMメインフレーム上で稼動するSMI/MARKS-II・iの開発を完了しており、他の計算機システムへの移植も計画している。

生産現場においては、プロセス制御をより知的にしたい、あるいは異常診断・保守を効率良くしたいなど、生産技術の多用化・多品種少量生産に適したCIMを実現したいという要望は多い。その場合、リアルタイム性を実現するための高速推論機能や、従来のプロセス制御計算機との密な結合が容易にできることが必要となる。SMI/MARKS-II・RTはこのような機能を実現したツールである。さらに、分類型とプロダクション型の2種類の推論方式の混在使用ができること、ルール・階層的フレーム・事象仮説などの豊富な知識表現形態をもっていること、従来型ソフトウェアとエキスパートシステムとを同一の計算機上でハイブリッド型として動作できることなどの特徴を有している。

このツールを用いたエキスパートシステムは、社内で次のようなプロジェクトに活用されている。

- ①搬送台車、クレーンなどによる複雑な搬送手順の管理・選定システム
- ②非定常状態での制御も可能にした加熱炉燃焼制御システム
- ③トラブル状況から原因を推定するマイコントラブルコンサルテーション
- ④油圧機器の異常状態をリアルタイムに監視する故障診断システム
- ⑤客先要求から製鋼プロセスでの最適条件を決定する製造条件最適化システム

事務・管理や計画・設計などの部門では、大型の汎用計算機が使用されているが、こうしたところでもAIエキスパートシステムのニーズが高まっている。そこで、RT版と同一の文法を用いてIBMメインフレーム上で稼動するSMI/MARKS-II・iを開発した。このツールはメインフレーム上の大量のデータベースを有効に活用する機能を備えているだけでなく、既存のオンライン端末やプログラム資産を利用することができる。またRT版とIBM版のいずれで開発したエキスパートシステムも共用できるだけでなく、メインフレームとFAとを機能分割したエキスパートシステムも作成できる。当社では、IBM3090にインストールし、本社ならびに各事業所で活用している。現在、高炉炉況管理システムの開発などのプロジェクトが進行している。

このように当社では、ユーザーの立場に立ったツール開発を行っており、使いやすくかつ従来の社内資産をうまく活用できるシステムを目指し、エキスパートシステム構築ツールを提供できることを最大の特徴としている。

積水化学工業㈱システム部 川合 修平

当社は、AI専門のソフトウェア開発販売会社「アイザック」を子会社に有し、同社が開発したAI言語「K-プロログ」やユニックスWS用のRDBやグラフィックス等のツールを利用して、現在次の3つの分野のエキスパートシステムを実用化しています。

1. プラスチック成形品の生産計画
2. 技術情報の文献検索
3. ユニット住宅「セクスイハイム」の部品展開

このうち、化学工業分野として1と2のテーマについての概要を御紹介します。

1. プラスチック成形品の生産計画エキスパートシステム

このシステムは、プラスチック成形プラントの1週間から1ヶ月の生産計画の最適スケジュールを自動作成するものである。このシステムにより今まで手作業で1日要した計画作成作業が30分程度に短縮され、更にプラントの稼働率が数%向上した。

プラスチック成形品は、500種類に及ぶ成形品の種類があり、原料の色、配合の制約、夜間勤務の負荷軽減等を勘案しなければならず、従来は専門家の手に頼っていた。

このシステムの開発に際し、プロトタイプは、K.Prologで記述し、実用版にはK.PrologをC言語に書き直して、UNIXマシン上に実現した。

プログラミングには、オブジェクト指向を採用したため、プログラムの保守性・水平展開性が向上した。また、マウスとマルチウィンドウによるスケジュール絵書きツールをあわせて開発し、PC-9801及びUNIXマシン上に実現している。

2. 技術情報の検索システム

当システムはUNIX環境下で動作するエンドユーザー向けの汎用的な検索システムである。利用者は、端末機から、ワープロ感覚でデータベースを構築し（表形式で定義）、多端末より同時に必要情報を探し出す事ができる。検索式は語と値の比較及びそれらの論理式であるが、ワイルド・カードの使用によりアイマイな記憶からの検索も可能になっている。又、検索語の入力を容易にする為、語のメニュー選択方式が採用されている。

また、いちいちメニュー画面に戻らなくても、検索できるプログラムが比較的容易に組めるのも、K-プロログを使用しているメリットといえよう。

秩父セメント株式会社
生産技術部 斎藤 巧

秩父セメントではエキスパートシステムの適用は現在、技術関連部門を中心にグループ内の情報システム企業であるシステム総合開発のサポートのもとで行われている。開発済みの代表的なアプリケーションを以下に紹介する。

1. コンクリート技術相談エキスパートシステム

コンクリートのひびわれを診断してその対策を提示する一般的な診断型エキスパートシステムとして開発され、その後橋梁、ダム、人工地盤などのマスコンクリートの熱応力によるひびわれ発生を解析し、最適設計を行なうための設計支援型エキスパートシステムに発展した。さらに現在は技術サポート部門の実務遂行上のツールとして適した知識領域と利用形態をもった「コンクリート構造物劣化診断システム」として再構築が進められている。

2. プロセス運転支援エキスパートシステム

セメント製造工程の主要な装置であるロータリーキルンの運転状態を判断し、全体のバランスを保ちながら適切な状態になるよう各部の設定変更を支援する。ここで使用されている知識ベースはプラントの特性と状態の時間的変化に対する理解に基づいた高度な運転ノウハウであり、リアルタイムの状態把握とタイムリーなガイダンスへの要求に応えるものである。

これら2例は当初の試作・評価のためのプロトタイプモデル開発を経てそれぞれに最も適したシステム環境において実用化のために再構築されている。上記のコンクリート技術相談エキスパートシステムは昭和60年5月に汎用コンピュータFACOM M-360にLISP専用プロセッサFACOM-αを接続してパソコン端末のF9450からのTSS利用を前提に富士通のESHELLを使用して開発されたが、現在はパーソナルコンピュータにシステム総合開発のエキスパート・シェルESPARONを用いた実用システムとして開発されている。またプロセス運転支援エキスパートシステムは昭和61年からIBM5550パソコン上でESPARONにより試作されたが、リアルタイムのガイダンス表示を行わせるために、生産管理用コンピュータIBM9370上のESPARON/VMに移植、再構築され本年稼働している。

開発作業は何れの場合も秩父セメントの担当技術者とシステム総合開発のKEの共同作業によって行われており、システム稼働後の知識の管理は利用者である秩父セメント側の担当者によって行われている。

中部電力(株)総合技研 松村 司郎

近年の電力需用構造の変化に伴って、火力発電所では昼間運転をし、夜間に停止するDSS (Daily Start-up and Shut-down) 運用が増加している。

頻繁な起動停止でタービン発電機が苛酷な運転条件にさらされており、運用面での信頼度向上のために、一層のきめ細かい監視と異常時の的確な意志決定が望まれている。

このため、人工知能技術を応用してタービン発電機の異常を検知し適切な対応操作、対策を推奨しオペレータを支援する「タービン発電機監視診断エキスパート・システム」(プロトタイプ)を開発した。

このシステムでは、推論部をリアルタイム診断部と詳細診断部に分けることによりリアルタイム・エキスパート・システムの開発に成功している。

リアルタイム診断部は、タービン発電機の挙動に同期して高速推論を行い異常現象の分類と操作可能なガイダンスを運転操作に対してタイミリーに提供する。

詳細診断部は、オペレータがシステムと対話をしながら異常の原因とプラントの運転、修理、保守のためのガイダンスを得る。

さらに、回転機の振動に関する理論、専門家の経験に基づくいわゆる知識ベースを利用して、プラント運転に関する学習機能を組み込むことにより、エキスパート・システムが本来備えている機能を余す所なく利用することができ、使用効率の高いシステムを開発した。

システムの開発には、手続き形言語と容易にリンクできる、知識の記述およびメッセージ等に日本語が使用できる、高速推論が可能である等の特徴を有する第2世代シェル「IREX (Integrated Expert System Building Tool)」を使用した。操作ガイダンス等、特に高速性を要する部分については直接「C言語」で記述した。

ハードウェアには、エキスパート・システムの性格から、マン・マシン・インターフェイス機能が強く、処理速度が高速である俗に言うワークステーション (WS) を採用した。

東洋エンジニアリグ(株)

専門要素技術G 金納 文治

当社は、化学工業、機械製造業、電力関係等を中心とした分野の中でAIの適用が有効又は最適と考える対象問題を取り上げ、顧客との共同開発又は単独開発を推進しています。

化学工業におけるAI適用対象としてはプラントにおける運転異常診断、機器に関する保全診断と言った診断型エキスパートシステム、溶接施工要領書作成支援、材料選定と言った設計型エキスパートシステム又、生産計画支援等の計画型エキスパートシステムが主体となっています。特に運転異常診断については、実際のプラントデータを取り込んで働くオンライン・リアルタイム型フィールドプロトタイプの開発が増加しつつあり、実用化に対するアプローチが依り一層現実的と成って来ています。又オフライン型(対話型)のエキスパートシステムにおいても、知識部の充実もさることながら操作性、メンテナンス性にも注力した仕様となって来ており、「作ってみるエキスパートシステム」から「使ってみるエキスパートシステム」、更には「有用なプログラムとしてのエキスパートシステム」へ確実に変遷している状況と考えられます。

当社で利用するAIツールについては開発目的、推論方法、実行ハード環境、現場設置環境、開発環境、開発スケジュール等を考慮した上で最適なツールを選択する事を原則としています。運転異常診断システムの例では、定常運転状態における異常発生時の原因追求を主目的としたエチレン分解炉異常診断システム（大阪石油化学㈱と共同開発）の場合「ESHELL」及び「ESHELL/SB」を採用しており、現在（1988年6月）実際のプラントにおいてオンラインにて稼働中でありフィールドテストを行っています。その他IREX、ESE、OPS83、ART、NEXPERT等のホストコンピュータからエンジニアリングワークステーション、パソコンまでの各種ハード環境上で使用される各種ツールを目的用途に応じて利用しています。

尚、AIツールに関して当社は「EX-TRAN」、及び「INTELLIGENT CODEBOX」というINTELLIGENT TERMINAL LIMITED社（英国）で開発されたエキスパートシステム構築ツールの日本における技術サポート（販売は三井物産㈱先端技術部）を担当しています。これらのツールの特徴は判断知識をテーブル書式に整理してインプットする事によりIF~THENルールに誘導してくれるルール・ジェネレーターが用意されている事です。更にフォートラン等のプログラムに変換するコード・ジェネレーターも装備されていますので対象となる問題の専門家自身がエキスパートシステムを構築できる仕様となっています。今後、この様なツールの普及に依り専門家自身による判断知識の整理が行われていく事が予想され、その結果実用プログラムとしてのエキスパートシステム構築（但し適用範囲が限定）が広がっていく様に考えられます。

東亜合成化学工業株式会社 技術部 田中明志

東亜合成化学工業は化学プラントの運転をコンピュータコントロールし、品質の安定、最適操業、省力化に効果を挙げている。しかし、制御内容が複雑化したり、トラブル体験者が減少するなど、将来、異常時に適切な処置を取れなくなる心配がある。この問題を解決し、保安の強化、最適操業、省力化を更に進めるためにコンピュータ制御に適した新しい運転支援システムの開発が必要となる。そこで当社では、オペレータが行っているオペレーションをAIの代表的分野であるエキスパートシステム（以下ESと略す）の技術でコンピュータ化し、人間のオペレーション機能の肩代わりをするシステムの開発を昭和62年から始めた。

ESを適用した工程は徳島工場の反応工程である。この工程は、トラブルとなれば工場全体に与える影響が大きく、かつ反応に寄与する要因が複雑に絡む為ESによる異常診断や異常予知を含む運転支援の効果が大きいと考えたからである。

ESのハードウェアは、東芝のEWSであるAS3000を採用した。これとプロセス制御コンピュータを通信で接続し、プラントのセンサーデータをオンラインで取り込むものである。又、ESツールは、高速処理を目指してC言語で記述されている東芝のIREXを採用した。

システムの機能は、プラントからデータをオンライン（プロトタイプではオフライン）で取り込みプラントシャットダウンにつながる可能性のある吸収塔及び反応塔の温度異常の徴候を察知し、原因を推論し、オペレータに対策の指示をするものである。推論の方法は、異常原因を見つけるのに仮説をたて推論を行う仮説推論で解を見出す方法である。

知識ベースは、センサーデータ、異常事象の内容、原因、対策などの普遍的知識と、プラント異常認知ルール、原因探索ルールなどの経験的知識に分けられ、前者を主としてフレーム型、後者を主としてプロダクションルール型で表現した。

開発の第一段階は、プロトタイプの開発であり、開発体制としては、東洋エンジニアリングと共同で、東洋エンジニアリングのKEと当社のプロセスエンジニア、システムエンジニアがチームを編成した。プロトタイプは、約60フレーム、60ルールの規模であった。

システムの検証は、あらかじめ最終異常原因が判明するような時系列データを作成しオフラインで行った。結果すべて正しい異常原因を推論した。

開発の第二段階は、オンラインエキスパートシステムの開発である。プロトタイプの完成後、当社単独で、システムを約120フレーム、120ルールに拡張し、プロセス制御用コンピュータと通信で接続し、オンラインエキスパートシステムにした。オンラインリアルタイムシステムとESを結合するソフト構築には手間と労力を要した。

現在オンラインでフィールドテストを実施している。ルールやメッセージをチューニングしながらシステムを改良し、昭和63年末に完成予定である。

日本鋼管㈱技術開発本部 幸田 和郎

NKKでは鉄鋼製造の様々なプロセスにおける合理化と製品の品質向上を目的とする社内でのAIの応用、及び重工部門商品の付加価値増を目的としたAIの応用の両面から、様々なエキスパートシステムの開発と実用化を進めている。後者の例としてはゴミ焼却炉運転支援システムなどがある。また、前者の例としては高炉の炉況監視制御システム、焼結制御システム、製鋼スケジューリングシステム、薄板余材引き当てシステムなどがあり、既に実用化が進んでいる。ここでは、高炉の炉況監視制御システムについて概略を述べる。

高炉は炉頂から鉱石とコークスを交互に装入し、炉下部から高温の湿った空気を送り込み、鉄鉱石を還元して熔融鉄を得る一種の反応装置である。高炉は炉況を表わす多くの変数があり、炉内の反応は気液固三相が複雑に干渉しあった連続プロセスであるため、数式的な取り扱い、及びそれに基づく制御理論的アプローチが困難である。したがって、高炉操業の自動化は進んではいるものの、オペレータの経験に基づく判断に委ねる部分がおおく残っている。当社では、高精度の操業管理、ヒューマンエラーの防止、高炉操業技術の標準化と伝承などを目的として高炉炉況監視制御システム「BAISYS」を開発した。

BAISYS は「スリップ」、「吹き抜け」などの異常状態の発生確率をオペレータに知らせる異常炉況診断エキスパートシステムと、出鉄温度をオンラインで制御する炉熱制御エキスパートシステムの二つのサブシステムから成る。これらのシステムでは、高炉に設置された極めて多数のセンサーからのデータ収集及びその数値処理はプロセスコンピュータ (FACOM-S3500) で行ない、それらのデータを使用し、知識ベースに基づいて行なう推論は AI 専用コンピュータ (FACOM- α) で実行する。エキスパートシステム構築支援ツールとしては Lisp 言語をベースとしたエキスパートシェル (ESHELL) を使用しており、知識はプロダクションルールとフレームで表現されている。また、一般のファジー集合の考え方に時間軸を追加して拡張したメンバーシップ関数を用い、知識に含まれるあいまいさを表現している。

異常炉況診断エキスパートシステムは昭和61年2月から、また炉熱制御エキスパートシステムは昭和62年3月からそれぞれ稼動しており、極めて良好な結果を示している。当社では、今後も様々な分野に AI を応用していきたいと考えている。

日本ゼオン㈱ 情報センター
所長 脇一郎

当社が AI (エキスパートシステムのこと) に取組み始めてから既に丸2年経過した。

従来、システム部門は定型的な事務処理を主たる守備範囲としてきた。S60年10月デミング賞を受賞した後、マーケットインの思想からユーザの変容するニーズに適確に対応出来るようシステム部門としても積極的に取組むべきと考えた。この一環とし AI を取り上げ新しいシーズとして事務の効率化・質の向上のツールとさせるべく取組みに着手した。

取組みの基本スタンスは、あくまでも「実務に役立つ AI 化」である。初年度は AI の実力を見極めるために、情報センター自らの非定型業務である「ホスト計算機の運転計画作成 ES」の開発に取組んだ。幸い当テーマがニーズの強いものであったこと、また難度・規模共に適当な業務であったことで実用化に耐えるものとして専門家からの評価を得る ES として作り込むことが出来た。この経験により AI は充分使いものになるツールであると判断し以後全社的な取組みに展開した。それには全社の AI ニーズ調査を行い、「AI 3ヵ年計画」を策定し当計画に従い展開している。

当社での AI 推進の狙いは業務生産性向上運動の中で専門家の思考判断を伴ういわゆる非定型業務の生産性向上と質の向上のためのツールとして行くことである。また取組みの位置付けは基幹業務用 EDP システムや OA システム等の従来システムを補完するものと考えて行くことである。AI 推進のやり方は情報センターが全社的な推進のための仕掛け作りを行なって来た。各工場にたいする AI 説明会の実施、推進核組織の育成、社内報での AI 啓蒙、ツール開発環境の提供、核組織への技術コンサルティング等 AI の理解者を増やすことを手始めに展開して来た。幸いこの展開は経営トップの理解もあって地道ではあるが着実に進んでいる。さらに富士通㈱の積極的な協力があり、言語は ESHELL 系を使用している。

当社でのAI化ニーズ調査結果によると、主として工場でのニーズ、期待が強い。現場からの期待効果では、専門知識の共有化、経験等のノウハウの継承、見落しの防止・精度の向上及びスキルアップ等の定性効果に期待の重点が置かれている。

現在情報センターでは、昨年から本社A事業部と共同して販売荷繰計画業務である「A製品月間生産計画作成ES」の開発に取り組んでおり、昨年12月よりフィールドテストを繰り返している。専門化の評価も上々であり、この6月より実用化に踏み切った。前述の「ホスト計算機の運転計画作成ES」は、既に1年半以上の実用に耐えている。

最後に、これらの取組み結果から言えることとして、実用化のポイントは、1) テーマとしては①ユーザニーズの強いもの②非定型業務とはいえ処理手順がある程度整理されているもの、2) アプローチとしては①専門化の開発意欲が強いこと②開発後のシステムフォローを確実にし、常に使えるシステムとしてメンテナンスできる体制が出来ていることである。

日本分光工業(株) 大久保優晴

人工知能(AI)の手法が様々の分野で適用されているが、我々は、東京理科大の下井田先生と共同で、AIによるラマン分光法における測定法の選択およびスペクトル検索の開発を行っている。ラマン分光法は未知試料の分析手法として広く用いられており、測定されるスペクトルを解析することにより物質の同定を行っているが、ラマン散乱強度は比較的弱いためレーリ-散乱や蛍光の影響が大きな障害となる。ラマン光以外の成分を出来るだけ減らし、ラマンスペクトルをS/N比良く測定し、正しく評価するためには専門的なノウハウを必要とする。AIのアプリケーションの最終的な目的はスペクトル検索であるが、最初のステップとして、基本的なサンプルのハンドリングおよび装置的な問題を含めて、ラマンスペクトルを測定するための知識を整理し、初心者が見出しラマンスペクトルを測定する時に適切なアドバイスを与えてくれるソフトを作成した。これは、サンプルの状態(固体、液体、気体)、さらに固体に関してはその形態(単結晶、粉末、ファイバー)を入力することにより、最適な付属装置および測定法を選択し、さらに測定中のトラブル(装置の操作ミス等)に対し、その対応を指示するものである。エキスパートシステム構築ツールとしてはEXSYSを用いている。

スペクトル検索については最小自乗法、あるいはピーク波数を用いて標準スペクトルとの照合を行ういわゆるライブラリ検索があるが、単一物質の同定には非常に強力な方法であるが、混合物に対しては必ずしも有効な手段ではないと考えられる。我々は最終的には混合物に対しても検索できるシステムを検討している。初めにEXSYSを用いて簡単な検索システムを作成した。本プログラムは標準スペクトル約200本を基に、知識ベースを作成し、約300程のルールを含んでいる。知識の表現としてはif...then...形式のプロダクションルールで表している。実行内容としては、ピーク位置を入力することにより、可能性のある物質をリストアップするもので、その際、含まれる元素、種類(高分子、セラミックス等)、状態(固体、液体)等の既知の情報があれば、それらを取り込むことにより、さらに候補を絞り込んでいる。

スペクトル検索のように数値データを扱う場合、EXSYSでは多少、制限があり、また、相対強度やバンド幅等、その物質のスペクトルを特徴づけるパターンを知識として取り込む等、より自由度を広げるために、現在、C言語によるプログラムの作成を行っている。さらに、次のステップとして、測定法と検索を統合したようなソフトを検討している。実際、検索により正確な結果を得るためには、スペクトルが正確に測定されることが必要であり、また、検索結果をフィードバックし、測定条件(測定領域等)および測定法を変えることにより、情報量を増やすこともできる。結果的にはより正確な検索が可能になると共に、プログラムとしてもよりAI的な色彩が強くなってくると考えられる。

樹脂プラントに於ける生産計画、及び変更という定型的な思考作業を、エキスパート・システムで行うことにより、専門家の作業時間の低減を図る。

生産計画立案の内容

- (1). 立案の期間 : 向こう1～3ヵ月
- (2). 入力 : 月単位の銘柄別生産量 (銘柄数 約十数種類)
- (3). ねらい : ①. 複数ある中間サイロの選択
②. 複数ある生産工程の選択
③. 運転のしやすさを考えた上での
トランジション格外量の低減
- (4). 出力 : 上記「ねらい」を満足した生産計画
- (5). 規模 : 開発完了時の予測数
 - ①. KS (Knowledge Sources) の数 : 約30
 - ②. ルールの数 : 約150
 - ③. UDF (ユーザ定義関数) の数 : 約70

開発環境

- (1). マシン : 富士通 M360R
- (2). ツール : 富士通 ESHELL

開発スケジュール

- (1). プロトタイプの開発 : S63年 2月 ～ 4月
- (2). 実用化へ向けての知識の獲得 : 5月 ～ 9月
- (3). 実用化(試用を含む) : 10月 ～

開発メンバー

当 社	生産計画担当者(エキスパート)	2名
	システム担当者(SE)	1名
富士通	KE	1名
	SE	1名

三井東圧化学(株) システム部 小口梧郎

(1) AI (エキスパートシステム) 導入の現状

当社では、5年程前からAI利用の調査・検討を行ってきたが、その一環として、1986年よりエキスパートシステムとして2つのプロトタイプシステムを開発した。1つは、多銘柄製品を一系列の設備を切り換えながら製造するプラントの、生産日程計画の作成を支援するシステムである。日程計画の作成は、設備の能力や切り換えの順序をはじめ多くの制約が存在するために、現在ベテランでも長時間を要している。このシステムは、計画作成作業を非熟練者でも比較的短時間で行えるようにすることを目的としたものである。他の1つは、当社分子設計支援システム(SAFIRE)の利用者を対象にしたコンサルティングシステムである。解析項目に応じて、量子化学計算など各種のプログラムの中から適正なプログラムを選択し、SAFIREの使用に不慣れな研究者に適切な作業順序を提示することを目的としたものである。ツールは、ESHELL/FMを用い、パソコン上に実現した。いずれのシステムも、ルール数100前後の小規模なもので、そのまま実用を目指したものではないが、より専門的な知識の追加を行えばなんとか実用のレベルに達し得るとの感触が得られた。後者のコンサルティングシステムについては、対象分野を絞っ

て、現在実用システムの開発を行っている。また、生産日程計画の支援システムについても、今年中に実用化に着手する計画である。

以上のほかに実用システムとして開発中のものに、Mプロセスの運転支援システムがある。このプロセスでは製品の品質維持のために高度な運転管理が要求される。本システムは、反応系統の実測データをオンラインで監視しながら異常状態の早期発見とその原因の解明を行い、さらに、異常に対する適切な処置方法について運転者にガイダンスを行うことを目的としたものである。

これらの実用システムについては、今後1～2年以内の本格的な実用化を目標としている。また、実用システム構築のためのツールとしては、ESHELL/SB、ESHELL/X、OPS83などを採用ないし予定している。

(2) 今後の方針

上の例でも見られるように、エキスパートシステムは単独で利用するよりも、従来型の計算機システムとそれを使用する人間との接点においてより有効であると考えられる。すなわち、従来のCADシステムやデータベースシステムあるいは制御システムにおいて、止むなく自動化から取り残されてきた部分や人間とのインタフェースの部分を補充する形での利用に適しているようだ。当面はこのような応用分野の中で効果の明確なものを中心に新たなシステムの開発を進めて行くのが良いと考えている。この意味で、使用するツールも、従来システムとの関係が取りやすいこと、また、(開発者ではなく)ユーザーとのインタフェースの作りやすいことが必要条件となろう。

三菱化成情報システム部

山路 泰

「統合化」はAIを取進める我々のキーワードである。人間のもつ発見的知識と、機械のバワフルな知識の統合化。複雑で大規模なシステムを成す現実と、論理に支えられた科学や工学の融合。ローカル処理とグローバル処理の融合。事務処理や工学設計の過程におけるエッセンスの集約。このような基礎技術を総合的に展開することによって業務の質の向上を図ろうとしている。AIはその技術のひとつである。

1984年に勉強会という形で始まった当社のAIも、このように全体システムの一部として次第に定着しつつある。特に、工場における生産物流管理システムの開発にあたっては、計画系システムとしてAIが採用され、開発が進められている。化学工場の場合、銘柄の切り換えや多段バッチ工程のコントロールと、複数のプラント間のバランスを共に考慮する必要があり、従来技術単独ではシステム化が困難なところだった。現在、関係会社も含めて10余りの計画系システムを開発中であるが、いずれも以前から懸案になっていた部分である。現在のところ、プロトタイプや部分システムがほとんどであり、全体システムとしての本格稼働は来年以降の見通しである。ツールは主として、メインフレーム系はESHELL、ワークステーション系はPROLOG他を使用している。これらと並行して、制御や診断といったプラント運転の支援システムとしてAIやファジーを使うことが検討されている。この場合ツールは、プラントや計装機器に依存している。また、コンサルテーション・システムのように比較的小規模なものも今後開発されるが、実用化というよりは、普及の目的のほうが大きい。

以上のように、同時並行でシステム開発を行っているわけだが、開発の生産性向上、システムの標準化（ハード、ソフト、技法）、社内KE養成など未解決の問題は多い。また、AIは研究開発的な色彩が濃く、単純なメリットの積み上げでは、正当な評価を受けにくいケースがある。例えば、計画支援システムを作っても計画作業軽減自体のメリットは僅かである。さて、AI技術だけにこのような問題の解決を期待すべきだろうか？ 確かに、ドメインシェルや超高級言語とよばれるツールは、それらの援けになると思われる。しかしながら、AIを適用する立場からの改善（トータル・システム指向）や、AIを運用する立場からの改善（新しいメリット評価法の検討）も重要である。これらは、AI以外の領域である。

即ち、AIの推進と他分野の推進はある程度両立し、それらの統合が、最終的な「質の向上」へとつながると考える。

三菱重工業エンジニアリングセンター 船越 亮平

弊社では、原子力部門や航空機部門を中心として信頼性や診断技術に関する研究を長年にわたって行っており、この数年はAIを応用した診断技術に関する研究も活発に行っている。化学プラント向のAI応用技術としては、オンラインエキスパートシステムを内蔵した運転支援パッケージシステムPDIAS (Process DIagnosis System)がある。PDIASは、弊社と出光興産㈱が共同して開発を行ったものであり、弊社内で培われてきた診断技術が十分に活かされている。PDIASは62年4月から、出光興産㈱愛知製油所の重油流動接触分解装置 (R・FCC)を対象にオンライン稼動しており、一年余りの使用経験から、実用性の高いシステムであると評価している。

1. PDIASの開発背景

今後、化学プラントのオペレーションは、省力化や集中化が一層進み、高範囲なプラントを、より少人数で安定に且つ安全に集中制御を行う方向に進んでいくであろうと考えられる。そして、その為にはオペレータの運転状況把握を助け、運転を支援することを目的とする高度な計算機システムの導入が不可欠であり、このようなシステムを実現するツールとしてPDIASの開発を行った。

2. PDIASの特長

- ①ドメインシェルであり、知識などをデータとして入力するだけで、オンラインの運転支援システムとして稼動する、石油製精に限らずあらゆるプロセスプラントに適用できる。
- ②異常監視機能の充実により、誤報がなく且つ早期に確実に異常検知を行う。
- ③熟練者が有している異常検知、診断手法を容易に移植できる。

④原因究明だけでなく、予測や対処方法をも診断し、タイムリーに音声と画面を用いて告知する。

⑤エキスパートシェルは弊社が独自に開発したCMCT (Cause Matrix and Consequence Tree) 法を採用し、数千個の原因から1~2秒で診断する高速性を実現している。

3. 今後の展開

PDIASは既に商品化されているが、今後、導入プラントでの運用経験を反映しながら更にシステムの完成度を高め、使い易いシステムを目指す。

F-SEL07015

千代田化工建設(株)
オートメーション技術センター
仁井田 和雄

当社はエンジニアリングやプロジェクト業務の質と能率向上にエキスパートシステムの活用が近い将来に効果的になると考え、その基本技術の修得と有効な適用分野についてのスタディーを1981年より開始した。この結果に基づき、1986年には複数部門の技術者を集めてAI技術開発グループが組織され、有望な適用分野について複数のプロトタイプシステムが開発された。本稿では、このうち以下の二システムについてその概要を紹介する。これらのシステムはエンジニアリングおよびプラント運転という当社の代表的な業務の支援を目的にしている。

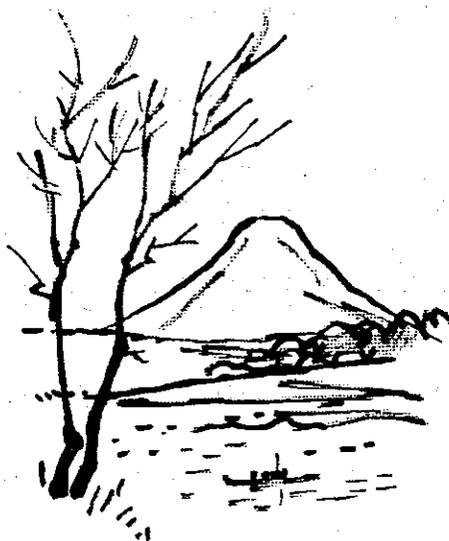
エンジニアリング分野では、プロセス設計業務を中心とするプロセス・エンジニアリング支援システム(PFD-KIT)が来年末をめぐりにLISPマシンSymbolics 3670上でプロトタイプとして開発中である。PFD-KITはプロセス・フロー・ダイアグラムを作成する設計用ツールであり、プロセスの合成に必要な機器等のグラフィック・イメージがマウス・センシティブなアイコンとして多数用意されている。更に各アイコンには、エンジニアリングに関する数多くの重要なチェック項目が体系的に格納でき、PFD-KITはそれらのチェック項目を自動的に起動してチェック項目の可否を判定する。PFD-KITはこれらの割に細かいチェック項目の一つ一つを独立の支援システムとして提供するのではなく、これらを一つの統合化システムとしてまとめ上げて効率的に活用する事を目指している。PFD-KITは通常のエクスパートシステムと同様にプロセスの非エキスパートを当然支援するが、それだけではなくプロセス設計のエクスパートである設計者が彼らの仕事をより効率的に、更により高度に遂行出来る事を主目標にしている。当社ではこの概念について次の標語を用いて説明している。

Engineering Knowledge is behind PFD and P&ID.
Expert Systems for Process Design Experts.

この機能を実現するため、PFD-KITは汎用推論エンジンKEEとSymbolicsに標準装備されているオブジェクトオリエンテッドプログラムミン技術を基本技術として採用した。

プラント運転の分野では、プロセスプラントの知的運転支援を目指して、汎用のオンライン・リアルタイム・エキスパートシステム(C-REXS)が開発され、本年中に石油精製工場の一プラントに実装され実証テストにはいる予定である。既にC-REXSでは、エンジニアリング会社の立場から各種プロセスにおける主に設計面からの専門知識が標準知識として格納されており、個別の応用において共通に利用することが可能である。このため、応用においては基本的にプラン

ト運転面の専門知識を新たに投入すれば、プロセスプラントの知的な運転支援システムが短期間で開発することが可能である。現在目指している主機能は運転支援の内、プラントの異常診断であり、次の段階では起動停止及び効率化運転の支援が計画されている。C-REXSは米国 ICC 社のオンライン・リアルタイム・エキスパートシステム PICON を現在の基本技術として採用しており、現状で最も高性能なリアルタイム・システムである。



用語解説

AI :

Artificial Intelligence の略。(1)人間の知的活動機構の解明の分野、(2)新世代コンピュータ開発における基本的革新をめざす分野、(3)「エキスパートシステム」「機械翻訳」などを含む AI ビジネスの分野に大別される。

エキスパートシステム (ES) :

特定分野の専門知識を知識ベース化することで、非専門家の問題解決を支援する知的プログラムの一種。分析型(又は診断型)と設計型に大別される。

EWS :

Engineering Work Station の略。32ビットパソコンの上位機種からスーパーミニコンの間の機種の総称。グラフィックス機能とネットワーク機能の強化が進んでいる。

KE :

Knowledge Engineer の略。知識工学者と訳されることもある。専門家の知識の獲得・表現・利用・管理の方法に関する技術者。

AI ツール :

利用できるコンピュータの規模から、(1)小規模システム開発型、(2)大規模ES開発型に別れる。機能面からは、(a)ルール型、(b)ハイブリッド型、(c)黒板型に分類される。

汎用AIツールを下に示す。

1. KEE : Intelli Corp社製, Knowledge Engineering Environment の略。大規模, ハイブリッド型。
2. ART : 「アート」と読む。Inference社製、大規模, ハイブリッド型。
3. KC : カーネギー・グループ社製, Knowledge Craft の略。大規模, ハイブリッド型。
4. ESHELL : 富士通製, 大規模, 黒板型
5. BRAINS : 東洋情報システム製, ルール型。
6. OPS-5 : DEC社製, ルール型。
7. ESE : IBM社製, 大規模, ルール型 他は本文に説明有り

プロダクションルール :

知識を表現する方法のひとつ、IF・・・THEN・・・の形で現わされるルールをさす。

フレーム;スロット :

ミンスキーが提唱した理論にもとづく知識表現の方法。フレームと呼ばれるデータ構造とスロットと呼ばれる構成要素の集合で表現される。

オブジェクト指向プログラミング :

従来のプログラミングがコントロール(制御)中心の考え方で手順のプログラム化であったのに対し、データ(もの)を中心にするプログラミングの考え方。

前向き推論 :

得られたデータを出発点としてそこから導かれる結論を探しながらゴールへ進む推論法。

後ろ向き推論 :

ゴール(目標)となる状態から、それに必要な条件や仮説を探りながらデータに達するまで調べる推論法。

ドメイン・シェル :

アプリケーション・シェルとも呼ぶ。汎用AIツールに対し、エンドユーザーが直接使えるような受注型(特注型)のツールをさす。多くは汎用ツールにドメイン(領域)向けのユーザーインターフェースを付加する形式。

人工知能アプリケーション

アンケート

	岩崎技研工業㈱	大阪石油化学㈱	興亜石油㈱	栗田工業㈱	チッソ㈱
①	1983年京大AI研究グループKARAにPrologインタープリタ開発を援助開始	昭和61年10月	1986年10月	1986年	昭和61年8月
②	Prologコンパイラ・AZ-Prologを開発中。各社Expert System構築を技術協力	故障診断	装置異常診断システム、生産計画スケジューリング	エキスパートシステム	開発、運用の過程で発生する種々の障害のうちホストコンピュータの基本的なOS等の基本システムに關して発生する障害の診断システムをテーマとする。
③	自社AI開発グループは現在4名	現在0人、1~2人迄増やす予定	現在数人、増やすかどうかは未定	現在1人、今後2~3人程度増やす予定	2名、将来10名
④	AI PLAN TELL	ESHELL/SB	BRAINS	LISP/PROLOG OPS5 VAX2000 グレード	創玄、ES/KERNEL
⑤	技術協力中のExpert Systemが一部実用稼働開始	昭和63年8月	2~3年後	逐次、本格的には2~3年後	2年先(65年頃)
⑥		300~600	~2000	100~500	150~300
⑦		60~100人月	プロトタイプ10人月 実用化20~30人月	2~5人/18ヶ月/システム	12人月
⑧		外部と共同	プロジェクトチーム	応用研究	今は個人。が、望ましくはチーム、プロジェクトで実施したい。適切な役割分担を行う必要がある。
⑨		外部	外部	外部	外部講習会出席および社内Video Training

		(財) 電力中央研究所	関東洋情報システム 株式会社 エイジ	日本酸素㈱	パーソナルメディア(㈱) 以下三井造船㈱プログラン ト事業本部に関するもの のみ答えたもの
①	AIに取り組始めた時期 、予定	昭和59年	昭和58年	昭和61年10月	昭和59年
②	取り組んでいるテーマ、 予定	(所内むけ) ES開発、 知識獲得支援ツール開 発、開発方法論、機械 翻訳システム、プログ ラム自動化		ガス漏洩監視における Expert System、半導 体工場ガス設備の危険 度評価Expert System	設計支援、運転支援、 制御、トレーニング
③	KEの数、増やす予定	5人	約100人	現在1~2名、とりあ えず4~5名に増やす 予定。	KE、SE、専門家は特に 区別していない。
④	使用(予定)のツール	KEE, ART, Eshell, OPS83	Super BRAINS	創玄	OPS83, SUPER BRAINS, LISP, 創玄他
⑤	実用化の時期はいつごろ だと思ふか	システムに依存。最も 早いので2年後を予定		プロトタイプとしては 一応完成しているが、 S.63.12月迄には実用 レベルとしたい。	昭和63年頃
⑥	実用化された時のルール 数はどの程度か	システムに依存。最も 早いので150程度		各々500ルール程度	ツールの種類によって 異なる。言語に近いも のである。500から 1,000ルールで可能
⑦	開発にどの位の人、月が かかるか(又はかかりそ うか)	システムに依存。プロ トタイプ3人×3ヶ月 、実用化3人×5ヶ月		プロトタイプ2人×半 年、実用レベル各々2 人×1.5~2年	6人月から36人月
⑧	どんな組織で開発される か	知識処理研究室(KE) と各分野の専門家		Computer Engineer が 中心となり必要の程度 専門家の協力を仰ぐ	専門家主導のタスクフ ォーム
⑨	KEのトレーニングは外 部、社内どちらで?	社内 ④~⑦: 開発中 /計画中のシステ ムは約30ある	社内	外部の機関、講習会、 外部からの派遣は無 い	やっではない一KEは必 須の条件か?(SE, 専門 家の兼務では?)

	セメント会社	鉄鋼会社	製薬会社A	製薬会社B	製薬会社C
① AIに取り組始めた時期、予定	1986年	1984年4月～	コメントではAIを使った現時点ではAIを使ったプログラム開発の予定はない。	未定	2～3年後の予定
② 取り組んでいるテーマ、予定	セメントプロセスの制御、メンテナナンス	鉄鋼プロセスの診断、プラント設計支援、溶接施工診断		未定	検索、解析(データ、ロジック)
③ KEの数、増やす予定	0人 専門家、SEが兼任	20人→100人単位		0人	0
④ 使用(予定)のツール	OPS83	Brains, Super Brains, Eureka, 創玄, E-She II, 自社開発ツール			未定
⑤ 実用化の時期はいつごろだと思うか	1995年頃	一部実用化済		?	?
⑥ 実用化された時のルール数はどの程度か	数千ルール程度	100～500程度		?	?
⑦ 開発にどの位の人、月がかかるとか(又はかかりそうか)	100人月	知識整理が出来ていれば6ヶ月・人程度		?	?
⑧ どんな組織で開発されるか	プロジェクトチーム	フィールドエンジニアKEのプロジェクトチーム		?	特別な組織は作らない
⑨ KEのトレーニングは外部、社内どちらで?	外部	社内教育		やってない	

	製薬会社D	コンピュータ関連会社	繊維会社	化学会社E	化学会社F
①	AIに取り組み始めた時期、予定	未着手	現在調査段階	なし	コメント 正確にはAIの定義から始めないといけないと思いますが、この場合は定義を論ずる場ではないようなので避けたいです。
②	取り組みんでいるテーマ、予定	工場製造現場（パッチ生産方式）における日程編成	分析データ解析のエキスパートシステム	実績、予定とも無い	社内では、各現場で問題に感じ必要ならいわゆるAIツール（例えばESHELL）を導入して検討し使えるものを使っていくという段階です。いわゆる「KE」と呼ばれる人はいないようです。
③	KEの数、増やす予定	未定	0人	0人、予定なし	私員ですが、いわゆるAIが実用されるのには、まだまだ時間がかかり現在のファイバーが去った次の次ぐらいではないかと考えています。
④	使用（予定）のツール	未定	検討中（OPS系かMRTなど）	④なし	
⑤	実用化の時期はいつごろだと思うか	未定	未定	⑥、⑦回答不能	
⑥	実用化された時のルール数はどの程度か	数百ルールになるかと考える。数千になるともうなものを想定するメンテナナンスでお手上げになるのではないかと①、②未定	不明	③組織は無い	
⑦	開発にどの位の人、月がかかるか（又はかかりそうか）	5年以上	1年・人	③いずれも実施してない	
⑧	どんな組織で開発されるか	社内のProjectとソフトウェア会社の共同	研究室のサブグループ	コメント：・散発的に目につく情報をチエックしたり、AIシステム開発企業の話をたまに聞く程度。・application s/wは入手していない。・適当なテーマの選定が難しく、具体化は程遠い。	
⑨	KEのトレーニングは外部、社内どちらで？	やってない	未定		

	会社G	会社H	会社I	会社J
①	AIに取り組始めた時期、予定	昭和58年頃	1987年度より	65年
②	取り組んでいるテーマ、予定	各種Expert System(診断型、制御型、計画型etc)の開発、高度なAIに関する基礎研究	プラントのスケジューリング、計装設計における機器選定	ドラッグ・デザイン
③	KEの数、増やす予定	10~20人	当社の場合専門家とSEのベア、又は専門家自身がKEの役割を果たさざるを得ない	未定
④	使用(予定)のツール	特に限定せず、各種のものを使用	ESHELL/SB(富士通)	未定
⑤	実用化の時期はいつごろだと思うか	S.61頃から既に実用化(Expert System)	ほぼ完了(実践テスト中)	66年
⑥	実用化された時のルール数はどの程度か	数百程度	ノーコメント	500~1000
⑦	開発にどの位の人、月がかかるとか(又はかかりそうか)	対象により異なる	約1年	30人・月
⑧	どんな組織で開発されるか	工場の技術室、システム部門、研究所	プロジェクトチーム	⑤を参照 技術情報室
⑨	KEのトレーニングは外部、社内どちらで?	社内	社内・外	特になし

ニュースから

A I 特集

- 1986.3 コンピュータ 応用人工知能……プロセス工業における最近の動向 (ペトロテック)
1986.9 A I / エキスパートシステムの現状と石油精製・石油化学への応用 (ペトロテック)
1987 人工知能とエキスパートツールの進展 (事務と経営 39 488)
1987.7 インテリジェント F A 特集号 システムと制御
1987.7 エキスパートシステム (インターフェイス増刊 archive)
1987.8 人工知能 コンピュータは知的な機械に進歩する (Newton)
1987.9 人工知能と化学工学 (ケミカルエンジニアリング)
1987.9 A I の推論と O R (オペレーションズ・リサーチ)
1988.1 コンピュータケミストリーシステム開発の諸事情 (化学経済)
1988.1 エキスパートシステム (人工知能学会誌)
1988.1 エキスパートシステム構築ツール (A I Spectrum)
1988.3.21 エキスパートシステム成功への道 (日経エレクトロニクス)
1988.4 日米 A I ビジネス最前線 (コンピュータピア)
1988.5 人工知能と化学 (化学と工業)
1988.5.6 エキスパートシステム (日本の科学と技術 29 No.250)
1988.7.1 エキスパートシステム最前線 (日経 A I 別冊)
1988.8 化学と人工知能 (石塚英弘) (JAICI フォーラム)

A I

- 62.7.17 A I チームを発足、石油精製や製品配送計画 (三菱石油) 日経産
7.17 回転機械診断 E S を販売 (旭化成情報) 日本工
7.31 A I で異常監視、F B R 運転支援システム (動燃) 日刊工
8.4 コジェネ用の故障診断システム秋から本格実用 (大阪ガス) 日本工
8.7 蒸留精製を A I 制御 (住友重機械) 化工日
8.16 社説 多様な人工知能の研究を歓迎する 日経
8.17 遺伝子情報解析システムの売れ行き計画の 2 倍 (ベックマン・ジャパン) 化工日
8.18 トップターの異常診断用 E S が稼働 (コスモ石油) 化工日
8.20 コンピュータで医薬品の合理的デザイン (サントリー) 日刊工
8.20 エチレンプラント用運転異常診断エキスパートシステム (大阪石油化学、TEC) 石油化学
8.20 トップター、F C C 最適制御システム導入へ (三菱石油) 化工日
8.27 英社の L P G 異常診断システム販売へ (TEC) 石油化学
8.28 原子力廃棄物用異常診断システム開発にメド (日揮) 石油化学

8.29	原発の運転A Iで支援 (関電など電力4社と三菱重工)	日経産
8.31	エチレンプラント用E S、受注活動開始 (TEC)	石油化学
9.2	プロセス向けエキスパートシステム用ソフト (PICON) (千代田化工)	化工日
9.3	エキスパート構築用ソフトを輸入販売 (千代田化工)	石油化学
9.3	運転異常診断システム開発へ (東亜合成)	石油化学
9.7	製油所の跡地利用診断システム (エネ庁)	日経産
9.14	最適樹脂選択エキスパートシステムを開発 (東レ)	Nikkei New Materials
9.14	設備診断分野でA I応用システムの開発が目立った'87 化学プラントショウ	
		日経A I
10.2	ポリエチレン設備用エキスパートシステム開発へ (住化)	石油化学
10.6	放射性廃棄物の処理施設用・運転支援エキスパートシステム (日揮)	日刊工
10.7	A I利用の精製設備運転支援などE S開発いよいよスタート (石油活性化センター)	
		化工日
10.10	A Iでプラント運転 (住化)	日刊工
10.12	A I利用技術開発に本腰 (日揮)	石油化学
10.12	A I使用運転支援システムなど開発に拍車 (日揮)	石油化学
10.12	A I利用の運転支援システム石油精製への適用にメド (日揮)	化工日
10.12	射出成形機に運転支援E Sを組み込み (小松製作所)	日経A I
10.14	FCC用エキスパートシステムの開発にメド (日揮)	石油化学
10.19	エキスパートシステム、生産計画に応用 (三菱化成)	石油化学
10.21	A Iで教育訓練システム (大阪ガス)	日本工
10.23	汎用エキスパート「K I S」故障診断に実用化 (川崎重工)	化工日
10.23	原子力廃棄物処理システムにもA Iを応用へ (日揮)	石油化学
10.26	プラント用センサーの故障診断エキスパートシステム開発 (Texaco)	日経A I
10.26	加熱炉運転支援システムを日本石油精製と共同開発中 (千代化)	日経A I
10.27	プラスチック射出成形でA I分野へ進出 (小松製作所)	日本工
10.28	原発異常診断システム向けに汎用支援ツール外販	日本工
10.31	A Iで製油所設備診断 (出光興産)	日経産
11.2	薬物の生体への吸収性即時算出、バイオ医薬用ソフト (菱化システム)	日刊工
11.4	溶液内の生化学反応をシミュレーション化 (分子)	日刊工
11.9	NASTRANを支援するエキスパートシステム開発 (松下電器)	
		週刊電波コンピュータ
11.9	キルンの運転支援エキスパートシステムを実用化 (日本セメント)	日経A I
11.9	製品運搬のための配船計画エキスパートシステムを開発中 (三菱化成)	日経A I
11.10	DNA塩基配列を自動解析 (デュボン)	化工日
11.10	高炉の異常原因追及にA Iを導入 (住金)	日刊工
11.10	バイオ関連計測システムに進出 (日本電気三栄)	日本工
11.13	A Iで石炭ヤード運用計画 (大阪ガス)	日本工
11.16	セメントプラントの運転訓練用シミュレーター開発 (神鋼、日本セ)	日本工
11.18	繊維の色あいをA Iで自動調整	日経

11.23	合成樹脂製造プラント向けエキスパートシステムを来春運用へ (住友化学)	日経AI
11.24	石炭ヤードの運用業務をAI化(大阪ガス)	日刊工
11.27	鉄を見守るAI、高炉制御、異常を予知	日経
12.7	ガラス生産工場に来夏AI導入のためAIツール/ハードの選定開始 (旭ガラス)	日経AI
12.7	石油精製プラント向けエキスパートシステムを開発へ(三菱石油)	日経AI
12.7	フェライト材料の設計支援システムを一部利用開始(富士電気化学)	日経AI
12.10	大腸菌DNA解明へ、全塩基配列目指す	日刊工
12.21	米SRIと共同で化学物質分析手順計画支援システムを開発(大阪ガス)	日経AI
12.21	樹脂の設計利用に2種類のエキスパートシステムを開発中(東レ)	日経AI
63.1.5	AIで化学分析計画システム(大阪ガス)	日本工
1.14	AI全社で活用、4工場にもES、生産計画支援(日本ゼオン)	日経産
1.26	炉況診断システム完成(神鋼)	日刊工
1.27	赤外スペクトルの解析用AIを開発(化技研)	日本工
1.29	運転計画支援ES(日本ゼオン)	日経産
1.29	AIに本格参入、知的文献検索システム年内にも販売(積水化)	日刊工
2.1	染料調合支援システムを4月に実用化(春日染工所)	日経AI
2.4	熱分解収率予測プログラム「PYPS」導入(大阪石油化学)	石油化学
2.4	AIでパターン認識(日軽情報システム)	日本工
2.15	AI応用のFMS用シミュレータを4月に発売(東洋エンジ)	日経AI
2.19	AIで製鋼操業計画(日本鋼管)	日経産
	製鋼スケジュールの作成AIで時間1/6(日本鋼管)	日経
	AI使い作業予定自動作成(日本鋼管)	日本工
	AI応用の作業スケジュール自動作成システム(日本鋼管)	化工日
	製鋼工程に初のAI、作業計画作成20分に(日本鋼管)	日刊工
3.14	プラスチック成形品の生産計画システムを社内30ヶ所で利用(積水化学)	日経AI
	イオン・クロマトグラフィの操作支援システムを試作(島津製作所)	日経AI
3.31	AI活用 電力供給運転支援システム(動燃)	日本工
4.8	ES使い生産計画(王子製紙)	日経産
4.11	重合物の生産計画エキスパートシステムを開発中(出光石化)	日経AI
4.13	3次元分子構造生成システムを輸入(理経)	化工日
63.4	実用化時代を迎えた人工知能	富士通 Family
4.19	AIで回転機を診断(川鉄)	日経産
	運転支援やキルン制御(住友化学)	日経産
	AI化に本格着手(食品機械基盤技術開発)	日本工
4.20	バイオ支援ソフトパソコンで実現(富士通)	日経産
4.25	ガス吸収冷温水機故障診断システムを自社開発再構築(東京ガス)	日経AI
4.26	プラント運転支援エキスパートシステム(千代化)	化工日
5.9	活性汚泥性向け生物相診断エキスパートシステム(明電舎)	日本工

5.30	火力用水質管理をAI化(日機装)	化工日
6.13	AIプロトタイプの作成完了(エン振協)	化工日
6.14	錠剤検査でAIにより異常早期発見(鐘紡)	日本工
6.20	米社とボイラーのエキスパートシステム開発へ(三菱化成)	石油化学
7.4	原料乾燥の方式選定支援エキスパートシステムを開発中(ライオン)	日経AI
7.13	AI使い塗装診断(NKK)	日経産
8.1	プラント制御用エキスパートシェル開発、ファジイ推論も装備	日刊工
8.1	AI応用の射出成形システムを開発(富山県地域のプラスチック企業)	日経AI
8.1	スーパーコン用流体解析AIシステムで賛助会員募集(流体解析システム研)	日経AI
8.1	発電タービンの故障診断システム開発中(英CEGB)	日経AI
8.1	プラント故障診断システムをユーザーに提供(岩井機械工業)	日経AI
8.5	LSI製造プロセス AIで診断	日刊工
8.12	ガラス材料設計にES(無機材研)	日経産
8.16	AI模擬運転システム茨城の鹿島に導入(三菱油化)	日経産
8.26	LAS導入、AIなどで総合情報化(昭和シェル石油)	化工日

バイオ(ニューロ)コンピュータ

62. 9.29	ニューロコンピュータ①(甘利俊一)	日経産
9.30	②	日経産
10.1	③	日経産
10.2	④	日経産
10.5	⑤	日経産
10.26	バイオコンピュータ実現へ熱い期待	化工日
11.24	光電変換素子、バイオチップ実現へ道を開く(微工研)	日刊工
11.26	バイオ素子・脳神経に迫る(次世代産業基盤技術研究)	日経
12.7	バイオコンピュータ脳機能の実現を目指す	日刊工
63.1.1	ニューロコンピュータ	日経産
1.4	プログラム不要の新世代電算機(ニューロコンピュータ)(富士通)	日経
1.5	プログラム不要の電算機(ニューロコンピュータ)(富士通)	日経産
1.29	ニューロコンピュータ学習や推論もできます	日本工
2.2	思考機能研究に着手、ニューロ電算機に応用	日本工
3.10	光ニューロコンピュータ開発(工技院、浜松ホトニクス)	化工日
6.29	歴史をすてろ、バイオにかけろ(三井物産)	日刊工
7.9	ニューロコンピュータ(岩崎武司)	日本工
8.1	ニューラルネットで化合物同定	化工日
8.8	米国が州の海岸沿い地域ニューロ科学の新拠点に	日経

Computer Chemistry System

- | | | |
|---------|--------------------------------------|------------------|
| 62.7.20 | 最新の理論取り入れ蛋白工学用CCS (三井情報開発) | 化工日 |
| 7.31 | 蛋白工学会が9月に発足 | 化工日 |
| 8.3 | MITが開発したシステムがアミノ酸合成酵素の高次構造を発見 | 日経AI |
| 8.14 | 高機能高分子用触媒で調査、分子設計の重要性指摘 | 化工日 |
| 8.26 | パソコンCCS拡張 (サイエンスハウス) | 化工日 |
| 8.31 | CCS事業が軌道に (ダイキン工業) | 化工日 |
| 9.14 | 蛋白工学会スタート | 日刊工 |
| 10.8 | たん白用ソフト導入、CCSを本格販売 (三菱商事) | 化工日 |
| 10.20 | 高速デジタル回線を構築、本社と各研究所を直結5ヶ年計画でLA化 (三石) | 化工日 |
| 10.27 | EWS版CCS開発動向を探る | 化工日 |
| 11.10 | CCS分野に参入、医薬関連を独自開発 (菱化システム) | 化工日 |
| 11.10 | 電算機で医薬品開発たんぱくをつくる (上) | 日刊工 |
| 11.11 | 電算機で医薬品開発たんぱくをつくる (中) | 日刊工 |
| 11.12 | たん白質、ペプチドの最適分離条件を簡単に検索 | 日刊工 |
| 11.17 | 電算機で医薬品開発たんぱくをつくる (下) | 日刊工 |
| 12.10 | 分子設計支援システム開発 (日立、クラレ) | 化工日、日刊工 |
| 63.1.7 | エンジニアリングWSで分子を解析、設計 (日本DG) | 日経産 |
| | 統合型CCSのEWS版 (日本DG) | 化工日 |
| | EWS使い低価格の分子設計システム (日本DG) | 日本工 |
| 1.9 | 合成経路設計システム日本でも開発進む | 化工日 |
| 2.1 | コンピュータケミストリー関西化学工業協会が懇談会設立 | 化工日 |
| 2.8 | 商品化が進む分子材料設計支援ソフトウェア | 日経 NEW MATERIALS |
| 2.4 | CCS分野でトップグループに、分子設計支援システムで躍進 (ダイキン) | 化工日 |
| 2.16 | 化学品分子構造3次元で組み立て (帝人システムテクノロジー) | 日経 |
| | 低価格で本格分子設計 (帝人システムテクノロジー) | 日刊工 |
| | 医、化学用研究開発向け分子設計支援システム (帝人システムテクノロジー) | 日本工 |
| 3.2 | CCS事業が急拡大 (理経) | 化工日 |
| 3.8 | 日本のCCS市場に意欲 (日本コンベックス) | 化工日 |
| 3.14 | CCSユーザー会発足 (三井物産) | 化工日 |
| 3.16 | CCSをパソコンで | 化工日 |
| 3.23 | コンピュータ化学進展への期待 (社説) | 化工日 |
| 3.25 | グラフィックスーパーコンに進出 (旭化成) | 化工日 |
| 4.1 | 分子設計システム販売 (長瀬産業&日本DG) | 化工日 |
| 4.8 | 分子設計システム販売 (長瀬産業&日本DG) | 日経産 |
| 4.14 | 国内初の無機化学用CCS (日立) | 化工日 |

4.15	コンピュータ化学部会が発足 (近畿化学協会)	化工日
4.20	分子設計ANCHORパソコンに移植 (富士通)	化工日
4.20	バイオ支援ソフトパソコンで実現 (富士通)	日経産
4.22	各社のCCS戦略	化工日
4.26	汎用型分子設計支援システム、初の本格ユーザー会 (ダイキン)	化工日
4.28	分子設計支援システムでCCS市場に参入 (クボタコンピュータ)	化工日
5.31	ミニスーパーコン各社CCS分野に照準	化工日
6.3	触媒事業で対日市場攻勢分子設計手法を駆使 (カタリティカ)	化工日
6.8	CCS普及に新戦略 (觸分子とCRC)	化工日
6.21	EWS版のCCSへ相次ぎ参入計画	化工日
6.27	CCS普及へ新体制 (クラレ中研)	化工日
7.5	分子構造組み立てパソコンで自在に (東レ)	日経
7.8	分子設計の「NP1」ミニスーパーコン販売 (日本イー・エー・アイ)	日経産
7.8	CCSで対日攻勢へ (フローティングポイントシステムズ)	化工日
7.20	米国におけるCCSの最新動向 (上)	化工日
7.22	米国におけるCCSの最新動向 (下)	化工日
7.27	高分子の理論化学計算に新手法	化工日
8.23	EWS、分子設計も簡単 (日本シリコングラフィックス)	日経産

データベース

62.7.21	特許情報の多観点分類DB 特許庁が作成に着手	日刊工
8.11	研究用データベース実用化 (上)	日経産
8.12	研究用データベース実用化 (下)	日経産
8.14	バイオマテリアル・ファクトデータベース構築へ	日本工
8.14	コンピュータ化進める米特許庁	化工日
8.26	バイオ情報データベース化 (通産省)	日経産
8.31	特許・技術情報データベース (ORBIT) を提供 (ユサコ)	日経産
9.14	樹脂情報オンライン、来年4月からスタート (三菱レーヨン)	日経コンピュータ
9.22	ニューガラスの開発支援システム、データベース構築へ (ニューガラスフォーラム)	日刊工
10.5	産学官14有識者でデータベース委 (バイオインダストリー協)	日本工
10.19	化合物スペクトルデータベース提供 (基盤技術センター)	日刊工
10.19	新素材のデータベース63年度から構築へ (通産)	石油化学
10.21	高分子新素材のデータベース構築に乗り出す (通産)	化工日
10.26	化合物スペクトルデータベース、世界初来月スタート (化技研)	化工日
11.13	化合物スペクトルデータベースシステム順調なスタート	化工日
11.30	世界の科学情報パソコンで4000万件のデータベース始動 (STN)	読売 (夕)
12.1	世界初の科学技術情報データベース (STN)	化工日
12.3	世界情報ネット完成 (ソニー)	日本工
12.11	高压ガス保安情報のデータベース構築	化工日

部 会 行 事

第11回情報化学討論会プログラム

共催 日本化学会・日本薬学会ほか

日時 12月5日(月)～7日(水)

会場 京都大学薬学部講堂 (I会場: 一般講演)

京都教育文化センター (S会場: 特別講演、P会場: ポスターセッション)

〔交通〕 (I会場) JR京都駅市バス乗場Aから206系統、地下鉄四条烏丸駅から市バス65、

31、201系統で近衛通下車。京阪三条駅京都バス5番乗場から全系統で荒神橋下車。

(P、S会場) I会場より南へ約300m。

参加登録予約締切 11月19日(土)

〔講演時間 25分(講演18分・討論7分)〕

I会場

第1日(12月5日(月))

10:00 ~ 11:40

- 5I 01 膜タンパクのモデリング法の開発(北里大薬)○春日順一・梅山秀明
- 5I 02 アミノ酸対空間における確率距離を用いた類似タンパク質検索システム(図書館情報大)○中山伸一・吉田政幸
- 5I 03 蛋白質立体構造要素データベースとエキスパートシステム構築用ツールによる蛋白質高次構造予測へのアプローチ(旭化成)○田頭瑞加・戸瀬一孔・渡辺博明
- 5I 04 受容サイトにおける分子認識機構(第3報)パパインの光学異性体識別機構(東京農工大工)樋口俊章・佐藤克則○安川民男

13:00 ~ 14:15

- 5I 05 水中の有機化合物のpKa差の計算(蛋白工学研)○田中康正・中川節子・白鳥康彦
- 5I 06 溶液中におけるLi⁺とクラウンエーテルとの錯形成反応に関する計算化学的研究(阪大薬)○前崎博信・高木達也・永井伸二・谷美香・藤原英明・佐々木喜男
- 5I 07 分子力場パラメーターの最適化(第21報)ab initio法で計算したアルカン分子の分子間、分子内ポテンシャルのMM2との比較(化技研・北大理)○都筑誠二・田辺和俊・内丸忠文・大沢映二

14:15 ~ 15:05

- 5I 08 分子力場パラメーターの最適化(第22報)ab initio法を使ったアミド、エステル、エーテルのパラメーターの最適化(化技研・北大理)○田辺和俊・都筑誠二・内丸忠文・大沢映二
- 5I 09 分子軌道法プログラム活用のためのエキスパートシステムの開発(三井東庄)○前田重徳・三戸邦郎・小田研悟・岡野清久

15:15 ~ 16:05

- 5 I 10 分子設計におけるエキスパートシステムに関する研究
(I)-Lead Evolutionへの適用の試み-(富士通・京大農)
菅谷照雄・塩原紀行・馬場雅浩・○湯田浩太郎・藤田稔夫
5 I 11 化学構造式についての種類の数え上げ多項式の間の数
学的関係の解析(お茶女大理) 細谷治夫

16:05 ~ 17:20

- 5 I 12 静電ポテンシャルの図形表現(中京大教養) 秦野 世
5 I 13 スーパーコンピュータによる分子グラフィックス(分
子研・中部システムズ) 伊奈諭・長嶋雲兵・○柏木浩・玉
谷祐・岡本政久
5 I 14 パーソナルコンピュータでの分子構造表示(電総
研) ○川口勝久・守谷哲郎

第2日(12月6日)

9:15 ~ 10:40

- 6 I 15 機器分析におけるパソコン学習とその効果(福井高
専) 吉村忠与志
6 I 16 複数種半導体ガスセンサーによる混合気体中の特定物
質の認識(豊橋技科大) ○金谷重彦・阿部英次・高橋由雅・
佐々木慎一
6 I 17 Automatic knowledge base building for the orga-
nic synthesis design program(SECS)(呉羽化学・U C
Santa Cruz) ○谷中幹郎・中村和彦・榎沢あずさ・W.
Todd Wipke

10:45 ~ 12:00

- 8 I 18 EXAPL (APL言語によるエキスパートシステム) を用い
たchemometricsプログラムARTHURの会話的利用(化技研) ○
西川利男・小笠原一郎
6 I 19 有機合成設計支援システム "AIPHOS" の開発(豊橋技
科大) ○船津公人・遠藤智明・C. A. Del Carpio・渡辺和夫
・佐々木慎一
6 I 20 母核の幾何の変形と合成-CHEMOGRAM STERICI と結合
関係表入力(東海大開発技術研) 米田幸夫

13:00 ~ 13:50

- 8 I 21 化学構造とNMRスペクトルのデータ処理統合システ
ムCIMSの開発(I)-システム設計と統合化環境の概要
(豊橋技科大) ○奥山徹・阿部英次・佐々木慎一
6 I 22 コバルト-59NMR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(続報)(電通大) 山崎昶

14:00 ~ 16:20

ポスターセッション

16:30 ~ 17:30

- 特別講演 I Q S A R パラメータ σ 及び μ^2 / α の設定と
その有効性 佐々木喜男

第3日(12月7日(水))

9:45 ~ 11:00

- 7I 23 分子の全体構造と部分構造の数値化(三共)田村千尋
7I 24 一般式を検索キーとした Set Reduction法による部分
構造検索の試み-Tautomer検索, Markush 検索, $-()_n$ -検
索および X1-R-X2 検索-(富士通)○樋高透・湯田浩太郎・
7I 25 ヒト発癌物質の分子知識データベース II (都臨床研
国立がんセンター・日本女子大)○大上徳子・神沼二真・
相田美砂子・大内香

11:05 ~ 11:55

- 7I 26 赤外ラマン分光学文献データベース(筑波大電子情報
富山県立技術短大・東大理)鈴木功・○安宅彰隆・田隅三
生
7I 27 Smalltalk/V による文献検索システムの試作(日大理
工)高瀬精一

13:00 ~ 14:15

- 7I 28 蛍光スペクトルデータベースの構築(電総研)守谷哲
郎・○川口勝久
7I 29 質量スペクトルデータベースにおける知識ベース構築
の試み(ダウケミカルズ・データベースシステムズ・筑波研
究学園)○渡辺忠一・六車裕孝・前田浩五郎
7I 30 T A S M A C スペクトルデータベース (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

14:25 ~ 15:25

特別講演 II タンパク質・核酸の生理機能データベースと分子
設計(京大化研)金久實

ポスターセッション 12月6日 14:00 ~ 16:20

- 6P 01 光ディスクを記録媒体とするパーソナルコンピュータ
によるタンパク質立体構造データベースの検索 図示システ
ム(姫路工大工・神戸学院女子短大)○中野英彦・中野修・
川嶋剛・山名一成・三軒齊
6P 02 C D - R O M と液晶シャッターを利用したパソコン版
蛋白質立体構造表示システム(株式会社システム・姫路工大
基礎工学研)○伊賀祐一・酒井義博・樋口芳樹・安岡則武
6P 03 タンパク質のアミノ酸配列と局所三次元構造(豊橋技
科大)○唐沢壁・高橋由雅・佐々木慎一
6P 04 赤外ラマンスペクトルのシミュレーションを含めた脂
肪族エーテルの分子力学計算(京大薬)○三輪嘉尚・町田勝
之輔

- 6P05 パソコン用3次元分子モデリングシステム3D-MOLの開発(東レシステムセンター)竹内正道
- 6P06 パソコンによる分子座標の手書き入力システム(学習院大理・群馬大教育)○田中伸英・菅忠義・飯塚健
- 6P07 デカルト座標をコンホメーション解析に適した内部座標に変換するプログラム(ゼリア新薬工業中研・北里大薬)○平野弘之・広野修一・森口郁生
- 6P08 CONFLEX-環状分子の全配座発生のための新しいアルゴリズム(北大理)○後藤仁志・大沢映二
- 6P09 構造差異ベクトルの表現と演算(関学大情報処理センター)○木下悦子・河井俊一・岡田孝
- 6P10 有機化合物の自動構造推定システム"CHEMICS"の開発-天然有機化合物の構造推定-(豊橋技科大)○船津公人・須々田実・佐々木慎一
- 6P11 化学構造とNMRスペクトルのデータ処理統合システムCIMSの開発(II)-¹H-NMRスペクトル帰属支援システムの開発(豊橋技科大)○吉田浩二・奥山徹・阿部英次・佐々木慎一
- 6P12 NMRスペクトル データベースのパーソナル コンピュータ化(1)C-13スペクトル データベース(神田外語大・化技研・日本電子)○山本修・早水紀久子・中川恵策・宮林延良
- 6P13 ワークステーションによるSTERICI/ENCODEシステムの、実用化(三井東庄化学)○岡野清久・前田重徳・三戸邦郎・小田研梧
- 6P14 オーバラップ係数を用いた有機化合物の匂い記述子間の包含関係の検討(豊橋技科大)○阿部英次・金谷重彦・小向隆夫・高橋由雅・佐々木慎一
- 6P15 高温超伝導体の結晶構造データと構造表示(東京工大総理工)山崎陽太郎
- 6P16 有機合成設計システムCASINOの開発(9)キラリシントニ認識モジュールにおける考え方ならびに方法論について(科技研)○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・林輝幸
- 6P17 一対比較生物データのQSARでの利用(豊橋技科大)○赤木俊夫・高橋由雅・佐々木慎一
- 6P18 人工知能的手法による非線形最小自乗計算の自動化(大阪電通大)藤田岩男
- 6P19 分子設計におけるエキスパートシステムに関する研究(II)-『意味ある部分構造』への適用の試み-(富士通・京大農)菅谷照雄・塩原紀行・○馬場雅浩・湯田浩太郎・藤田稔夫
- 6P20 Log P データベースを利用した疎水性置換基定数 π の算出(三共)○宮本秀一・脇田桂子・栗原英志

懇親会 12月6日17時40分より京都教育文化センターにおいて第16回構造活性相関シンポジウムと合同で行います。会費4,000円は参加登録時にお払込み下さい。(当日も人数に余裕があれば受け付けます)。

参加登録費 予約 5,000円、当日 6,000円

参加登録方法 本討論会または第16回構造活性相関シンポジウムのいずれか一方に登録して下さい(両方に参加できます)。予約参加登録には一人当たり1枚の郵便振替用紙を使用して、郵便振替口座番号 京都 6-5578 情報化学、構造活性相関シンポジウム実行委員会宛にお送り下さい。なお、講演要旨集は当日渡しとなります。

連絡先 〒606 京都市左京区吉田 京都大学薬学部 町田勝之輔 (☎ 075-753-4523 (直通))

* * * * *

情報化学部会部会員増加にご協力を!

* * * * *

* * * * *

* 【昭和63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、下記あてご連絡下さい。 * * * * *

* 〒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) * * * * *

* * * * *

第1回情報化学夏期セミナー（情報化学入門）を終えて

豊橋技術科学大学

高橋 由雅

船津 公人

去る7月27・28日の両日にわたり情報化学部会の初めての試みとして大学・企業の特に若手を対象とした夏期セミナーを愛知県蒲郡市で開催した（プログラム参照）。参加者総数は講師も含めて45名と予定の規模となった。

プログラム

7月27日（水）

1. 12:00 - 13:00 受付
2. 13:05 - 13:10 世話人挨拶
3. セッションA 化学データベース入門
 - 1) 13:10 - 14:10 化学構造処理：表現・入力・処理
（富士写真フィルム） 花井荘輔
 - 2) 14:10 - 15:10 スペクトルデータの計算機表現とその処理
（豊橋技科大） 阿部英次

--- 15:10 - 15:30 Coffee break

4. セッションB 分子設計・反応設計入門
 - 1) 15:30 - 16:30 新薬設計に計算機はどう使えるか？
（住友化学） 高山千代蔵
 - 2) 16:30 - 17:30 有機合成経路を計算機に考えさせるとは？
（山形大工） 工藤喜弘

5. 18:30 - 夕食

夜の部 - 情報化学のここが聞きたい（フリートーキング）

7月28日（木）

1. 7:00 - 8:30 朝食

- 1) 9:00 - 10:00 分子力場計算による分子設計・反応設計と分子力場パラメータの最適化
(化技研) 田辺和俊
- 2) 10:00 - 11:00 QCP Eプログラムの利用に際して
(呉羽化学) 中馬 寛

3. 終了後解散

参加者の多くは企業からの若手で占められ、計算機化学関連の部署での日が浅い、あるいはそういう部署はないがそういう部署の必要性を現実を感じ始めている、という立場にいる者が目立った。また、大学関係ではいわゆる夏の学校がそうであるように個人的興味からの学生参加者もわずかながらあり、我々を喜ばせた。

講師の方々にお願ひしたセミナー用のタイトルは、化学情報全般の中で現在特に注目されている主題のいくつかを選んだものである。情報化学になじみの薄い参加者を意識して基礎的、入門的性格の内容にして頂く事を特にお願いした。我々実行委員の難しい要求に快く応じて下さった講師の方々にはここで改めて御礼申し上げます。

質疑応答も活発に行われ、現実に参加者が直面している問題から発しているものが多く見うけられた。また、討論時間の不足で後述の夜の部でも講師に詰め寄る場面もあり、第1回情報化学夏期セミナーは大いに盛り上がったと言ってよいと思う。

昼間のセミナーとは雰囲気も変わった夜の部(情報化学のここが聞きたい)では夕食の間、参加者一人一人の近況などを織りまぜて自己紹介を行って頂いた。参加者が若いということもあってか、計算機をこれまで経験した事がない上に化学関係の仕事で計算機上でこれから実際に行わねばならない事への不安が比較的多かった。こういう意味では今回のセミナーに夜の部と称して自分の身近な問題を相談する場を設けたことは有意義だったかもしれない。自己紹介も一段落し、少し酔いもまわるころ前述のように講師に昼間ゆっくりと聞けなかった質問をもって詰め寄る場面があちこちで見られた。その後も互いに企業、立場を異にする者同士とはいえ各部屋で遅くまで話が弾んでいたようである。参加者一人一人の積極性に支えられた今日のセミナーであったと思う。ゆっくりと腰をおちつけてある主題について自分の持っている問題で議論をし、明日の情報化学に対して自分なりの夢を持てる場になったのならば、その場を世話した我々にとっても喜ばしい限りである。

最後に本セミナーを開催するにあたり、御協力頂いた関係各位に御礼申し上げ本報告を終える。

関 連 行 事

第16回 構造活性相関シンポジウムプログラム

共 催 日本化学会・日本薬学会・日本農芸化学会・日本農薬学会

日 時 12月5日(月) - 7日(水)

会 場 京都教育文化センター(京都市左京区聖護院川原町)

[交通] JR京都駅市バス乗場Aから206系統、四条河原町から市バス201, 31系統でいずれも熊野神社前下車。地下鉄丸太町駅から市バス65, 93, 202, 204系統で川端丸太町下車。京阪三条駅から京都バス5番乗場から全系統で川端丸太町下車。なお、同期間中、京都教育文化センターおよび京都大学薬学部において第11回情報化学討論会が一部重複して開催されます。

[講演時間25分(講演20分、討論5分)]

第1日 12月5日(月)

10:00 - 11:40

5S01「リボソーム/水二相系における置換フェノール類の分配係数の解析」

(京大・農) ○三芳秀人・藤田稔夫

5S02「Scaled Particle理論と木原ポテンシャルを用いた分配係数等の溶解特性の研究」(阪大・薬) ○藤原英明・吉川浩史・松本智成・村田三郎・佐々木喜男

5S03「油水分配係数のエネルギー側面に関するカロリメトリーによる研究」

(阪大・薬) ○村田三郎・吉川浩史・藤原英明・佐々木喜男

5S04「モンテカルロ法を用いた薬物の動的構造の評価と構造活性相関」(徳島大

・薬) ○小池晴彦・篠原康夫・後藤 了・寺田 弘(徳島文理大・薬) 平良全栄

13:00 - 17:00

5S05「ジアジン誘導体の分配係数の解析(3)異なる分配系における疎水性パラメータの比較」(神戸女薬大) ○山上知佐子・高尾楯雄(京大・農) 藤田稔夫

5S06「ペプチドの疎水性と構成アミノ酸の構造との相関関係の解析とその応用」

(京大・農) ○赤松美紀・吉田洋司・奥谷真一・中尾和也・藤田稔夫

5S07「Prolyl endopeptidase inhibitorの構造と活性の相関」(長崎大・薬)

○鶴 大典・芳本 忠・山元尚子・郡山信宏・池沢竜平・古川 淳(キッセイ薬品工業) 赤羽健司・倉科喜一

5S08「分子動力学法を用いる生理活性ペプチドの安定立体配座の探索」(呉羽化学) ○中馬 寛(化技研) 都築誠二・田辺和俊

5S09「COMPASSプログラムによる薬理作用団探索: 向知性薬」(豊橋技科大) ○赤木俊夫・高橋由雅・佐々木慎一

- 5S10「トロンボキサンA₂合成酵素阻害剤のShape Analysis」(三共・活性物質研)
○栗原英志・宮本秀一・松田啓一(化学研)川本 勲・寺田敦祐(分析代謝研)
畠 忠
- 5S11「トロンボキサンA₂アンタゴニスト活性における構造活性相関」(塩野義研)
○江角清志・山川真透・成定昌幸
- 5S12「アミド結合のN-メチル化によるシス配座の安定化」(東大・薬)○板井
昭子・鳥海美晴・富岡伸夫・影近弘之・首藤紘一
- 5S13「気相中・結晶中・酵素とレセプターの活性点におけるプロトン化された分
子種と脱プロトン化された分子種の構造」(岡山大・歯)○正村眞佐雄

第2日 12月6日(火)

9:00 - 12:05

- 6S14「Lead化合物再構築(Lead Reconstruction)の試み(I)ピリドンカルボン
酸系抗菌剤(IV)」(富士通株式会社)○湯田浩太郎・井関京子・樋高 透
- 6S15「キノロン系抗菌剤の8位置換基の立体構造と活性」(中外製薬・探索研究
所)○大田雅照・古賀 弘
- 6S16「キノロン系抗菌剤の6位置換基の立体構造と活性の関係」(中外製薬・
探索研究所)○古賀 弘・大田雅照
- 6S17「ピクリスチンとの併用によるジヒドロピリジン誘導体の抗腫瘍活性に関
する定量的構造活性相関」(京大・農)○吉田洋司・赤松美紀・藤田稔夫
(日研化・大宮研)鈴木健一・木上 昭(大分医大・生化)菊池淳子・河野
公俊・桑野信彦
- 6S18「抗アレルギー作用を有するDimethylsulfonium化合物の構造活性相関」
(大鵬薬品)○多田幸雄・山脇一郎・松浦直資・安本三治(岐薬大)堀 幹夫
・江田昭英
- 6S19「抗潰瘍作用を示す新規な1-ベンジル-4-ピペラジン酢酸誘導体の構造
活性相関」(鐘紡・薬品研究所)大高 博・○吉田健二・鈴木健司
- 6S20「抗菌活性を有する1-置換-cis-2-(1H-1,2,4-トリアゾール-1-イル)シク
ロアルカノール類の定量的構造活性相関」(塩野義・油日ラボ)○片岡隆博・
早瀬善男(塩野義研)江角清志(京大・農)藤田稔夫

13:15 - 16:20

- 6S21「重ね合わせとリセプターマッピングのためのプログラムRECEPSの改良とそ
の応用」(東大・薬)○加藤祐一・板井昭子
- 6S22「トリプシン・阻害剤複合体の分子動力学および結晶学的研究」(東大・薬)
○富岡伸夫・板井昭子

- 6S23「人工知能システム(ANALOGS)によるチオールプロテアーゼ阻害剤の解析」
 (東京農工大・工) 後藤教彰・佐藤克則・安川民男(大正製薬・総研)○角谷
 重幸・米田茂隆・北村一泰・定留孝尚
- 6S24「PLS法によるエステラーゼ基質の構造-活性相関」(豊橋技科大・大鵬
 薬品・住友化学)○宮下芳勝・大隈信之・多田幸雄・高山千代蔵・佐々木慎一
- 6S25「ファジィ適応最小二乗法とQSARへの応用」(北里大・薬)○森口郁生
 ・広野修一・劉 謙
- 6S26「回帰判別分析法の改良に関する二、三の試み」(阪大・薬)○高木達也・
 岩田尚子・真鍋美香・井崎仁史・藤原英明・佐々木喜男
- 6S27「置換基エントロピー定数の推算」(近畿大・薬)○川木秀子(阪大・薬)
 佐々木喜男・藤井志保・升田史佳・高木達也

16:30 - 17:30

特別講演I「QSARパラメータ σ_s^0 及び μ^2/α の設定とその有効性」
 佐々木喜男

第3日 12月7日(水)

10:00 - 11:40

- 7S28「会話型コンピュータグラフィックスを用いたフェロセン誘導体のアルコール
 脱水素酵素活性部位へのドッキング」(工技院・微工研)○上林正巳・山崎
 幸苗(有)分子)藤田忠男・細野邦昭
- 7S29「薬物-受容体モデリングに基づいた医薬品開発 -レニン阻害剤-」
 (キッセイ薬品・中研)○赤羽健司・上條哲聖・原田 弘・久保田哲弘・飯塚
 欣二(京薬大)木曾良明(北里大・薬)梅山秀明
- 7S30「タンパク質のモデリング過程における側鎖の迅速配座決定法の開発」
 (住友製薬)○植木靖之(北里大・薬)梅山秀明
- 7S31「タンパク質の疎水性コアの抽出と視覚化」(微生物化学研究所)○梅沢
 洋二(北里大・薬)梅山秀明

13:00 - 14:15

- 7S32「アミノ酸配列の類似性を利用した蛋白質ドメイン領域の推定」(出光興産)
 ○角 一雄・依藤敏明・吉川信之(京大・化研)西岡孝明・小田順一
- 7S33「モレキュラーダイナミックス法によるプロテインのミュータントモデリン
 グと構造活性相関」(有)分子)○藤田忠男
- 7S34「類縁蛋白質の自動的モデリング法の開発」(北里大・薬)○金子寛生
 (日本電気・情報処理装置第一システム)曾根田雄一(北里大・薬)梅山秀明

14:25 - 15:25

特別講演Ⅱ「タンパク質・核酸の生理機能データベースと分子設計」(京大・化研) 金久 實

参加登録予約締切 11月19日(土)

参加登録費 予約5,000円 当日6,000円

懇親会 12月6日(火)17時40分から京都教育文化センターで、第11回情報化学討論会と合同で行います。会費は予約、当日とも4,000円(当日は人数に余裕があれば受付けます)。

参加登録申込方法 当シンポジウムまたは第11回情報化学討論会のどちらか一方に登録して下さい(両方に共通です)。予約参加登録は1人毎に1枚の郵便振替用紙(郵便局に備え付け)を使い、5,000円(登録のみ)または9,000円(懇親会を含む)を、郵便振替口座番号 京都6-5578 郵便振替口座名称 情報化学構造活性相関シンポジウム実行委員会の口座にお払い込み下さい。なお、講演要旨集は当日渡しになります。

問い合わせ先 606 京都市左京区北白川追分町 京都大学農学部農芸化学科 岩村 俊(電話(075)753-6116)

* * * * *

本誌への寄稿のお願い

* * * * *

* * * * *

* 本CICSJ Bulletinでは、部会員の方々の寄稿をお待ちしております。 * *

* 本誌に相当と思われる原稿を出来ればワープロ原稿(A4またはB5)にてお送り下さい。 * *

* 会員広場への投稿或いは海外で開催されるシンポジウム等のニュース・予告などでも結構です。 * *

* 尚、原稿締切日は発行月(奇数月)の10日です。 * *

* 情報・原稿の送付先 ㊟101 東京都千代田区神田駿河台 1-5 * *

* 社団法人 日本化学会 情報化学部会 事務局 * *

* 電話 (03) 292-6162 * *

* * * * *

第3回化学PCソフトウェア研究討論会

主催 化学PC研究会

共催 日本化学会・日本化学会情報化学部会ほか

日時 11月14日(月)～15日(火)

会場 姫路工業大学(姫路市書写2167, 電話(0792)66-1661)

[交通] 姫路駅前(城側)バスターミナル神姫バス9番乗場から横関経由一書写西住宅・刀出・工大・古瀬畑・グリーンハイツ・パースタウン・荒木各方面行で姫路工大前下車徒歩約5分。

第1日(11月14日) 午後

実行委員長挨拶 三軒 齊 (13:00-13:05)

一般発表 概要説明(口頭) (13:05-14:00)

デモンストレーション (14:00-15:30)

1p01 薬剤師国家試験演習プログラム(神戸学院大薬)○福井 巳芳

1p02 高温超伝導のCAI(半導体エネルギー研)○宮永昭治

1p03 化学実験指導のためのソフトウェア(中和滴定)の開発(東海大理)北原滝男・○及川義道・柳沢篤寛・高野二郎・光澤舜明

1p04 平衡電位の測定実験のシミュレーション(琉球大理)

○上原與盛・日原直洋

1p05 パソコンによる物理化学実験演習(福井高専)○吉村 忠与志・小林弘明

1p06 化学教育の改善のためのソフトウェアの開発(3)分子振動の動的表示(埼玉大理)○黒石佳伸・下沢 隆

1p07 立体化学の学習用ソフトウェア(香川医大)○獅々堀彊・倉橋研吾

1p08 パソコンによる計測・制御実習システム(明石高専)

○山岡 修・松永公廣

1p09 プラベ格子の立体視表現とラウエパターンのシミュレーション(2)(大阪市大原研・島根大教育)○真野倅一・神志那良雄

1p10 マイクロコンピュータによる分子設計システムMMHS(2)(群馬大教養)○中田吉郎・藤沼一信

1p11 分子モデルと分子計算(大阪市大理)○福代 誠・北浦和夫・吉田潤一

特別講演 (15:40-17:00)

CD-ROMからCD-Iへ:CAIシステムの現状(姫路独協大)西田英郎

懇親会

(17:30-19:00)

第2日(11月15日) 午前

一般発表 概要説明(口頭) (9:30-10:30)

デモンストレーション (10:30-12:00)

2a01 原子吸光分析のデータ処理プログラム(姫路工大工)

○熊谷 哲

2a02 コンピュータを用いるポーラログラフイー(立命館大理工)○白石晴樹・高橋玲爾

2a03 化学発光検出器データ処理(大阪府大農)○和田野晃

2a04 バイオセンサとパソコン(三重大生物資源)○田口 寛

2a05 検量線法による化学分析プログラム(公害資源研)○土屋健太郎・大屋正明・宮寺達雄

2a06 灯油ガスクロマトグラムの類似性評価への応用(科学警察研)○佐藤正弘・萩本安昭・木下勝博・阿部博

2a07 GC-FIDクロマトグラムからの沸点分布曲線の作成(日本自動車研)○秋山賢一・加地浩成

2a08 HPLCのコンピュータシミュレーション:遺伝子のHPLC(大分大教育)○馬場嘉信

2a09 パソコン用のHPLC故障診断エキスパートシステム(長岡高専)○関沢恒男・森永俊幸・石山康史

2a10 パソコンによるX線回折装置の制御とデータ解析(東京高専)○西宮辰明・村瀬高志

2a11 FFTとMEMによるNMR・NQR用時系列データ処理システム(大阪市大原研・阪大教養・阪大理)○真野倅一・江口太郎・中村巨男

2a12 分子表面積・体積計算ソフトの改良(函館高専)○長尾輝夫

午後

一般発表 概要説明(口頭) (13:00-14:00)

デモンストレーション (14:00-15:30)

2p01 図形処理機能を持つグラフィックパソコン端末(八戸工大)○田中 昇

2p02 水酸化物フロック形状の画像解析プログラム(大阪府大工)○荒谷敏朗・藤井達也・森川利哉・宮南 啓

2p03 マイコンによる分子構造の生成(一橋大)○矢野敬幸・尾崎成子

2p04 コンピュータで分子の立体構造を作る(山形大教育)○阿部昭吉

2p05 スキャナー利用による化学構造式の入力および化合物スケッチングシステム(システム)○伊賀祐一・上田朋子・酒井義博

2p06 有機無機化合物の簡易な構造式作画プログラム(国際基督教大理)○吉野輝雄

2p07 タンパク質立体構造図示プログラムMODRAST-Pの機能拡張(姫路工大工)中野英彦・○川島 剛・高谷省悟・山名

一成・三軒 齊

2p08 光ディスクを用いたタンパク質立体構造データベースの
検索・図示システム（神戸学院女子短大・姫路工大工）

○中野 修・中野英彦・篠倉 匠・山名一成・三軒 齊

2p09 CD-ROMを利用した蛋白質立体図鑑（システム・姫
路工大基礎研）○伊賀祐一・酒井義博・樋口芳樹・安岡則
武

2p10 立体スコープを用いた分子模型の三次元重ね合せ（三菱
化成生命研）○永井右近

2p11 C言語による分子構造表示プログラムの開発（埼玉大工）
時田澄男・○杉山孝雄

2p12 分子軌道の図示（兵庫教育大）○木原 寛

シンポジウム

（15:40-16:40）

化学パソコンソフトウェアの流通と化学PC研究会の役割
参加登録費（要旨集代を含む） 正会員：3,000円、学生会員：
1,500円、非会員：7,000円

懇親会費 4,000円

参加申し込み方法 葉書に①氏名、②所属、③連絡先（〒、電
話番号）、④懇親会参加の有無を明記の上下記あてお申し込み
ください。

申し込み先 〒671-22 姫路市書写 2167 姫路工業大学応用化
学教室 中野英彦（電話（0792）66-1661 内線325）

「Gordon Research Conference に参加して」

呉羽化学工業(株) 朝永 惇

1988年Gordon Research Conference on Computational Chemistry は7月4日から7月8日に開催された。会の性格上、詳細を具体的に紹介することはできないが、その印象を紹介することにする。まず参加者であるが、総数 約150名、その内、大学からが50%、企業からが35%、政府関係機関からが15%であり、海外(米国以外)からの参加者が約15%とのことであった。150名の他に 約80名が waiting list 上にあると聞く程盛況であった。

演題を大まかに分けてみると molecular dynamics が中心的であり、何らかの形で関係しているものが40%近くあった。macromolecule の simulation が中心であったが、酵素のみならず、脂質二重層あるいはミセルも対象として取り上げられていた。原子数25,000程度までが対象として可能になってきており、computer power の発展を実感した次第である。

次に molecular mechanics 関係では、biological active conformation を conformational analysis により求め、異種骨格で同様の activity を有する分子の設計が試みられていた。また比較的 low molecular weight の host-guest の binding energy を詳細に評価すること等が発表された。

MM にしても ND にしても使用される力場が結果を支配することにもなるが、力場の改良も試みられており、実測値と計算値により決められた赤外スペクトルのための力場を MM 力場に変換する方法が確立されつつあるようである。また 種々の力場の相互変換、あるいは力場記述の統一 format の提案がいくつか poster session で見られた。

molecular modelling 分野では macrocyclic compound の conformation を求める新しいアルゴリズムの発表や、結合表、原子種表から実測構造データベースを参照して三次元構造を発生させる expert system 的手法の発表があった。

distance geometry 法に関連するものでは、NMR の解析のみならず数学的手法として、環状構造の conformation 解析や、酵素と阻害剤の docking study 等 制約がある条件での分子構造の解析に応用されていた。

最後に、molecular orbital による解析では、semiempirical 法による反応の transition state の詳細な解析についての発表があり、transition geometry に関しては ab initio 法よりよいとのことであった。また ab initio 法により求められる諸量について計算レベルと精度に関する発表があった。

computational chemistry の応用対象としてまだ生体系が中心であるが、物性(例えば critical properties)の推定 あるいは有機金属、固体を対象とすることが手掛けられ始めているようである。

文 献 紹 介

TETRAHEDRON COMPUTER METHODOLOGY

1988年第1卷1号 发表题目、著者、頁

SCORE: A program to explore the SCOpe of a given intramolecular Reaction. How to find systematically the relevancy of a transform to various classes of structures. Application to the De Mayo reaction, *R. Barone, M. Arbelot and M. Chanon*, p. 3

REACTION PLANNING: Computer-aided reaction design, *Rainer Herges*, p. 15

Computer-assisted organic synthesis design and reaction prediction system, "ALPHOS", *Kimiko Funatsu and Shin-ichi Sasaki*, p. 27

Automatic perception of reactivity characteristics of molecular structures directed to the planning of organic synthesis, *Kimiko Funatsu, Carlos A. Del Carpio and Shin-ichi Sasaki*, p. 39

Automatic recognition of reaction site in organic chemical reactions, *Kimiko Funatsu, Tomoaki Endo, Norio Kotera and Shin-ichi Sasaki*, p. 53

An expert system for chemometrics-based optimization in chemistry, *Mario Marsili*, p. 71

SHADEMOL: an algorithm for presentation of three-dimensional structures on a laser printer using depth-shading, *Mathew Hahn and W. Todd Wipke*, p. 81

REFFORM: an automatic reference and bibliography formatting system, *W. Todd Wipke*, p. 87

Contents of Disks 1 to 4

Disk 1: ASC II files of each manuscript by author; bibliography files for Hahn and Sasaki manuscripts; editorial

Disk 2: Chem Text[®] document files for Chanon, Marsili and Herges papers

Disk 3: SCORE program and reference manual

Disk 4: SHADEMOL subdirectory: SHADEMOL.COM program; SHADEMOL.FOR source code, MOL.A, MOL.AND COMB.MOL molecule files; REFFORM.MCR macro to convert manuscr. NTS into ChemText[®] format; REFFORM.COM automatic reference numbering and formatting system; INSTR.DOC instructions to authors; AUTHORS subdirectory: TCMFORM.DOC template, ruler sketches, TCM.MCR macro for conversion of ASC II format Chem Text[®] format, and METAFORM.COM transform Chem Text[®] MetaFiles

QUANTITATIVE STRUCTURE ACTIVITY RELATIONSHIPS

1988年第7卷第2号 发表题目、著者、頁

Structure-Molar Refraction Relationships of Alkylgermanes Using Molecular Connectivity, *E. J. Kupchik*, p. 57

QSAR Studies of Mitentidine and Related Compounds, *G. M. Donne-Op den Kelder, E. E. J. Haaksma, M. W. G. van der Schaar, D. M. J. Veenstra and H. Timmerman*, p. 60

Solubility Properties in Biological Media. 12. Regarding the Mechanism of Nonspecific Toxicity or Narcosis by Organic Nonelectrolytes, *M. J. Kamlet, R. M. Doherty, M. H. Abraham and R. W. Taft*, p.71

Quantitative Structure Activity Relationships in Insecticidal Pyrethroid Ethers, *D. A. Winkler, G. Nolan, W. M. P. Johnson, C. T. F. Virgona and K. E. Jarvis*, p.79

Structure-Activity Relationships for Unsaturated Dialdehydes. 2. A PLS Correlation of Theoretical Descriptors for Six Compounds with Mutagenic Activity in the Ames Salmonella Assay, *L. M. Nilsson, R. E. Carter, O. Sterner and T. Lijefors*, p.84

Abstracts of Publication Related QSAR, P.93

JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN

1988年第1卷4号(1月) 论文题目、著者、页

Symposium Overview, Minnesota Conference on Supercomputing in Biology: Proteins, Nucleic Acids and Water, *George L. Wilcox, Florante A. Quijoco, Cyrus Levinthal, Stephen C. Harvey, Gerald M. Maggiora and J. Andrew McCammon*, P.271

Future in biomolecular computation, *E. Wimmer*, p.283

Brownian dynamics simulation of protein association, *Scott H. Northrup, J. Alan Luton, Jeffrey O. Boles and John C. L. Reynolds*, p.291

Computer simulation of biological interactions and reactivity, *J. J. Wendoloski, Z. R. Wasserman and F. R. Salemme*, p.313

Molecular modeling of protein structure and function: A bioinformatic approach, *Michael N. Liebman*, p.323

1988年第2卷1号(4月) 发表题目、著者、页

Prediction of the three-dimensional structure of the enzymatic domain of t-PA, *A. Heckel and K. M. Hasselbach*, p.7

MENTOR, a database system for the storage and retrieval of three-dimensional molecular structures and associated data searchable by substructural, biologic, physical, or geometric properties, *Yvonne C. Martin, Elizabeth B. Danaher, Catherine S. May and David Weininger*, p.15

Forces in molecular recognition: Comparison of experimental data and molecular mechanics calculations, *J. P. Walther, J. G. Vinter, A. Davis and D. H. Williams*, p.31

A molecular graphics study exploring a putative ligand binding site of the β -adrenoceptor, *Ad P. IJzerman and Herman W. Th. van Vlijmen*, p.43

Molecular modeling and dynamics of neuropeptide Y, *Alexander D. Mackerell Jr.*, p.55

Orientation and structure-building role of the water molecules bound at the contact surface of the dihydrofolate reductase-methotrexate complex, *P. Nagy*, p.65

CICSJ Bulletin

Published Bimonthly by Division of
Chemical Information and Computer Sciences
The Chemical Society of Japan

人工知能 特集号II

日本化学会
情報化学部会
Volume 6, Number 6
November 1988

目 次

特集：人工知能

ESツールについて.....	宮原 显中	1
ツールメーカーにおけるAIの現状.....		2
原稿執筆者連絡先.....		36
特集後記.....		39

部 会 行 事

「化学者のためのパソコン講習会」報告.....	高山 千代蔵	40
-------------------------	--------	----

年 会 報 告.....		41
--------------	--	----

文 献 紹 介

Journal of Chemical Information and Computer Sciences (Vol. 28, No. 3).....		43
Journal of Computer-Aided Molecular Design (Vol. 2, No. 2).....		43
Journal of Molecular Graphics (Vol. 6, No. 3).....		44
Computers & Chemistry (Vol. 12, No. 4).....		44

国 内 の 動 き

日本薬学会第109年会.....		46
コンピューターケミストリーシステム一覧.....		47

海 外 動 向

Meetings.....		51
---------------	--	----

ESツールについて

宮原是中 (三井東圧化学㈱)

前号でエキスパートシステムツールuser側の特集をした。今回はツールメーカー側の応用を掲載することにする。AIツールの市場は1987~1992年率平均40%の割合で成長するといわれている有望市場である。それを狙って、それぞれに特化したツールが開発されている。

問題によって、分析型(診断、相談、評価、解釈)、合成型(設計、計画)、制御型(監視、制御)；推論の向きにより、前向き、後向き、複合型；のせるハードウェア別で、メインフレーム、ミニコン又はワークステーション、パソコン；知識の深い(原理原則、基本法則、システムの構造と動作に基づく知識)、浅い(IF~THEN)；その表現方法により、ルール、フレーム、意味ネット、スクリプト；又、実現レベルで実務向き、入門用、その他オブジェクト指向等々

以下ツール名のみ列挙する。

Acekit, ACLS, AGE, AGE/F, AI PLAN TELL, AID-1, Aion, AI-007, AL/X, apes, apes2, ARBY, ARCH-1, ART, Archie, Arity Expert Development Package, BABYLON, Brains, CEXPERT, CL, COMEX, Super COMEX, Tiny COMEX, CONSIST, CSRL, DELTA, DSPL, DUCK, EASE+, EIXAX, EMYCIN, ERS, ESE, ESHELL, ESHELL/FM, ESHELL/SB, ESHELL/X, ESIE, ESNIC, ESP/ESP Advisor, ESPARON, ES/KERNEL, EXCORE, Expert Edge, EXPERT ENGINE, EXPERT-U, Exper OPS5, EXSYS, EXTKERNEL, μ -EXTKERNEL, EX-TRAN1, EX-TRAN, EXTRAN7, EUREKA, EUREKA-II, First Class, FMS, FRATS Frame Tutor System, FRUITAX, Fusion, GEN-X, GEST, Goldworks, GURU, HPGS, HP-RL, HUMBLE, Hyper Brains, IBMレゾナール, IDKB, Inference Manager, Insight2, IN-ATE, INTELLIGENT CODEBOX, IREX, IRIS, KAS, KBMS, KBMS/ELIS, KBMS/DG, KBMS/PC, KC, KDL, KEE, KES, KES II, KEYSTONE, Kiss, KMS, Knowledge Craft, Knowledge Development System, K-PSL, K:base, Level5, LOOPS, Mandala, MECS-AI, MENDEL, MICCS, MIRROR, MKS, MONKS, MYEXPERT, M.1, NEXPERT OBJECT, OPS5, OPS5e, OPS5+, OPS83, ORBS, Personal Consultant, Personal Consultant PLUS, PICON, PLOTX/PROPEL, POPSYS, PRISM, PROBJ, PROFESSIONAL, Reveal, RLL, ROSIE, Rulemaster Rule Runner, SAGE, Savoir, Savvy, SDE1.0, Series PC, Shell-KABA, Shell-KABA II, Shell-Friday, Shell-Sunday, SMI/MARKS-II i, SMI/MARKS-II RT, SUPER BRAINS/X, Super Expert Plus, S.1, TEXPERT, TIMM, TOPSI, UNITS, Visitexs, VM/ESE, VP-Expert, WING, Xi, XLAI, XLEX, XPT, XPT-II, XPT/AI Ⅱ, Xsys, ZERO, ZBUS, Φ NET, コギト, 創玄/大創玄, 脳力男(めお), ルーランナー

ともあれテレビが家庭に2台以上入っているように、AIツールも会社に複数導入して効率的活用を考える時代になって来たと言える。文献として、

西垣 通 AI人工知能のコンセプト 講談社現代新書 1988年10月の巻末文献が大変参考になるので付記しておく。

「ツールメーカーにおけるAIの現状」

目次

メインフレーム

日本アイ・ビー・エム(株)	占部 薫	3
日本電気(株)	吉田 純	4
(株)日立製作所	吉村紀久雄	5
富士通(株)	岸田 明	6
(株)紀伊國屋書店	岩澤まり子	7

ワークステーション

NTTデータ通信(株)	岩下 安男	8
(財)電力中央研究所	寺野 隆雄	9
(株)東芝	河野 毅	10
ニチメンデータシステム(株)	中村 重郎	11
日本デジタルイクイップメント(株)	武藤 猛	12
日本ビジネスオートメーション(株)	細川 昭男	13
富士ゼロックス(株)	尾山 伸一	14
富士電機(株)	萩原 賢一	15
富士電機エンジニアリング(株)	関本 雅之	16
松下電器産業(株)	野口 正弘	17
三菱商事(株)	池谷 裕之	18
(株)三菱総合研究所	小林 慎一	19
三菱電機(株)	水野 裕	20
(株)明電舎	松木 直彦	22
横河電機(株)	平田 康郎	23

パソコン

岩崎技研工業(株)	繁 周作	24
エー・アイ・ソフト(株)	林 正明	25
エーエスアールインターナショナル(株)	平田 昭子	25
(株)構造計画研究所	澤飯 祐子	27
(株)シーイーシー	久保山誠士	28
システム総合開発(株)	稲林 昌二	29
(株)情報数理研究所	大野泰治郎	30
住金システム開発(株)	中村 徹	31
センチュリリサーチセンタ(株)	浜口 顕行	32
センチュリリサーチセンタ(株)	福森 利明	33
(株)第一コンピュータリソース	佐藤 文臣	34
(株)知識工学研究所	松本常三郎	35

IBMのAIおよび実用事例

日本アイ・ビー・エム(株)

AIサポート・センター 占部 薫

弊社では、エキスパート・システムの基本技術である知識ベース・システム手法が90年代の情報処理システムの中で非常に重要なものになるとの認識から、1昨年来よりAI市場への本格的参入を表明し、6種類のAI関連製品の発表、10種類の製品の販売を行ってきた。組織上もAIサポート・センターを設置し、製品販売・顧客アプリケーション開発のサポート体制を充実させてきた。

弊社製品の特長は次の三点に要約される。第一点は、汎用コンピュータによる開発・実行を目的としていること。第二点は、アプリケーションの多様化および開発担当者の拡がりに対応して、業務専門家(エンド・ユーザー)・情報処理システム部門・AI研究者のそれぞれに向けた幅広い製品ラインアップを持っていること。第三点は、既存システムとAIとの統合化を狙っていることである。

既存の情報処理システムとAI技術との統合化をはかることがIBMの提唱する実用的AIの基本コンセプトである。弊社では、このようなタイプのアプリケーションを知識ベース・システムと呼んでいる。

弊社の知識ベース・システム開発支援ツールは、既存システムとの統合化が容易に実現できるように配慮されている。例えば、汎用シェルであるESEは、リレーショナル・データ・ベースへのダイレクト・アクセス機能および従来型高級言語とのインターフェース機能が完備されている。また、開発支援ツールであるナレッジ・ツールは、PL/1言語の拡張版であり、従来型アプリケーションにルール・ベース型処理を付加することができる。当然、PL/1のデータ・ベースへのアクセス機能、他言語インターフェース機能が利用できる。

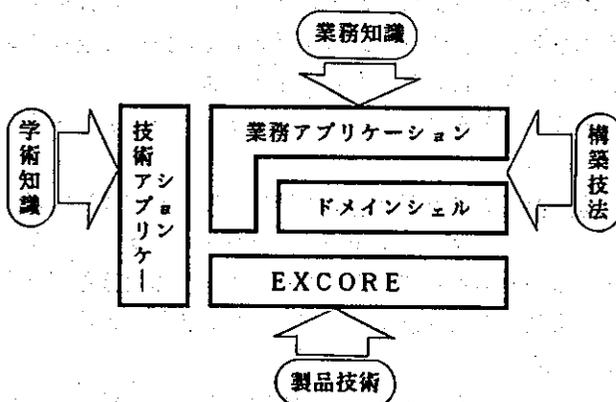
実用的な知識ベース・システムの好例として、製鋼自動スケジューリング・システムがある。('88年2月発表: NKK株式会社殿、エヌ・ケー・エクサ株式会社殿および日本アイ・ビー・エムの共同開発) 製鋼プロセスにおける、鋼種別に異なる複雑な処理順序および機械運用上の各種制約条件を満足するフィジブルな生産スケジュールを自動作成する機能がある。従来、計画作成の専門家が行っていた手作業を機械化したもので、計画作業時間の大幅短縮化、質の高いスケジュール作成が可能になる等の成果が得られた。計画作成の専門家の用いていたヒューリスティックスを約130のルールにまとめ、計画型問題としてモデル化したものである。

このシステムには、2つの重要な特長がある。一つは、最適なプラン作成の代わりに、フィジブルなプランを短時間に作成することを狙った現実的なアプローチを採用したことである。そのために、グラフィックス画面上のスケジューリング・チャートを用いて、専門家がマニュアル修正を加えることができるような対話形式のインターフェースを用意している。二つ目は、基礎データであるロット・データおよび機械状況データが、生産管理用のデータ・ベースから生成されたファイルを用いてオンライン・リアル・タイムに読み込まれていることである。汎用機上で実現されたことによってこのような既存システム情報が有効に利用できた訳である。このようなスケジューリング・システムは、化学装置プロセスにも応用可能と考えられる。

日本電気㈱ 装置システム事業部
販売促進部 吉田 純

最近のハードウェアの進歩は、人工知能（AI）を化学業界においても身近なものとしつつあります。特に、32ビットのエンジニアリングワークステーション（EWS）の登場は、専用ハードが必要とされた数年前に比べて格段に経済性、応用性、性能を向上させました。日本電気では、当初汎用コンピュータACOSシリーズで実現していたAIツールをEWSにまで広げ、利用者の便を図ってきました。また、化学・医薬分野において、お客様及び大学の先生方の御協力のもとに数多くのシステムを実現してきました。

日本電気では、AIの基本ツールとしてEXCOREというフレーム型のオブジェクト指向言語を提供しています。EXCOREはスーパーコンからEWSまで幅広いハードウェア上でサポートされ、FORTRANやC言語とのインタフェースが取れる、リレーショナルデータベースを利用できるなど数多くの特徴を持っています。



日本電気におけるAI製品体系図

しかし、ツールだけでは実用的なシステムの構築は不可能であり、そこにはシステムを作る上での業務知識及びシステム構築技法が必要となります。日本電気では、実際に化学業界において、設備の故障診断、プラントのスケジューリング、船積み計画、工程設計などを手掛けてきました。興味深い利用例として、製品改善に際しどのような実験を行うと効果的かを推定するシステムのように、研究者のノウハウをシステム化した例も有ります。こうしたお客様との共同開発での経験をもとに、日本電気ではAIシステムをより使い易いものとするため、診断型および計画型のドメインシエルを今年度中に製品化していく計画です。

さらに、化学分野で利用頂けるシステムとして、学術的ノウハウを取り込んだシステムも提供しています。例えば、蛋白質の三次元構造を推定し、受容体理論に基づき医薬品の設計を支援するBIOCES、紙で保存されていたスペクトル情報を機械認識するスペクトルチャートリーダ、スペクトル特性の類似した物質を検索するSPECTRAなどを製品化してきました。現在、化学者の書いた手書きの化学構造式を読みとる装置なども研究開発中です。

日本電気では今後とも、化学分野において御活用頂けるAIシステムを製品化することにより化学分野の進歩に少しでも貢献出来ればと努力して行く所存です。

エキスパートシステム構築ツール ES/KERNELの紹介

㈱日立製作所ソフトウェア工場
AIプログラム部 吉村紀久雄

日立製作所では、約10年前からロボット、パターン認識、自然言語処理などの各分野においてAIの研究を開始した。1980年には知識工学の研究が推進され、応用面では計算機室内レイアウトCADシステム、配管ルーティングCADシステム、ファジィ論理によるコンテナクレーンの自動運転システムなどすでに多くの実用システムを構築してきた。

エキスパートシステム構築ツール ES/KERNELは、このような実用システムの実績をもとに、ナレッジエンジニアを強力に支援して本格的なエキスパートシステムを構築できるようにしたソフトウェアである。

ES/KERNELは、以下の3つの特徴を持っている。

(1) ハイブリッドタイプの知識表現と高速推論機構

プロダクションルール、フレーム、オブジェクト指向を融合した記述力に富む知識表現を提供している。また、ルールの実行を制御するメタルール、複数の知識ソースを統合して大規模な知識ベースの構築を可能にする多階層知識ネットワークが使用できる。

RETTEアルゴリズムを改良した高速推論アルゴリズム、複数のエキスパートシステムを黒板を介して協調させる多階層協調推論機構、さらにホストコンピュータ上の推論機構により、大規模な知識ベースを用いた高速推論を実現している。推論方式は前向き推論を基本とし、仮説検証用の後向き推論機構も提供している。

(2) 操作性の優れた高効率開発環境

知識表現言語の文法を組み込んだ知識エディタ、静的に知識を検証する知識ブラウザ、推論を実行しながら動的に知識を検証する知識デバッガによって、ナレッジエンジニアは知識ベースの作成、検証、保守を効率的に行うことができる。

また、専門家自らが知識を対話形式で保守できるようにする知識テラ、エンドユーザーインタフェースの作成を効率化するUIビルダによって、専門家にとってもエンドユーザーにとってもフレンドリなエキスパートシステムを開発することができる。

(3) 既存システムとの連携機能

C言語で記述した外部プログラムからES/KERNELを実行したり、逆にES/KERNELからC言語で記述した外部プログラムや、意思決定支援システムEXCEED2のコマンドを実行することができる。

また、既存システムで作成した表形式のデータを知識化して推論に用いたり、推論結果を表形式のデータに変換して既存システムに渡すこともできる。ホストコンピュータ上の大規模データベースも推論に用いることができる。

富士通のAIに対する取り組み（製品体系と事例）

富士通(株)システム本部 岸田 明

I. 製品体系

AI実用化時代を迎え、当社は昭和62年7月にAI分野における製品・サービス・研究開発の新体系「KSA (Knowledge Systems Architectures and Applications) 知識情報システム」を世界で初めて確立し発表した。

当社は昭和59年7月にAI専用プロセッサ「FACOM-α」を発表して以来、エキスパートシステム構築支援ソフトウェア「ESHELL」や自動翻訳システム「ATLAS」など、各種の「知識情報システム製品」を製品化してきており、特に「ESHELL」は800コピー以上出荷され、多くのお客様で御好評を頂いている。

当社はこのような状況の中で、知識情報システムを更に普及させ実用化していくためには、個別製品の対応だけではなく、サービスから研究体制まで含めた、総合的な取り組みが必要であると考え「KSA知識情報システム」を体系化した。

1. KSAのねらい

- ①統一されたアーキテクチャのもとに開発されたAI関連製品（言語・ツール・アプリケーション）を、パソコンからプロコン、汎用コンピュータまで一貫して提供する事により、容易にかつ柔軟にAIシステムを構築することを可能とする。
- ②AI関連製品により、既存の情報通信システムに知識情報システムを融合させ、システムを高度化するとともに、人間にとって使いやすいシステムに変革する。
- ③開発手法の提供から言語・ツールの教育、技術相談まで、一貫したサービス体制によりお客様における知識情報システムの構築を全面的に支援する。
- ④内外の専門知識を有効に活用する研究開発体制を整備することにより、情報通信システムの新分野を開拓する。

2. KSAの体系

①KSA製品

KSAツール・・ESHELLファミリ (ESHELL, ESHELL/X, ESHELL/PM, ESHELL/SB) LISPL, PROLOG, ATLAS等

KSAアプリケーション・・コンピュータの運用支援、プログラム開発支援、OA通信等の業務支援アプリケーション

- ##### ②KSAサービス・・お客様自身による知識情報システムの構築を容易にする事を目的として、富士通では社内外の豊富な実績を基に開発した「開発手法」、「言語・ツールの教育」、「技術相談」といった一貫した支援体制を「KSAサービス」として提供する。

- ##### ③KSA研究開発・・当社社内では、全社的なAI開発推進組織を設立し、ノウハウの蓄積と流通を図っている。また、国内外の大学・研究所と並列処理、認知問題等の基礎研究分野での共同研究を推進している。さらに実用システム開発に関する技術研究分野では、お客様との共同研究を推進している。

II. 化学分野における事例

AIの開発状況は昨年から大きな変化が現れて来ている。富士通のAI商談状況によると、61年9月総数199件の中で稼働中14%、構築中21%であったが、63年2月では総数457件で2.3倍の伸びを示しており、なおかつ内訳として稼働中33%、構築中32%とAIが研究段階から実用段階に入ってきていることを示している。この中で製造業は54%と半数以上を占め、また電力原子力7%、流通7%、金融6%とAIが実業界を中心に大きな広がりを示していることが分かる。

また構築されているシステムは、プラントの異常診断、操業支援のような診断型と言われるものから、生産計画、バースプランのような計画型と呼ばれるものまで、幅広くAIが利用されている。特に62年に入ってから、化学分野では生産計画のAI化が大きな流れとなって来ている。以下に当社の顧客でのシステム開発例を示す。

- ①エチレンプラント運転・保守支援システム（大阪石油化学㈱、東洋エンジニアリング㈱）・・・プロセスデータをオンラインで読み取り、運転の異常診断と対処の指示および実行のチェックを行うと同時に、ロングタームの操業データの管理を行う。保全面では、対話形式の異常原因診断のサポートと保全データの管理を行う。
- ②回転機械設備診断エキスパートシステム（旭化成情報システム㈱、旭エンジニアリング㈱）・・・プラントの回転機械から発生する振動を振動測定器で計測し、そのデータに基づきエキスパートシステムで機械の異常原因、異常部位の同定を行う。
- ③石油プラント生産計画エキスパートシステム・原料油を精製加工する際の、2つの加工装置での油種の切り換えスケジュールを作る。
- ④ブレンド計算エキスパートシステム（西部石油㈱）・・・重油の月間生産量に基づき灯油等の基材のコスト、装置の制約条件等を考慮し、適切な月間ブレンド計画（各基材の月間調合比率）を作成する。ブレンド計算はLPで行い、ブレンドの専門化のノウハウは、LP最適解チェック等のルールとしてエキスパートシステム化してある。

DIALOGのエクスパートシステム

朝日新聞伊國屋書店

国際情報部 岩澤まり子

商用オンラインサービスのひとつとして、エクスパートシステムを使用したDIALOG Business Connection (略称 DBC) およびDIALOG Medical Connection (略称 DMC) がある。このDBCとDMCサービスは、米国ロッキード社の子会社であるDIALOG Information Services, Inc. が提供するオンライン情報検索サービスであるDIALOGのひとつのサービスとして利用でき、日本では販売代理店の紀伊國屋書店を通じて利用申し込みをすることができる。

DIALOGは、4種類の基本コマンドを使用して、約300種のデータベース中の情報をオンラインで検索するサービスである。簡単な手順で情報を検索することができるが、検索を専門とするサーチャー以外の人にとっては、簡単なコマンドでも習得は煩わしい。この問題を解消する為にエクスパートシステムが構築され、DBCとDMCとしてオンラインで提供されている。米国では、DBCは1986年、DMCは1987年にサービスが開始されたが、日本では、1987年8月にDBCとDMC同時にサービスが開始された。当初は、DBC・DMCサービスの利用は、利用登録をした人に限られていたが、1988年8月よりDIALOGの全利用者が、登録手続きなしで利用できるようになる予定である。

DBCは、最もすぐれたuser friendlyなオンラインサービスであり、検索性コマンドを使用せずに、メニュー方式でビジネス情報を検索できる。また、情報検索の重要なポイントのひとつである“検索に使用するデータベースの選択”も、検索テーマに合わせて自動的に行われる。特に、ビジネス情報を提供するデータベースが多数あるため、データベースの選択が重要であり、DBCは、このデータベース選択および検索コマンドの使用の観点から、検索者を助ける。また、ひとつ以上のデータベースが選択され、複数の情報が入手できれば、得られた情報の内容を比較検討できる。

化学分野に注目すると、DMCがある。DMCは、医学・薬学・生物学・工学・化学・ニュースなどの分野の27データベースを収録する。DMCは、DBCと比較すると未完成のエクスパートシステムである。検索は、コマンドを使用しない、メニュー方式で行うことができるが、使用するデータベースの選択は、検索者が行う必要がある。また検索は、1データベースずつ進み複数のデータベースを同時に検索することはできない。しかし、表示されるメニューに従い、メニュー番号等を入力すれば、自然とオンライン検索できる様に構成されている。意識せずにブラックボックスとして使用できることが、エクスパートシステムの目標のひとつであれば、DBCとDMCは第一目標は達成したことになる。更に、DMCの改良とデータベース間の重複文献の除去、文献の全文検索等、期待は尽きない。

化学/工学分野の検索性メニュー

```
          DIALOG Medical Connection
          Science/Technology Reference Library
1  SCISEARCH (Science Citation Index) 1984-present
2  CA SEARCH (Chemical Abstracts Service) 1967-present
3  COMPENDEX (Engineering Index) 1970-present
4  INSPEC (Physics, Electronics, Computers) 1977-present
5  NTIS (U. S. Government Reports) 1964-present
```

Enter option NUMBER, or /H for HELP in choosing a DATABASE, or
/M- afor previous menu or /L to logoff:

?

ワークステーション

NTTデータ通信㈱におけるAIへの取り組み

NTTデータ通信㈱
開発本部AI技術担当部長
岩下 安男

NTTデータ通信㈱では、開発本部AI技術担当のサポートのもとに、各事業部でAIシステムの開発に取り組んでいます。

その活動内容は、各業界の企業向けのエキスパートシステムの開発から、新しいAIツールの開発、新技術の調査・研究に至るまで、幅広い範囲に亘っています。

エキスパートシステムの開発については、金融分野を中心としてこれまでに多数のシステムをNTT開発のKBMSやその他のツールで構築しました。このうち、ネットワーク設計支援システム、クレジット入会審査システム、対人損害保険積算システム、決算書問題点発見型システムなどは、新聞紙上やNTTコレクション、AI展等のイベントですでに御存じの方も多いことと思います。特に、決算書問題点発見型システムは実用化システムとして長銀経営研究所から発売して頂いており、金融業界内で好評を博しております。また、本年度早々にはエキスパートシステム開発標準手順STEAD/ESという形でエキスパートシステム開発の経験を集約する等、エキスパートシステム開発の効率化にも努力しています。

技術開発の面では、新しいツールや知識処理パラダイムの開発、KBMSのマン・マシン・インタフェースの改良などに取り組んでおり、昨年はC言語によるAIツールのプロトタイプを開発、既に社内利用を開始しています。

今後はユーザの日常業務の様々なシーンでAI技術が必要とされるものと想定されます。私達としても、日常業務の問題解決にとどまらず、既存技術と融合した統合的知識処理の実現を目指していきたいと考えています。

(財) 電力中央研究所は電力会社が共同で出資している財団である。当所でのAIの研究開発は主に電力関係であり、化学あるいは化学工業へ直接応用されるようなシステム関係は行っていない。そこで、本稿では基礎的な研究成果のひとつである時間関係と因果関係をあつかう推論システムについて述べることにする。⁽²⁾

系統制御やプラント診断を対象とするエキスパートシステムの開発にあたっては、いろいろな場面で時間情報を扱う必要が生ずる。ところが一般に用いられる推論処理の方法では時間変化を伴う事象を処理することはきわめて難しいのが現状である。そこで、IF-THEN-形式のプロダクションルールによる知識表現を拡張して、時間関係と因果関係を同時に処理することが可能な新しいタイプ推論システムを開発した。これにより、たとえば「ある事象Aが起こってその後に別の事象Bが起こっている。従って、事象Cがその間に起こっているのではないか？」というような推論が自然に表記でき、このような推論を組み立てて、事象のシーケンスを再現することができる。

システムは時間空間の前後関係 (before, meets, overlaps, during, starts, finishes, および、これらの逆関係、equals) の13通り〔1〕をもとに推論を進め、事象の前後関係を特定して、事象のシーケンスを再現する。システム構成は、ルールベース、事実ベース、時間区間ネットワーク、推論エンジンからなる。事実ベースには、各事象がどの時間区間で成立しているかが記述されている。また、時間関係ネットワーク上には、各事象に係わる時間区間の間の前後関係が成立していることが分かった場合に、どのような事象が他の事象とどのような時間関係をもって成立するかを記述する。

推論方式は前向き推論を基本とする。条件部に指定された時間関係を満たす事象と各事象の成立する (又は、成立しない) 時間区間を元に、新たな事象の成立/不成立を推論したり、事象間に想定される13通りの時間関係のうち何種類が可能かを限定していく。

参考文献

- (1) Allen, J. F.: "Maintaining Knowledge about Temporal Interval." Comm. ACM, Vol. 26, No.11, PP. 832-843 (Nov. 1983)
- (2) 篠原靖志、寺野隆雄: "時間関係と因果関係を融合して扱うプロダクション・システム" 情報処理学会知識工学と人工知能研究会資料41-7, 1985年7月

東芝のエキスパートシステム構築ツール

㈱東芝 システム・ソフトウェア技術研究所

河野 毅

1. ワークステーション用ツール IREX(Integrated Expert System Building Tool)

東芝ではエキスパートシステムを、家電製品から、大規模プラントまであらゆるシステムに適用すべき技術であると捕え、幅広く技術開発と商品提供を進めている。IREXはこのような多岐に渡る応用分野に適合できるため、強力で柔軟な知識表現・推論方式を備えた、第二世代のエキスパート構築ツールである。

(1) IREXの設計思想

- ①エキスパートシステム開発における段階的拡張を支援する。すなわち、プロトタイプ開発時はまだ推論方式、知識表現方式が固まらないので種々の試みができるよう多種の方式を用意する。一方、実用システム開発時のため、大規模ルールの管理と高速処理を可能とする。
- ②人間の思考の基本である試行錯誤過程を支援できる強力な推論機構を備える。
- ③エキスパートシステムの対象が工学システムの場合、構造はほぼ既知なので、構造的知識の表現に適したフレームをベースとする。その上に経験的知識はルールで、また手続き的知識は従来形プログラミング言語で自由に記述可能とする。
- ④システム開発者に充実したプログラミング環境を提供する。また、エンドユーザにとってフレンドリなマンマシンインタフェースを簡単に実現できるようにする。
- ⑤多数の用途に適用できるよう、シェルの移植性、及び、モジュール化によるカスタマイズの容易さに配慮する。
- ⑥ツール自体をC言語で記述する。多くのツールはLisp等のAI言語で記述されているが、IREXではC言語を採用する。この理由は、推論の高速化、従来言語との親和性及びLisp等に見られるガベージコレクションによる推論の中断の回避である。

(2) IREXの特長

①フレーム形式知識表現

フレームは構造化された静的な知識を表現するのに適しており、IREXでは、その中で使える関係として、上位/下位概念を関係付ける“is-a”関係の他に、ユーザが独自に関係を定義することができる。一方、フレームで動的な情報を扱うために付加手続機能を利用することができる。また、フレームを1つのオブジェクトと考え、オブジェクト指向型のプログラミングを可能としている。

②ルール形式知識表現

If-then形のプロダクション表現をとっているが、IREXの特長として、ルール条件のパターンマッチ部に集合記述を行なうことができる。また、ルールの行動部にC言語で直接記述ができる。

③前向/後向/ハイブリッド推論

IREXは、解を作り出す推論に向けた前向推論、解を検証するのに向けた後向推論、及びこの両者を組み合わせたハイブリッド推論をサポートしており、きめ細かい推論制御機構が構築できる。

④コンテキスト管理機構

前向推論のバックトラック機構を簡単に構築できるための機構であり、仮説推論が可能となる。

⑤推論時のダイナミックインヘリタンス

推論時にもフレーム間の継承関係を生かしており、フレームとルールの真の融合を実現している。

(3) IREXの応用

IREXは汎用のツールであり、多数の社内利用実績を積み、6.2年からは商品発売されている。化学プラントのオンライン診断、生産ラインのスケジューリング、機器配置問題など種々のタイプの問題に柔軟に適用可能であることが示されている。

2. パソコン用ツール MYEXPERT-I

MYEXPERT-Iは、診断用からコンサルテーション用まで幅広い分野向のエキスパートシステム構築ツールである。ユーザがパソコン上で手軽にエキスパートシステムを構築できることをねらいとしている。

(1) MYEXPERT-Iの特徴

①プロダクションルールによる知識表現

If-then形式で知識を表現するので、ルールが単純かつ明確である。

②高速な推論

前向き推論と後向き推論を組み合わせており、ルールはReteネットにコンパイルされるので高速な推論を実現している。

③確率的な診断ルールの採用

確率の概念を導入しているため、因果関係があいまいな場合も推論が可能である。

④豊富な利用形態

MYEXPERT-I単独の利用方法だけでなく他のアプリケーションプログラムを呼び出したり、逆にアプリケーションプログラムからMYEXPERT-Iを呼び出すことが可能である。

⑤再推論機能を導入

推論結果を出した後、一部のデータを変更し、推論の再実行を行なうことができる。

⑥構築支援機能の充実

ルールの視覚的表示、推論の説明機能等、エディタ、デバッグ機能が揃っている。

(2) MYEXPERT-Iの応用

故障診断とコンサルテーション分野を中心に多数の応用事例があり、その一部を以下に示す。

- ・化学プラント診断
- ・設備診断
- ・旅行日程コンサルテーション
- ・自動車購入車種選択コンサルテーション

MYEXPERT-Iは、C言語で記述され、ラップトップパソコンJ-3100等の上で走る。

化学工業分野におけるARTの適用について

ニチメンデータシステム(株)

AI技術課 中村 重郎

ART (Automated Reasoning Tool) は米国Inference 社開発のエキスパートシステム構築ツールで、化学工業分野においても化学プラントのモニタリング、故障診断などのエキスパートシステム作成に用いられています。

化学工業関連のシステム特有の傾向としては、迅速なリアルタイム処理が求められるケースが多く見受けられます。これは製造プラント等の実稼働に密接に連動した推論処理が要求されるためですが、AI技術としての観点からは下記機能が必須となります。

1) AI推論システム内の知識ベースと、各種外部データ(センサ計測データ、人間系からの指示等)の親和性が高いこと。

2) 実稼働ベースの速度に対応できる推論処理パフォーマンスを有すること。

ARTの推論エンジンでは、「データ駆動型推論」メカニズムを用いており、asynchronous-data-input 機能により推論処理サイクルの流れの中に容易にシステム外部のデータを取り込める構造になっています。

実際の適用例としては、国外でのペンタン製造プラントのモニタリング及び故障診断システムにもちいられています。

日本DECのAIへの取り組み

日本デジタルイクイップメント㈱

AIシステム部 武藤 猛

日本デジタルイクイップメント（以下、日本DEC）は、総合コンピュータメーカーとして、VAXシリーズを中心に、顧客のニーズに応える分散型コンピュータシステムを提供し、サポートしている。日本DECにとってAI（人工知能）は、コンピュータをより使い易くするためのソフトウェア技術であり、既存のハードウェアおよびソフトウェア資源と統合化してはじめてAIの効果が発揮でき、実用化が可能であると考えている。

日本DECが販売・サポートするAI関連ソフトウェア製品は次の通りである：

[AI言語] VAX LISP、QUINTUS PROLOG、C-PROLOG
[AIツール] VAX OPS5、NEXPERET/OBJECT、KBMS、ART

VAXのユーザは、テーマに最適な言語/ツールを、これら製品の中から選択できる。また、これらのソフトウェア製品は、従来型言語（FORTRAN、Cなど）で書かれたプログラムやグラフィックス、データベースと容易にインタフェース可能であり、ネットワークを活用した分散型AIシステムの構築も可能である。さらに、顧客が効率よくAIシステムの開発を行うため、教育サービス（KEコースなど）の他、KEコンサルティングも実施しており、AI化のテーマ選定から実用システムの構築/運用までをサポートしている。

化学の分野では、特に米国において、VAX上で開発または運用されているAIシステムの事例が多数ある。たとえばDENDRAL（分子構造推定）、CONGEN（DENDRALの拡張版）、LHASA（反応設計）、MOLGEN（遺伝子情報解析）、SYNCHEM2（有機化合物合成探索支援）、などである。

日本DECにおいては、化学および化学工業の分野で次のようなサポート実績（共同開発を含む）がある：

[化学] 薬処方支援、蛋白構造予測、化合物質検索など
[化学工業] 化学プラント故障診断、高分子化合物の品質管理、生産計画作成支援など

上記のうち、化学への応用は比較的基礎的で、高度な内容なものが多く、実用化にはもう少し時間がかかると考えられる。一方、化学工業への応用は故障診断がすでに実用段階にあり、また生産計画への応用なども実用に近いレベルにある。現在のところ、OPS5により開発されることが多いが、テーマによっては他の言語/ツールが使用されることもある。

「エキスパートシステム開発」上の課題と対応

日本ビジネスオートメーション
研究開発室 細川 昭男

当社におけるエキスパートシステムの開発は、昭和58年度に開始されました。開発の初期段階で、エキスパートシステム開発用のシェルやツールについては自社開発で進めるという方針を定め、「プロダクションルールを中心としたシェル」ならびに「フレームを中心としてプロダクションルールを統合したシェル」を開発、これらを用いて数多くのエキスパートシステムを作成し現在にいたっています。

実際にエキスパートシステムの開発を進める過程でいくつかの開発上の問題を確認しています。実践的なエキスパートシステムを開発するためには、これらの問題を解決する方法論の定式化およびツールの開発が急務であると考えています。ここでは、“機械の故障診断システム”を例にとって、エキスパートシステム開発上の問題点とそれを解決するために当社が考えている対応方法について簡単に紹介させていただきます。

従来から、“機械の故障診断システム”を構築する際には、機械の専門家一すなわち、機械が故障したとき、その状況によって故障部位を的確に判断できる人一人から故障を判断するやり方（知識）を聞き取り（抽出し）、それを知識ベースとして取りまとめ推論を行なわせるやりかたが主流となっています。しかし、このやり方では専門家の知識が十分に取り出せなかったり、知識ベースにとりまとめる際に専門家の判断基準（特にあいまいさについて）をうまく表現できなかつたりする問題がありました。

これらの問題を解決するためには、システムの開発において利用できるものを次の4種類に分類し、それぞれにあった形で開発を進めることが望ましいと考えています。

- ①故障を起こしたときの原因と状況に関する記録が存在する（ある程度の数量）場合
- ②故障を調べるための整備マニュアル等の資料が揃っている場合
- ③機械の故障に関する専門家がいる場合
- ④新規に作成された機械であり、故障を起こした事例がない場合

①については、記録（事例）をもとにして帰納推論を行なうことにより初期の知識ベースをつくります。

②については、整備マニュアル等の資料にまとめられている故障診断方法をもとに初期の知識ベースをつくります。

③については、従来のように聞き取りを中心とした方法で初期の知識ベースをつくりませんが、知識ベースの構築については所定のワークシートを作成していくというウォーターフォールモデルで行い、特にあいまいさの取扱いについてはAHPを用いることにより感覚的にとらえているものをうまく数値に変換します。

④については、機械の設計図をもとにして、個々の部品の起こし得る故障と接続する部品に与える影響をもとに初期の知識ベースをつくります。

①～④のいずれについても作成されるのは初期の知識ベースであり、あとはエキスパートシステムが実稼働中に判断不能な故障にいき当たった場合、それを新たな事例として帰納推論を行なうことにより知識ベースを拡張します。

当社においては、このような形でエキスパートシステムの開発をとらえるとともに、これを実現するためのシェルおよびツールの開発を行なっています。

特定分野専門ツール (Genetic Task Tools)

富士ゼロックス(株) AI 事業部

尾山 伸一

1.はじめに

今AIの世界において、特定の知識の構成及び問題解決法専用の言語、ツールが必要とされてきている。これは、エキスパートシステム構築者がAI研究者からエンドユーザに移行してくることにより、高機能でさまざまな対象問題に適合出来る「汎用ツール」よりも、限定された対象問題にしか適合しないがかわりに非常に開発しやすい「専用ツール」が市場として求められだしたことを意味している。

2.Generic Tasks

Generic Tasksは、アプリケーションの型ごとに最適の知識表現方式と推論制御方式をひとつにまとめたシステムとして表現される。つまり、アプリケーションはいくつかの問題領域(例えば、分類型問題や設計型問題など)に分けられ、この領域ごとに最適された知識表現方式と推論制御方式が決める。これを意識して作成されたものが「Generic Task Tools」とよばれる特定分野専用ツールである。

2.1 CSRL(Conceptual Structure Representation Language)

CSRLは分類型問題に特化した専用ツールであり、作成されるエキスパートシステムは階層構造となる。階層構造で表現される問題に対しては、非常に有効な解決手段を提供しており、医療診断や故障診断に代表されるような診断問題は階層構造で表し得ることが多い。

2.2 DSPL(Design Specialist and Plan Language)

DSPLはルーチン設計と呼ばれるタイプの問題に特化した専用ツールである。ルーチン設計問題とは、設計対象となる具体的なデバイスやシステムについてなど、すでに設計戦略/知識が確立されており、革新的/創造的な作業があまり含まれない問題をさす。つまり、ユーザから設計対象に関する要求仕様を受取り、それを満たすように自己の経験と知識に照らし合わせておこなう設計作業であり、このような設計システムを作成するうえでこのDSPLは非常に役に立つ。

3.終わりに

これらの専用ツールは米国オハイオ州立大学とバテル研究所により開発されたものである。また、これら専用ツールを使用して各種アプリケーションが作られており、代表的なものとして腐食分析、溶接欠陥検出、振動解析システムやエアシリンダ設計システムなどがある。

富士電機のAIへの取組みと化学工業への応用

富士電機(株)システム本部

第一システム開発部 萩原 賢一

「現場の問題解決はそれにふさわしいツールで」これがAIツールの開発にあった当社が一貫してとってきた考え方です。知識ベースの開発を現場で効率良く進めるためには、各々の部門で使われる知識を表現しやすいツールが必要です。また、各部門毎に規模や性能が異なる計算機で動作できなければなりません。このようなコンセプトのもとで、これまでに開発してきたAIツールの概要を下表にまとめました。

COMEXは、その知識表現にクライテリアフレームを採用することにより、診断過程で使われるノウハウを表現しやすくしています。たとえば、下水処理場において各種設備の故障診断やプラント運転状況の診断を行い保全や運転の担当者へ適切な作業をガイドするシステムに応用されています。

FRUITAXは、反応過程など従来モデル化が困難な対象をファジ理論によって制御しようとするものです。これまで運転員が手動で操作していたことを自動化することができます。たとえば、浄水場において薬注量を決定したり、セメント工場で焼成過程を制御するシステムなどに応用されています。

EIXAXは、運転員のノウハウをルールとモデルで表現することによりプラントの自動運転を実現しようとするものです。たとえば、石油工場に付随するエネルギーセンタにおいて電力需要と蒸気需要のバランスを取りながら自家発設備の蒸気系を最適に運用するシステムなどに応用されています。

ΦNETは、物流における物の流れと情報を一元的に管理しながら制御してゆくものです。生産設備の計画時に各種シミュレーションを行い、そのまま実システムの運転制御に移行できます。工場や製品流通における各種搬送ラインの制御、生産スケジューリングなどに応用されています。

注：COMEXのオリジナルは、東京電機大学の上野晴樹博士により開発されました。

表 富士電機のAIツール

AIツールの名称	概 要	特 長	知識表現	推論方式
COMEX 〔選択形汎用〕	検索選択形のエキスパートシステム構築ツール	コンパクトなシステム構築 実用化が容易 (パーソナルコンピュータに搭載可能)	クライテリアフレーム形	前向き推論 後ろ向き推論
FRUITAX 〔ファジ制御〕	ファジ理論応用のエキスパートシステム構築ツール	確率統計によるルール構築 (経験・勘のルール化) シミュレーションによる検証機能をサポート 確からしさ・あいまい性の度合の表現	ファジメンバーシップ関数形 制御ルール形	ファジ推論
EIXAX 〔数式併用形〕	プロセス自動運転用エキスパートシステム構築ツール	プラント運転制御向き リアルタイム指向 FORTRANを使用	プロダクションルール形 簡易フレーム形 数式表現モデル	前向き推論
ΦNET 〔物流向け〕	物流自動化用のAIツール	物流制御の自動化 シミュレーションによる物流計画のチェック シミュレーションと制御の並列使用	プロダクションルール形 ネットワークモデル(ペトリネット)	ノード・プランチ表現にリンクしたルール処理

当社におけるAIへの取組み

富士電機エンジニアリング㈱

営業開発推進本部 AI技術室 関本 雅之

当社は、富士電機グループにおいて、現地建設・保全サービス関係の業務を主として担当している。この中で保全サービスは、設備診断などで、広く深く高度な技術を持ったその道の専門家を必要とする重要な業務のひとつである。

とくに昨今は設備の高度化に対応する保全員の養成や、高齢化による経験豊富な保全技術者の確保が困難であり、新技術への対応と経験技術の伝承は必須の時期にきている。これらの解決策として、エキスパートの専門知識により複雑な問題を解決するエキスパートシステム（ES）の導入は、今後のメンテナンスに必要不可欠な分野と考えられる。

このような観点から、当社においては、設備診断へのESの適用について、昭和56年頃から実務的に研究してきている。

メンテナンス分野における設備診断はその多くが実務的であり、規模は比較的小さいが多勢の実務専門家によってなされている。ここで問題となる多くの症状には、必ず原因がありそれらは論理的な因果関係により成立しているはずであり、彼らはその原因を、論理的な因果関係にもとづいて説明しようと努力している。

一方、彼らは、蓄積されている多くの経験的事実によって、不明点を補いつつそれらの事象を判断している。この時、これらの判断に使用される経験的事実はあいまいで複雑であるが、観測されたパターンによって正しく原因を同定していることも事実であり、彼らは経験と理論の両面から問題解決を行っているのである。

このように、解決しようとする問題構造が不明確で、知識の組合せが多くその内容に数値的と非数値的なものを含み、知識の内容によって推論が変化する問題の解決には、ESが有望である。しかし、保全実務を指向した設備診断ESの実用化には、専門家自らの手でESが構築でき、非専門家でも手軽に利用できることが必要で、このような条件を満たすコストパフォーマンスの良いES構築ツールが必須の条件となる。

東京電機大学の上野研究室で開発されたCOMEX（Compact knowledge Based Expert System）は汎用性を考慮した実用性の高いES構築ツールである。

とくに設備診断のように確定的である専門的事実と、あいまいで複雑な経験知識を利用して、うまいやり方で問題解決を行っている分野のES構築には適格なツールである。

このCOMEXを使用して、いくつかのESを構築してきているが、そのなかでも、油中ガス分析による油入変圧器の異常診断ESは十分実用化のレベルに達していると判断している。これらの知識により構築された設備診断ESは、非専門家に対して故障の早期発見と適切な対応等に対する意志決定支援ができることはもちろんのこと、知識ベースを構築した専門家にとっても、自己の知識を整理することにより新しい専門的事実の発見に結び付くことが多い。

以上記述したように、当社におけるエキスパートシステムの開発は設備診断を対象として進められてきたが、今後は設備診断に限らず、各種の問題分野に対して、発展的に対応していくべく、社内各部署での取組みを活性化すると同時に、これまでの経験を全社的に水平展開することをめざしている。本年3月には、AI技術室を新設し、各種ツールの研究や、ES応用技術の開発にもさらに力を注ぐ方針である。

レンズ設計エキスパート・システム“HALDES”

松下電器産業情報システム研究所 野口 正弘

ビデオ・カメラやビデオ・プロジェクタなどの電気製品においても、レンズはその製品性能を左右する重要な役割を担っている。レンズの設計には、多様な光学知識とその知識を活用するための高度な判断力が要求される。レンズの需要の増加や多様化に対し、熟練した設計者が不足する傾向にある。このような背景の中で、レンズ設計の効率化、高品質化を図るために開発されたエキスパート・システムがHALDES (Highly Automated Lens Designing System) である。

HALDESは、焦点距離などの設計仕様を入力するだけでその仕様を満たすレンズを自動的に設計するシステムである。HALDESにおける処理の流れを以下に示す。

- 1) 過去に設計されたレンズ・データが格納されているレンズ・データベースの中から、変更を加えることにより設計仕様を満足しそうなレンズ・データを、選択基準知識に基づき自動検索する。
- 2) 設計仕様で与えられた焦点距離やレンズ長（複数構成のレンズの1枚目のレンズから最後のレンズまでの距離）などの項目を満足するように、光軸近辺の光線に対し選択されたレンズ・データの初期改造を行う。（光軸から離れた光線に対する性能即ち収差はこの段階で極端に悪化する。）
- 3) 仕様項目を満たしつつ、悪化した収差を少しずつ改善する最適化作業を繰り返す。
 - i) 現状のレンズ・データに対する設計方針を決定する。
(設計戦略知識例：もし球面収差が1.0mm以下でかつコマ収差が1.5mm以上であれば、コマ収差を1.0mm以内に抑える)
 - ii) 設計方針に従って具体的な改造手段を決定する。
(改造手段知識例：もしコマ収差の下光線が目標値から大きくずれており且つ変数に第1レンズの非球面係数を含んでいなければ、コマ収差の下光線の重要度を2倍にし変数に第1レンズの非球面係数を加えて次の最適化を行う)
 - iii) 局所的にレンズ・データの最適化を行う。即ち、より収差の目標値に近い構成パラメータの値を、反復計算法を用いて算出する。
 - iv) レンズ・データの収差性能や形状を評価し、必要に応じてiまたはiiに戻る。
(性能評価知識例：コマ収差に関する上光線と下光線の対称性が悪ければ、改造手段を変更する)

このようにHALDESは、過去の設計例を基に新たなレンズを設計する「類似設計法」を採用しており、レンズ設計者の知識とその活用方法が自社で開発したエキスパート・システム構築ツール“AID”上で実現されている。

HALDESは現在、人手による設計と併用されながら知識の拡充が行われている。HALDESの使用により、素人に近い経験の浅い人でも経験豊富な専門家なみのレンズ設計が可能になるとともに設計期間の大幅な短縮（従来比1/2.0）を図ることができた。

松下電器では、設計部門や製造部門での業務の高度化、効率化を目指して、各種エキスパート・システムの開発に取り組んでいる。

COREX (腐食用エキスパートシステム)

三菱商事㈱ 技術部 インフォメーション・
テクノロジーチーム 池谷 裕之

1) 用途

“COREX”は、機械システムの腐食欠陥の診断を行い、その解決策また十分な耐食性を得るための材料選定等を行うためのプロトタイプ・エキスパートシステムである。

2) 技術的問題

腐食の問題というのは、多くの産業分野においてシステムダウンの原因となっており、この腐食によって生じたトラブルの復旧のために非常に多くの時間がかかっている。また、多くのプラントにおいてオペレーターは腐食に関し診断を行い、対処するためのトレーニングが不足している。複雑なシステムにおいては腐食の問題を生じさせるファクターが多数存在する。例えば、そうした要因の中には材料の耐腐食性不足、システムの設計ミス、オペレーティング条件が不適当、機械的要因などがあります。こう言った様々な要因を含むために、腐食の分析を行うためには幅広い専門知識が必要とされています。そしてこのような専門知識を持った専門家の数は非常に少ない。

3) 技術アプローチ

“COREX”は、3つの違った働きを持つコンポーネントによって腐食の問題に対処する。最初のコンポーネントは、腐食のFailure Modeの診断を行う。ここで言うFailure Modeとは、腐食のタイプ、例えば表面腐食、すきま腐食、内部腐食等がある。腐食の専門家は目で見ることによって、こうした腐食のタイプを診断することができるが、腐食の専門家でない人間はアシスタントを必要とする。“COREX”は診断の対象となるシステムが置かれている環境、腐食している部分の材料、腐食の目で見える物理的状態について、ユーザーに対して質問を行い、それで得た情報を下にFailure Modeの診断を下す。二番目のコンポーネントは、確認された腐食Failure Modeに対しての対処法を出力する。このコンポーネントは、最初のコンポーネントからの出力情報を環境についてのデータ及び診断の対象となっている機械システムのコンポーネントデータと共に用いて、推論を行い対処法をユーザーに提供する。三番目のコンポーネントは、機械システムの設計に際して耐腐食性の材料を選定する。このコンポーネントは、二つのモードを持っている。最初のモードにおいてユーザーは対象となるコンポーネントのデザインと置かれる環境を特定し、“COREX”はその環境において使用可能な材料のリストの中からユーザーがひとつの材料を選定し、その材料がいかに機能するかを“COREX”に質問し、その材料を使うことによって予想されるFailure Modeの予測をシステムから得ることができる。

4) AIテクニック

“COREX”は“CSRL”を用いて開発されたが、これはバテル記念研究所の資金援助の下に米国オハイオ州立大学の人工知能研究所で開発された分類型エキスパートシステム構築用ツールである。

㈱三菱総合研究所 システム開発部
統合システム室 小林 慎一

当社では去る昭和59年にマルチクライアントプロジェクト「人工知能革命」を実施し、それまで個別のプロジェクトや社内研究などで進めてきていたA Iについてのさまざまな研究成果を集約するとともに、国内で初めてのA I市場の将来的な予測を行った。このプロジェクトは結果的には日本におけるA I研究にはずみを付け、その後いわゆるA Iブームの先駆けともなったものである。

当社のA I関連の研究開発は大きく3つの分野に分けることができる。第一は基礎的なテーマに関する研究開発である。具体的にはI C O Tなどの国家プロジェクトに関する研究や社内の自主的な研究開発で技術的なテーマとしてはA I向け高級言語、自然言語処理などが含まれる。2番目のテーマは汎用的なツールの開発である。先に述べたマルチクライアントプロジェクトの中でルールベースのエキスパートシステム用ツールZ E U Sを開発するとともに、いくつかの応用システムの構築を行ったが、そうした経験に基づいて、より高度な知識表現機能・推論機能を実現したハイブリッド型ツールZ E U S - IIを開発した。こうしたツールはパッケージとして販売しており、既に60セットを越える実績を有している。最後のテーマは、エキスパートシステムなどのアプリケーションシステムの開発である。こうしたシステム開発では、Z E U S、Z E U S - IIなどのツールを用いる事が多いが、ツールそのものを具体的なアプリケーションにあわせて新規に開発する場合もある。以上の3種類の分野の他、多少啓蒙的な活動として「A I研究会」も実施しており、さまざまな分野の研究者による講演会やセミナーなどを開催している。

これまでのエキスパートシステム開発の経験から、現状のA I技術によるシステム開発では、データベースやシミュレーションプログラムなどの従来型のシステム技術による（既存）システムとの統融合がもっとも重要であるとの認識を持っており、今後の研究開発もこの方向に沿って進めるべきであると考えている。もちろん、このような比較的短期的なターゲットのみではなく、A I技術の高度化のためには、基礎的な研究開発も長期的な視野に基づいて実施すべきであり、この2つの研究開発を並行して進めている。

A Iに対して過度の期待を持つことは危険であるが、現状のA I技術の意義、限界を十分に理解することによって、実用システム構築への道が開けるものと考えている。

AIへの取り組み

三菱電機㈱ AI応用グループ 水野 裕

1. はじめに

当社のAIへの取り組みは昭和45年中央研究所のプログラム理論の研究に始まり、通産省による第5世代コンピュータプロジェクトへの参画、ファジィ制御の実用化、ニューロンコンピュータの試作などを行い現在に至っている。一方、メカとして当社は第五世代コンピュータプロジェクトの成果物であるPSI(逐次型推論マシン)を中心に、ミニコン、ワークステーション上でのAI環境の整備を進め、エキスパートシステム構築ツールとして知的スプレッドシート構築ツール Acekitと汎用のエキスパートシステム構築ツール EXTKERNELを始めAI向き言語、開発環境を提供し、各種のKEサート業務を行っている。ここでは当社の提供する知的スプレッドシート構築ツール Acekitと計画型エキスパートシステムの事例紹介を行う。

2. 知的スプレッドシート構築ツール Acekit

Acekitは、オフィス内で数多く行われている帳表業務・生産計画やプロジェクト管理、見積り業務といった非定型業務のエキスパートシステム化を支援するツールである。Acekitではマンマシンインタフェースに複数のスプレッドシート(表)を採用し、ユーザがスプレッドシートを操作することにより問題解決を図る。このため、Acekitのスプレッドシートには次のような特長を備えている。

- ①スプレッドシートをエキスパートシステムの作業記憶領域とみなし、スプレッドシート中の項目と項目とを数式やルールで関係付け、前向き推論を行う。
- ②Acekitはデータ駆動型システムでルールに関係するすべての項目が定義された時点でルールが発火し、これにより他のルールが順次起動され、影響のあるすべての項目を自動的に訂正する。
- ③表・項目間の関係は表の操作を行いながら直接定義でき、システムの開発・保守が容易である。
- ④表にデータがセットされているイメージでデータが保存でき、このデータを再利用することにより業務の省力化ができる。

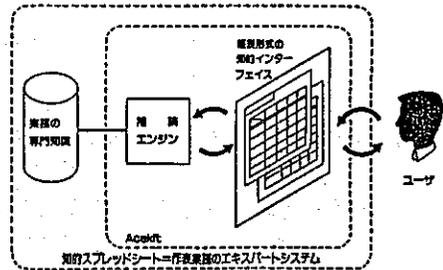


図1 知的スプレッドシート構築ツール Acekit

このようにAcekitは汎用のエキスパートシステム構築ツールとは異なり、スプレッドシートの設計・開発・

利用を通して、知識獲得・知識整理・システム開発・利用・保守を容易に行うことができる。

Acekitを用いた事例として自動車事故慰謝料算定支援システムがあり、図2にその画面例を示す。このシステムはプロトタイプ構築が終了し、現在評価中である。

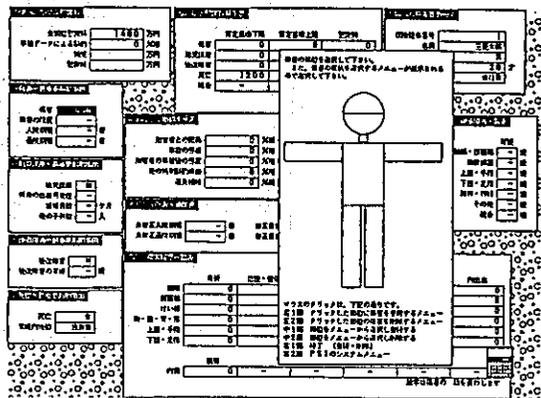


図2 Acekit利用例(慰謝料算定支援システム)

3. 計画型エキスパートシステム（組立工程計画エキスパートシステム）

最近注目を集めているのが計画型エキスパートシステムである。このシステムは与えられた制約条件の元でいくつかの解を生成し検証するシステムである。日程計画に代表される計画型エキスパートシステムでは

- ①限られた制約の元で生産性を向上したい
- ②計画立案の専門家の複数化を計り、判断を不偏的にしたい
- ③従来のシステムでは実現しにくかった業務のコンピュータ化をしたい。

という目的によりエキスパートシステム化が検討されている。

計画型エキスパートシステムの事例としてある製造メーカー向けの組立工程計画エキスパートシステムを紹介する。このシステムはある製造メーカーの加工組立ラインの製造計画を立案するシステムである。この工場では完全な受注生産体制をとっており、年々の生産量にかなりバラつきがある。また、製造の遅れによる計画の見直しも多く素早い対応が必要である。このシステムが対象とする業務は、5工程から成る。各工程の関係を図3に示す。

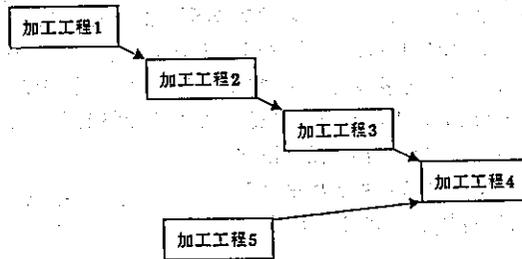


図3 加工工程概要

この業務のエキスパートシステム化の理由を次に示す。

- ①計画立案担当者の負荷を軽減し、他の非専門家でも代替できるようにしたい
- ②対象問題の制約条件が複雑で数理解析手法やOR手法が適用しにくい

システム構築にあたりH/WにはMELCOM PSI IIを採用し、S/Wにはスケジュール問題専用ツールを用いている。現在7*リフトタイプの評価を終え、7*リフトタイプのシステムの構築に移行している。63年度末を目標に実用化する計画である。

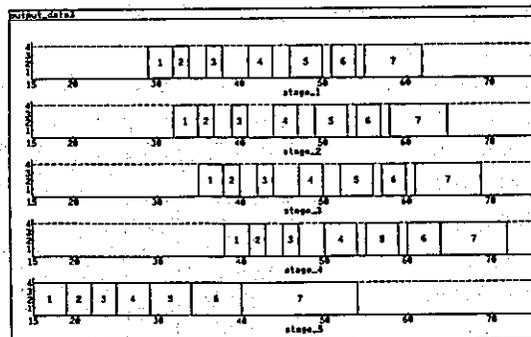


図4 製造日程計画出力画面例

エキスパートシステム構築支援ツールKDLとその応用

(株)明電舎 開発本部 松木 直彦

(Knowledge Description Language)

明電舎は、知識情報処理技術を当社の基盤技術の一つとして認識し、

- (1) 用途に応じた支援ツールを開発する技術
- (2) 各種エキスパートシステムを開発する技術

の2つのタイプの技術の協調により、それぞれの育成・強化をはかってきた。

これは、電力・水処理・化学プラントなどの監視・制御システムを始めとする当社のシステム製品の知能化を目指すばかりでなく、今後の急速な応用分野の拡大とお客様の多様なニーズにお応えするためのものである。

当社が開発したエキスパートシステム構築支援ツールKDLとその応用例を紹介する。

KDLはプロダクションとフレームをオブジェクト指向の下に統合した汎用ツールで、

- (1) 多重継承機能など多彩な知識表現能力

専門家の多様な知識を特性に応じて記述できる。

- (2) メタルールによる推論の制御など柔軟な推論機構

きめ細かい推論の制御、効率的な推論ができる。

- (3) ルールの部分コンパイルなど充実した開発環境

知識ベースの開発を効率良く進めることができる。

などの特徴を持つ。KDLは、VAXstation、VAX-8000、MicroVAXシリーズで使用できる。特にワークステーション版ではマルチウィンドウ・グラフィックス・マウスなどを使用した高度なマンマシンインタフェースを提供している。

KDLの応用として、計画型（マシニングセンタの群管理）、設計型（デジタルリレーシステムのソフトウェア設計支援）、診断型（高圧電動機の絶縁診断、水処理の微生物相診断）などの開発例があり、社内で実用化されている。

当社は、ソフトウェア製品KDL、およびこれをコンピュータとセットした開発・実行環境の販売、ナレッジエンジニアリング・サービス、個別エキスパートシステムの開発納入など幅広くお客様のエキスパートシステムのニーズにお応えすることができる。

AIへの横河電機の取組み

横河電機(株) 市場開発本部 平田 康郎

従来より弊社はプロセス分野へのAIの適用と言うことを念頭に多角的な面からの研究、開発を行なってきました。その一部はすでに実用化もされております。

応用面で述べるとオフサイトの設備管理エキスパートシステムや温室栽培支援エキスパートシステムがあります。また社内の応用開発部門では既に数十種のプロトタイプシステムを作成しております。これらを通してプロセス用のエキスパートシステムを効率よく構築し、かつ実用的なものにするためのノウハウを習得する努力を日々続けております。

こうした経験をもとに弊社は本年4月にCENTUM XLシリーズのAI機能を実現するユニットとしてAIWS (AIステーション)を発売しました。

最新の分散型DCSシステムでは従来のプロセスオートメーションの枠組を越えて、その管理領域を拡大しつつあります。こうした中で工場の総合運転管理システムをより直接的に支援できるようなAIシステムが実現されねばならないと言うのが弊社の考えであります。そのためにはDCSシステムと融合し、かつ従来のソフトウェア資産とも連携してトータルにシステムの高機能化が図れるものでなければなりません。

そうした位置付けの中で弊社AIWS上で動作するプロセス用エキスパートシステム構築支援ツールXLA Iは応用分野の中でも特に

- ・障害箇所の早期発見
- ・アラーム発生時の措置ガイダンス
- ・プロセスの異常診断
- ・設備の故障診断

等の分析、分類型の問題に適しています。これら現場オペレータの意志決定支援や判断の支援などを行なうエキスパートシステムの構築を支援します。

XLA Iはこうした目的を実現するために以下のような特長を持っています。

1. オンラインのエキスパートシステム
2. プロセスデータを知識ベース上にタグ名で記述可能
3. IF-THENルールによる容易な知識ベースの作成
4. ユーザープログラム(C, FORTRAN)との容易な結合
5. 定義ファイルにより容易に構築できるデータ収集サブシステム
6. 画面作成が容易なグラフィックエディタ

XLA Iのソフトウェア構成はUNIX System VをOSとして日本語Xウィンドウを搭載しており、XLA Iは完全にこのマルチウィンドウ環境下で動作します。

また推論エンジンはC言語で記述されています。C言語のツールであることにより高速であり、LISP系言語の問題点であるガベージ・コレクションがないこと、またC, FORTRAN等のユーザープログラムとの連携が容易で効率的であることなど多くの長所を持っております。

更にこうした実行環境のシステムを構築するためにXLA Iは以下のようなユーザフレンドリーな会話型の開発環境を提供しております。

1. デバッグ、トレース機能
2. 知識ベースエディタ
3. 知識ベースや推論データのロード/セーブ機能

CENTUM XLは初年度500システム以上の受注を目指しております。これらのシステムのうち、かなりの割合でAIWSが組み入れられるものと考えております。AIの分野はまだこれから発展してゆく分野であります。弊社はこれらのシステムから吸収できるノウハウを更に製品に生かしてAI機能の充実を図る考えであります。

岩崎へのAIへの取組み 過去・現在・未来

岩崎技研工業(株) 繁 周作

岩崎では、「A to Z」を合言葉とし、「過去から未来、開発環境から実行環境、入門から実用、パソコンから大型コンピュータ」とAIのAからZまでをサポートします。

1984年に、時代に先駆け、パソコン用プロログ・インタープリタの標準となっております「Prolog-KABA(プロログ・カバ)」を商品化。

1986年には、「Prolog-KABA」の機能を拡張するProlog-KABA拡張ツール[WING(ウィング)]、更に誰もが簡単にAIを実現できる環境、つまり、AIの簡易言語感覚のエキスパートシステム構築ツール「AI PLAN TELL(エイ・アイ・プラン・テル)」を世に送り出しました。

また、これらと並行して英国エジンバラ大学とのライセンス契約により、ワークステーションなどのUNIXマシンで動作するC-Prolog(シー・プロログ)を安価で提供し好評を得ております。

そして、近未来指向のマルチOS・Prologコンパイラ・AZ-Prolog(アズ・プロログ)を現在開発中です。

マルチOSとはパソコンから大型コンピュータまで同一の開発・実行環境を提供するため、MS-DOSからOS/2、そしてUNIXなど複数のOSに対応するものです。

岩崎は常に一步先を考え、更に「分野別エキスパートシステム構築ツール」「ニューロモデル学習型エキスパートシステム」「並列処理型Prologコンパイラ」など近未来技術にもチャレンジします。

さて、岩崎のAIの取組みの歴史と未来像を簡単にご紹介致しましたが、ここで現代に目を向け、現在の主力商品の「AI PLAN TELL」を御紹介しましょう。

「AI PLAN TELL」はパソコン上で本格的な実用エキスパートシステムを作ることが出来、しかも知識が入力しやすいエキスパートシステム構築ツールを目標に開発されました。

「AI PLAN TELL」は知識の入力を「より早く、より大量に、より簡単に」するため、入力する知識に合わせて、プロダクションルールは勿論、本格的なツールの代名詞であるフレーム型表現を採用。

更に「AI PLAN TELL」独自の知識表現であるファジー理論の考え方を取入れたテーブル型表現と3種類の知識表現を採用し、複合型知識ベースが構築できる第2世代のルールです。

さらにそれぞれの知識表現に専用のマルチウィンドウ・エディタを装備し、ユーザインターフェースを重視した構築環境を提供します。

発売以来2年で、「Prolog-KABA」のユーザ様を中心に大手企業、主な大学・研究機関を初めとして約1000本の販売実績を誇り、そのなかで、続々と本格的な実用エキスパートシステムが誕生しています。

また、近い将来、AZ-Prologへの移植を予定し、パソコンで構築した知識ベースをそのままワークステーションやミニコンでも利用できることとなります。

当社ではパソコン用日本語エキスパートシェル「創玄」を開発し、昭和61年6月から販売を致しております。「創玄」は発売以来、昭和63年5月までの時点で、販売総本数は2500本を越え、パソコン用のエキスパートシェルでは約40%のシェアを確保しております。このような状況の中、登録ユーザは1200人を越え、その中で化学関係の企業が占める割合は、約6.5%となっております。全体からみて6.5%という数字は、一番多い電機関係の15.3%と比べて多いとも、極端に少ないとも言えない数字であると思われれます。化学関係の企業の中で、当社のユーザが多いのは製薬会社が圧倒的です。その他としては、家庭用の洗剤メーカー、石油プラント系の企業などです。

各企業で主に作られているエキスパートシステムは、新薬開発に伴う市場調査システムは、幾つかの製薬会社で一緒に構築されているシステムです。他にはデータベースとエキスパートシステムを融合させた、特許の検索システム、化学情報を検索するためのデータベース検索システム等が、現在構築されている例です。それに対して新薬開発等の開発部門に直接関わる部門のシステム化は、例がないというが現状です。しかし開発部門におけるエキスパートシステムは、企業間でも機密性が高く、実際にシステム化がなされても、表面に出てこない可能性が大きく、「創玄」でも構築されていることも考えられます。またエキスパートシステムとしてよくある、プラント制御のシステムは、ハードウェアがパソコンということから、簡単な故障診断に留まっているに過ぎません。

実用化の時期ということに触れてみますと、エキスパートシステムにおいて、どの時点を実用化と判断するかによってその時期は大きく違ってきますが、一般的にエキスパートシステムの場合では、専門家の仕事の援助が十分できるようになるのは、システムの構築から3年ないし5年位といわれています。パソコン用のエキスパートシェルの場合、EWSや大型機のシェルに比べて、入門用、プロトタイプ構築用のツールという使い方が多く、初めから実用化ということを考えていない例がかなりあります。パソコン用のツールで簡単なプロトタイプを構築し、実用化は大型機に載せ変えて構築するという考え方をしている企業が沢山あります。従ってこのような企業のシステムの実用化は、EWS、大型機で最初から作る場合に比べて、更に1年から2年多くの時間がかかる可能性はあります。最初からパソコン上で実用システムを構築する場合、スタンドアロンとして使い方が多いこと、システムの規模から判断して、システムの構築から1年ないし、1年半位で実用化がなされるのではないのでしょうか。

EXSYS エキスパートシステム開発支援ソフトウェア

PROFESSIONAL (EXSYSプロフェッショナル版)

イーエスアールインターナショナル㈱ 平田 昭子

EXSYSは、本格的な開発支援ツールです。

<特徴>

- ・EXSYS自身はC言語で開発されコンパイルされたものなので、他の製品と比較して、実行スピード、省メモリ、そして、移植性という点で大変優れています。
- ・知識表現は、IF~THEN~ELSE形式のプロダクションルールです。

- ・後向き推論に加え、前向き推論もサポートしているため、対照問題に応じて推論方法を選択でき、幅広い対照問題に適用できます。
- ・最終の答として、幾つかの可能性のある結論を、確信度の大きい順に出力します。
- ・説明機能として、質問の根拠を問う「WHY」、推論の過程を遡る「HOW」、入力したデータを変更して再実行する「WHAT-IF」、そして、質問の説明をする「WHAT」と4つの機能があります。
- ・知識ベースエディタEDITXSは、メニュー形式で非常に簡単にかつ速く知識の入力、変更、並び換えができます。
- ・知識ベースのファイル形式はすべての機種で同じため、他の機種で開発された知識ベースでもそのまま実行できます。
- ・OS上の外部プログラムを実行しデータの交換ができます。データを渡す時は、ファイルとメモリーを使用でき、データをもらう時はファイルを使用します。
- ・2つの知識ベースを統一することができます。
- ・データリストとレポート作成機能により、自動制御システムが作成できます。
- ・2つ以上の知識ベース間でデータのやりとりができ、「黒板モデル」システムを作成できます。
- ・EXSYSからEXSYSを呼びだし、知識ベースのサブルーチン化ができます。
- ・「FRAME」（オプション）を使用することで、フレームの機能を持たせることができます。

PROFESSIONALは、EXSYSの機能拡張版です。

<特徴>

- ・EXSYSと上位互換性があり、EXSYSで開発した知識ベースがそのまま実行できます。修正する必要はありません。
- ・実行のためのパスワード、修正のためのパスワードと2段階のパスワードが設定でき、知識ベースの機密保護ができます。
- ・ルールの実行を制御するコマンドを設定し、ルールのブロックごとの推論順序、前向き、後向きなどの推論方法の設定など、積極的にルールの実行を制御でき、メタルールが記述できます。
- ・確信度が結論にだけでなく質問事項にも設定でき、また、確信度の集計方法も、システム構築者が計算式を自由に設定できます。ベイズの定理による集計方法、外部にメンバーシップ関数を定義したファジーシステムなどが構築できます。
- ・スクリーンエディタ等で作成したルールのテキストファイルをコンパイルしてPROFESSIONALの知識ベースファイルの形式にするルールコンパイラがあります。
- ・バックエンドシステム等を作成する場合に、スクリーンへのPROFESSIONALの出力を停止することもできます。
- ・システム構築者独自の質問画面を簡単に作成できます。
- ・条件の表現に論理記号を使用できます。
- ・ルール等に名前を設定でき、その名前で指定することができます。

1. はじめに

反応経路選定エキスパートシステムは、「化学物質設計等支援のための知識ベース、及び推論システムの開発」につき研究するものである。(※) 具体的には、構造が決定された目標化学物質を生成するための反応経路を選定するものであり、これをKBMS (Knowledge Base Management System: NTT開発)を用いてPC 9801XL²上に構築している。

62年度は、化学物質の構造図入出力に重点を置いて作業を実施した。63年度は、専門家の持つ transform の知識を簡単にシステムに入力するための専門家エディタの検討、専門家エディタのサブ機能であるルール学習機能の検討、及び、推論部分の検討を行うと共にプロトタイプ作成に取り組む。

2. 専門家エディタについて

専門家エディタでは、切断ルールの登録、結合ルールの登録、合成等価体置換ルールの登録、官能基グループの定義(電子供与基等)の4つの機能を有する。

切断ルール登録機能では、物質において特徴となる構造に着目して切断するルールを登録するものである。結合ルール登録機能では、物質が電氣的に+であるか-であるかにより結合する構造を決定するルールを登録するものである。合成等価体置換ルール登録機能では、合成的に等価な構造を相互に置換するルールを登録するものである。官能基グループの定義機能では、性質が同じ部分構造を1つのグループとして定義するものである。

3. 推論部分の充実について

推論部分では、上記ルールを用いての前駆体の推論(標的化合物を頂点とする tree 状の構造の制御)、適用頻度によるルール実行順序の管理を行う。

4. ルール学習機能

専門家が経験則を修得するのと同様の過程で、反応事例を入力することによって transform のルールを学習する機能である。現段階では、試みとしてベンゼン環の置換について範囲を絞って検討を行う。具体的には、反応部位、反応条件及びベンゼン環における置換基の個数・種類・電氣的性質・位置関係に着目して規則性を発見するものである。

5. 実用化について

現時点では、まだ試行錯誤の段階でありプロトタイプとしてシステムを開発している。特に、ルール学習機能については可能性をかけてのアプローチ的な色合いが強い。しかし、化学の領域において人工知能の適用を目指す上では、意義のある取り組みであると確信している。

※ 本研究は、科学技術庁の昭和61、62年度科学技術振興調整費による「化学物質設計等支援のための知識ベース、及び推論システムの開発」(研究推進委員長 東海大学 米田幸夫教授)の一環として行っているものである。

㈱シーイーシー AIシステム部 久保山誠士

GoldWorks は米国のGold Hill Computers 社が開発したパソコン上でのエキスパートシステム構築支援ツールで、私ども㈱シーイーシーが日本語版を開発・販売致しております。

GoldWorks の特徴としては、

- ①パソコン上でのCommon LISP であるGold Common Lisp(GCLISP)で記述されている
 - ②知識表現として、フレーム、ルールなどに加えオブジェクトプログラミングが可能である
 - ③各知識(アサ・ション)は依存関係情報をもっており、知識ベース内の整合性を保ち、その情報の履歴を管理することができる
 - ④パソコンソフトのベストセラー、Lotus 1-2-3 やdBASE IIIとのインタフェースをもっている
 - ⑤推論を制御するためにスポンサという独自のアーキテクチャを採用、また競合解消の手段としてアジェンダ機構を使っている
 - ⑥高速なパターンマッチングを実現するために、改良されたRETEマッチングアルゴリズムを採用している
 - ⑦メニューインタフェースと開発者インタフェースの2種類のインタフェースを持ち、ユーザーのレベルに合わせてエキスパートシステムの開発が行える
- などが挙げられ、今まで入門用と位置付けられていたパソコン上ES構築ツールのイメージを大きく変える多機能高性能を誇っています。その一方で、メニューインタフェースは専門家自ら直接知識を入力できるように設計されていますので、LISPの知識がない方でもシステムの構築が可能になっています。

米国では、昨年7月の発売以来既に約1000本の販売実績があり、数多くのエキスパートシステムが開発されています。その中には、航空宇宙、国防、CAD、金融サービス、製造、医学、科学関係など幅広い分野が含まれていることから、GoldWorks が実用性ということを第一義にして作られていることがおわかり頂けるでしょう。

最後にそうした事例の化学関係のものいくつかをご紹介します。

- ・SpinPro 超遠心分離エキスパートシステム
実験室の利用効率、生産性、遠心分離品質などを向上させるように実験手順を決定し、科学者を支援する。さらに実験の設計および計算の実行に加え、試料、遠心分離法および密度勾配法などに関する情報を提供する。
- ・PepPro ペプチド合成エキスパートシステム
ペプチド合成のための実験手続きを最適化する。実験の合成に先立ち、合成作用上の問題点を認識し、それらの問題を回避する適切な方法をアドバイスする。回避できない場合には、問題の影響を最小限にして、産出量および製品の純度を維持する方法をアドバイスする。

(以上、アメリカ、Beckman Instrument, Inc.)

- ・ESPCEM 化学プラント緊急時管理のためのエキスパートシステム
水素化処理の改質問題ならびに石油精練に使用される改質プラントにおいて、原油の欠陥、冷却剤の欠陥、燃料系統の欠陥など、5つの欠陥によって生じる緊急事態を処理することを目的としている。

(アメリカ ヒューストン大学)

また、シーイーシーでは、GoldWorks の開発、販売の他に、GoldWorks のトレーニングコースからコンサルティングサービスまで、トータルにAIをサポートしております。

ESPARON:分散協調型エキスパート・シェル

システム総合開発㈱
商品企画室 稲林 昌二

通常のMS/DOSパソコンで使用できるエキスパートシェルESPARONはシステム総合開発が商品化した実用的でユニークなソフトウェアツールです。ESPARONの知識利用モデルは知識を用いてさまざまな問題を解決するのに大変適しています。知識はエージェントと呼ばれる単位モジュールごとに登録され、各モジュールが互いに連携して全体の問題をその目的に応じて柔軟に解決していきます。このようなタイプの知識利用を分散協調型と呼んでいます。

ESPARONのエージェントは次の3つの部分で構成されます。

①メタルール部

他のエージェントからのメッセージの解釈と処理、推論のコントロール、他のエージェントへのメッセージ送信を行ないます。

②ルール部

if～then形式のルールをグルーピングして推論に利用します。推論はメタルールの指定により前向き、後ろ向き、確信度付きなど6種類用意されています。

③データ部

宣言型の知識として、初期状態の知識内容を登録利用するほかブラックボードとして推論の目標や途中経過を書き込むことができます。

このような3層構造のエージェントの相互連携のメカニズムの中で、プロダクション・システム、ブラックボード、オブジェクト指向といった知識利用の代表的パラダイムを統合的に使用できるのがESPARONの最大の特徴です。

ESPARONの適用対象は、OA、FAの実務向けシステムへの組込みを始め試験結果の解析、工程管理など幅広く、オープンアーキテクチャのよさを活かして柔軟に知識利用機能を開発していただけます。

さらにESPARONの上位版としてUNIX、VMS用のESPARON/EWS、汎用機向けのESPARON/VMが商品化されています。

評価エキスパート構築用シェル「コギト」の紹介

(株)情報数理研究所 大野泰治郎

コギトは、動力炉核燃料開発事業団が当社に委託して開発したウラン資源探査プロジェクト評価システムをもとに、エキスパートシステム構築用シェルとして開発したものである。以下、コギトの特徴及び、動作環境を述べる。

① コギトはプロジェクト評価、人事考課などの評価を対象としたシステムを構築するのに適したエキスパートシステム構築シェルである。従って、一般の汎用ツールと異なり、ユーザはプログラムを作成するという意識を全くもたずにシステムを構築することができる。

② 知識ベース構築エディタにより専門家の知識を知識ベースとして構築しやすい。

③ 知識表現手法に推論ネットワークを用いているため、推論処理が高速である。

④ コギトの適用分野

地下資源有望性評価

意思決定支援

人事考課

プロジェクト評価

... e t c

⑤ 使用一覧

知識表現形式 推論ネットワーク

ノード数 500まで

推論方式 後ろ向き推論、評価点の前向き伝播

確信度の計算法 ベイズの理論に基づく

動作環境 PC-9801シリーズ

メモリ 512KB以上

OS MS-DOS (組み込み)

弊社は、現在「パソコン用AIツール」を開発、販売すると共にユーザーに提供できる実用的なサンプル知識ベースを開発し販売しています。その内容は、趣味の分野からコンサルテーションまで色々な分野でのAIの活用を考え開発したものです。AIの実用化はこれから考えていかなければならない問題ですが、未だユーザーのニーズが盛り上がっていないため、実用化は今後の課題であると思われます。そこで少しでも皆さんに参考になればと考え、弊社が開発したサンプル知識ベースについて紹介します。

- I. 学校関係
化学反応エキスパートシステム・植物名検索
- II. ソフトウェア関係
C言語エキスパートシステム
- III. 故障診断
油圧装置故障診断エキスパートシステム・大型プレス保守管理エキスパートシステム
- IV. コンサルティング
鉄鋼規格コンサルテーションシステム
- V. 趣味・家庭
献立エキスパートシステム・海釣りエキスパートシステム

この中から化学分野に関係ある事例を簡単に御紹介します。

1) 化学応用エキスパートシステム

内容： 定性的な化学実験をシュミレートし、化学実験に際して計画立案や実験データの解析に用いることが出来ます。

- 特長：① 試薬反応より、物質に含まれるイオンを推定することが出来ます。
 ② 後向き推論を使うことによって、イオン特有の試薬反応を知ることが出来ます。
 ③ 実験の前にシュミレーションを実施し、実験計画を立案することが出来ます。

KB (KNOWLEGE BASE)の構造

事象(質問)：試薬(NaOH、NH₃、H₂S等)炎色反応等によって起こる反応

仮説(解答)：イオンの種類(Ag⁺、Pb²⁺、Na⁺、K⁺、・・・・)

知識源 高校用の化学教科書・参考書・問題集

発展性 教科書に合わせた内容の実験計画の作成および実験データの解析

対象者 高校教師・高校生

以上のような内容を整理し知識ベースを構築していきます。

このようにしてAIがこれから化学分野においても、またCAIや他の色々な分野にも実用化されて行くことは間違いないでしょう。そのために我々は、各人の持っている知識を整理し明確に表現することを覚え、何時でもそれらの知識を第三者に提供できるようにしておかなければなりません。

この様な目的のために各種のAIツールが開発され販売されています。

センチュリリサーチセンタ(株)
ソフトウェア部 浜口 顕行

MICCS (MICROcomputer-based Consultation System 通称ミックス)は、千葉大学 園芸学部 古在豊樹助教授、星岳彦氏により開発された、パソコン用エキスパートシステム構築ツールです。またMICCSは、米国 Stanford 大学で開発された医療診断用エキスパートシステム "MYCIN" に準拠した機能を持つように設計されており、診断や助言などコンサルテーションを行うエキスパートシステムの構築に適しています。AIソフト入門として最適です。

特徴

(1) 知識表現の特徴

- IF-THEN形式によるプロダクションルールを使用しているため、ルールの追加や修正が容易です。
- 確信値による「あいまい性」の取扱が可能です。
- 簡単なフレーム形式を用いてデータの記述ができます。
- 日本語による知識表現ができ、図形情報の取扱も容易です。

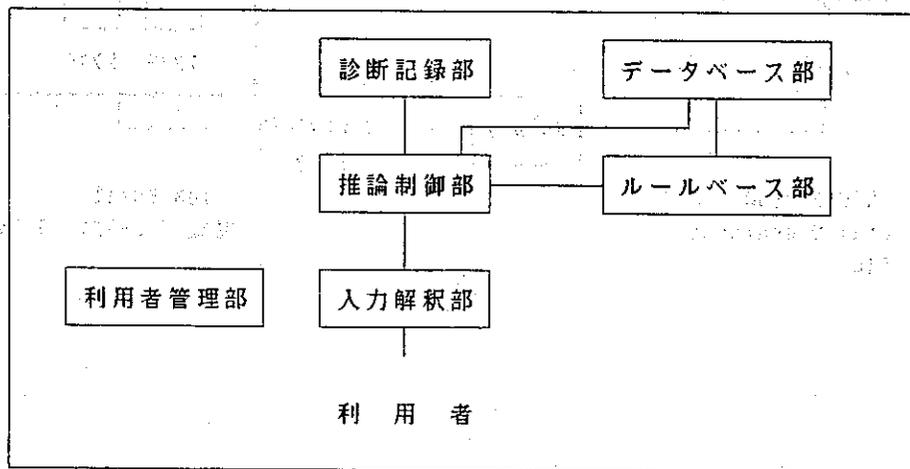
(2) 推論上の特徴

- 前向き形推論と後向き形推論を併用した効率的な推論方法を実現しています。
- 利用者への説明機能を備えています。(推論の過程や結果の情報などをわかりやすく説明します。)

(3) システム利用上の特徴

- 「陳述モード」と「回答モード」の2つのモードによりシステムと対話形式でコンサルテーションを進めることができます。
- 複数の利用者が共同利用することを前提として、「暗証番号」と「利用者番号」を用いて、利用者の管理を行います。

システム構成図



連続系タンクシミュレーションとエキスパートシステムとの接続

センチュリリサーチセンタ(株)

AI部営業課 福森 利明

本システムには、化学工業に多く見られる連続系のプラントシミュレーションとエキスパートシステムとを接続し生産の最適化を図るべくシステムの開発を行っている。

本システムの開発については、IBM PC/AT上で稼動するシミュレーションツール SEEWHYとNEC PC9800上で稼動するエキスパートシステム構築ツール Personal Consultantシリーズで構築されている。

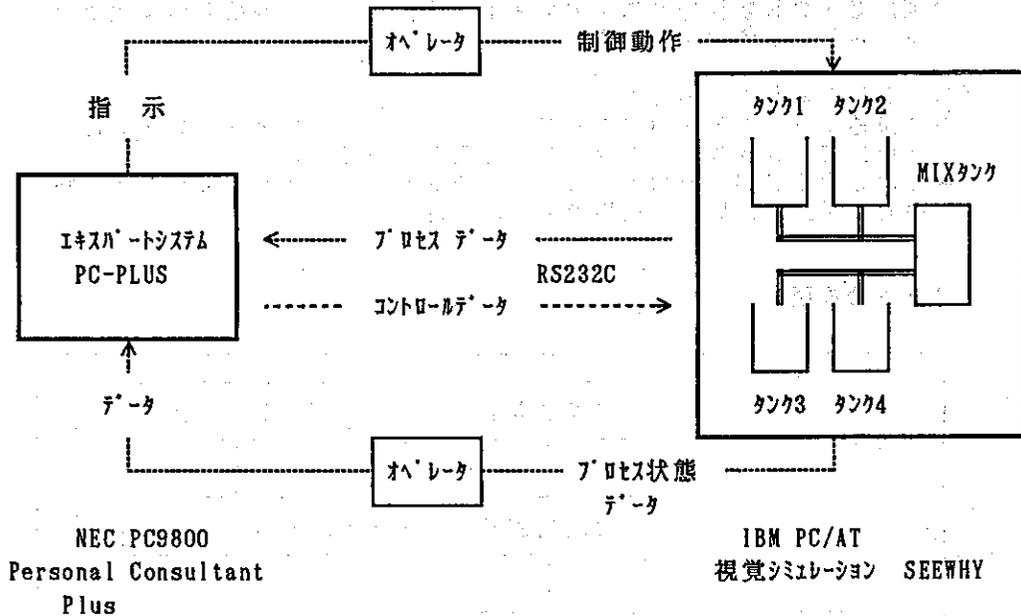
図のような簡単なモデルで概略を説明する。

概要： 原液1がタンク1に、原液2がタンク2にそれぞれ不規則に流入され、混合液がMIXタンクに、また中間製品としてタンク3、タンク4に分配されるものとする。それぞれのタンクにはバルブがついており排出量調節することができる。このようなタンクモデルを応用し、少数のタンクで原液を及び製品を多品種扱うモデルをSEEWHYを用いて開発した。それぞれのタンクの持つ容量制限を考慮し、生産計画にあわせ、最少のコストでの生産スケジュールリングをエキスパートシステム側に任せる。このエキスパートシステムの構築にはPC9800上のPersonal Consultant Plusを用い、データの交換としてPersonal Consultant Onlineを用いている。

システム： モデル数はプロトタイプ作成時には、約50モデルで最適化を行った。

現在、拡張をはかっているがPlus、Onlineの機能が強化され、イベント駆動、連続ループ、クロック制御が導入された為、モデルの少量化を実現している。

IBM PC/ATとNEC PC9800との接続には RS232Cを使用している。



Super Expert Plus[®]

(株)第一コンピュータリソース

研究開発部 佐藤 文臣

Super Expert Plus は、与えられた課題例から、その中に含まれる規則性（決定木）を帰納的に自動生成する事により、深い知識の獲得におけるボトルネックを回避し、コンピュータに不慣れな専門家が、自身で知識ベースを容易に構築することを狙った「エキスパート・システム構築用ツール」である。

特徴：

・簡単な操作

コマンドは全てメニューから選択して実行できる。コンピュータの経験やプログラミングの知識は不要で、容易にエキスパート・システムを開発し実行できる。

・ルール（決定木）の自動生成

与えられた課題例の集合から、その中に含まれている規則性（ルール）を高速で自動的に生成する。ルールをC, Pascal, Basic言語のソース・コードで外部ファイルに作成できる。

・知識の変更が容易

完成したエキスパート・システムの更新は課題例の追加・削除により新しい意志決定木を数秒のうちに更新できる。

・大きな課題も容易

知識の関連が複雑な大きな課題も、扱いやすい個々の小さな課題の凍結する木構造に組み立てる事で容易に構築できる。

・新知識の発見

実験・実績データからその中に含まれている規則性（新しい知識）の発見も可能

・自動プログラミング

ロボット等の識別・選別ルール（決定木）をデータから自動プログラミングも可能

Super Expert Plus[®] は英国の人工知能開発の先駆者であり、チューリン研究所の首席科学者およびインテリジェント・ターミナルズ社の最高技術責任者であるドナルド・ミッキー教授により人工知能分野の科学者達の永年の研究の成果を取り入れて完成されたものである。

GURU (統合化エキスパート・システム開発環境)

御知識工学研究所 松本 常三郎

GURUとは：

エキスパート・システム開発ツールと各種OAソフトウェアを統合化したエキスパート・システム開発環境です。GURUはエキスパートシステム技術を利用した問題解決が可能であり、同時に従来型のOAソフトウェアの利用も可能です。また両者を融合させたシステムも無理なく構築できます。

GURUの主な機能：

エキスパートシステム開発ツール、リレーショナル型データベース管理システム、スプレッドシート、ビジネスグラム、統計処理、テキスト・エディタ、手続き型プログラミング言語、フォーム管理、通信

GURUを利用したアプリケーション例：

GURUは、「手軽に」エキスパート・システムを構築し、「身近な」現実的場面「簡単に」応用することを狙ったシステムです。以下は、米国GURUユーザが開発したアプリケーション例です。

・アドバイザーシステム：

ガソリン・スタンドの設置場所選定、旅行相談、会計監査、営業マン支援、宅配業者の選択、人事採用、信用調査、株式購入、薬の副作用についての相談

・マネージメント：

判例管理、受注管理、下請け業者管理、エネルギー管理、営業マンの業績評価

・事務処理：

注文処理、総務処理、統計処理、税務支援

[対応機種]

IBM PC及び互換機 (英語版)

IBM 5540/50/60 (日本語版)

NEC 9800シリーズ (日本語版)

上記以外の機種にも移植の予定

[システム構成]

OS：PC-DOS (MS-DOS)

メモリ容量：640Kバイト

ディスク容量：ハードディスク

10Mバイト以上

原稿執筆者連絡先

会社名	ツール又は システム名	連絡先住所 会社部課名 担当者名	電話番号
<u>メイン・フレーム</u>			
日本IBM機	ESE	☎106 港区六本木3-1-8 AIサポート・センター 占部 薫	03-586-2211 内線5678
日本電気機	EXCORE	☎108 港区芝4-14-2 (第2田町ビル) 情報処理装置システム事業部 販売促進部 システム課 吉田 純	03-454-9111
機日立製作所	ES/KERNEL	☎244 横浜市戸塚区品濃町549-6 ソフトウェア工場AIプログラム部 吉村紀久雄	045-824-2311 内線2577
富士通機	KSA-ESHELL	☎105 港区西新橋3-21-8 (FACOMビル) システム本部第二システム統括部 第一製造工業システム部第三システム課 岸田 明	03-437-5111
機紀伊國屋書店	DBC, DMC	☎156 世田谷区桜丘5-38-1 国際情報部 岩澤まり子	03-439-0123
<u>ワークステーション</u>			
NTT データ通信機	KBMS	☎100 千代田区大手町2-2-2 NTT データ大手町ビル 開発本部 岩下 安男	03-273-5938
(財) 電力中央研究所		☎100 千代田区大手町1-6-1 経済研究所 寺野 隆雄	03-201-6601
機東芝	IREX	☎210 川崎市幸区柳町70 システム・ソフトウェア技術研究所 河野 毅	044-548-5465
ニチメンデータ システム機	ART	☎103 中央区日本橋本町1-3-2 AI技術課 中村 重郎	03-241-2611
日本DEC機	OPSS, NEXPERET, KBMS, ART	☎170 豊島区東池袋3-1-1 サンシャイン60 AIシステム部 武藤 猛	03-989-7055
日本ビジネス オートメーション機	Shell Friday	☎210 川崎市川崎区日進町2-1 JBA ビル 研究開発室 細川 昭男	044-222-7111 内線1884
富士ゼロックス機	CSRL, DSPL	☎100 千代田区霞ヶ関3-2-6 東京倶楽部ビル 尾山 伸一	03-581-9150

富士電機(株)	COMEX, FRUITAX, EIXAX, ΦNET	☎191 日野市富士町1 富士ファコム制御(株)第一システム開発部 萩原 賢一	0425-85-1294
富士電機 エンジニアリング(株)	COMEX	☎210 川崎市川崎区田辺新田1-1 営業開発推進本部 A I 技術室 関本 雅之	044-333-7111 内線 5220
松下電器産業(株)	HALDES, AID	☎571 門真市門真1006 情報システム研究所第1研究室 野口 正弘	06-908-1291 内線514
三菱商事(株)	COREX	☎100 千代田丸の内2-6-3 技術部 インフォメーション・テクノロジー チーム 池谷 裕之	03-210-2572
(株)三菱総合研究所	ZEUS, ZEUS-II	☎100 千代田区大手町2-3-6 統合システム室 小林 慎一	03-270-9211 内線610
三菱電機(株)	Acekit, EXTKERNEL	☎105 港区海岸1-9-15 竹芝ビル 製造システム部 A I 応用 G 水野 裕	03-434-9891
(株)明電舎	KDL	☎141 品川区大崎2-1-17 開発本部開発第三部 松木 直彦	03-492-1111 内線474
横河電機(株)	XLAI	☎163 新宿区西新宿1-25-1 新宿センタービル50階 市場開発本部アプリケーション技術部 A I 推進課 平田 康郎	03-349-0639

パソコン

岩崎技研工業(株)	AI PLAIN TELL, WING	☎101 千代田区神田和泉町1-3-7 繁 周作	03-863-3025
エー・アイ・ ソフト(株)	創玄	☎105 渋谷区渋谷2-10-7 大幸第三ビル5 F 営業部 林 正明	03-498-7301
エーエスアール インターナショ ナル(株)	PROFESSIONAL, EXSYS	☎105 港区虎ノ門1-19-9 虎ノ門TBL ビル7 F 平田 昭子	03-502-5550
(株)構造計画研究所	反応経路選定 エキスパート システム	☎164 中野区本町4-38-13 澤飯 祐子	03-382-6764 内線312
(株)シーイーシー	GoldWorks	☎150 渋谷区渋谷2-17-3 南塚ビル1 F A I システム部 久保山誠士	03-797-3291
システム総合 開発(株)	ESPARON	☎113 文京区本郷1-28-23 弓町秩父ビル 商品企画室 稲林 昌二	03-816-0646
(株)情報数理研究所	コギト	☎151 渋谷区代々木1-55-8 第2西脇ビル 大野泰治郎	03-370-8051

住金システム 開発部	化学反応エキス パートシステム	☎530 大阪市北区曽根崎新地1-3-16 中村 徹	06-346-5131
センチュリ リサーチセンタ(株)	MICCS	☎541 大阪市東区北久太郎町4-68 ソフトウェア部 浜口 顕行	06-241-4121
	PG-PLUS	☎103 中央区日本橋本町3-6-2 A I 部営業課 福森 利明	03-665-9762
(株)第一コンピュータ リソース	Super Expert Plus	☎460 名古屋市中区栄1丁目12-12 佐藤 文臣	052-204-1411
(株)知識工学研究所	GURU	☎101 千代田区東神田2-6-2 タカラビル 松本常三郎	03-865-7771
(株)東芝	MYEXPERT-I	ワークステーションの項を参照	

特集後記

CICSJプレタンでは、特定のトピックスを対象に特集号を1年に1~2回組むことを努力目標として来た。人工知能・エキスパートシステム特集号(4巻4号:1986)を皮切りに、モレキュラーグラフィックス(4巻6号)、ネットワーク(5巻5号)、計算化学(6巻1号)などの特集号を発行してきた。人工知能に関しては、このように1度特集号を組んだわけではあるが、最近この分野への関心は更に高まり、この僅か2年半の間に具体的なイメージが浮かび上がった感がある。それで、今回は視点を移して、パッケージソフトとその利用面から問題を捕らえてみた。幸い、非常に多くの方々からご協力がえられた事を感謝すると共に、そのボリュームのため、2分割して掲載するという形式を取らざるを得なかった。前号は利用者の立場から、今号ではツールの作成者から見た特集となっている。色々の見方がお役に立てば幸いである。最後に、本特集の企画・編集は一貫して宮原幹事に担当して頂き、更に、編集段階で、石田・石塚両幹事に参加して頂いたことつけ加えておく。(鈴木 功)

人工知能については5年くらい前から興味を持って調べ始めたが、今回それを活用でき、自分でも一段と勉強になった。特集号は可能な限り買い、易しい本とは言え自費で50冊ばかり買って読み漁ったりした。英語の本も読んだし新聞も注意深く観て情報を集めた。人工知能学会にも入会した。

特集を終えてみて、「実用化とは何だろう」ということをふと考えた。実はまだプロトタイプの段階といった方がよいのではないか。ルール数もそれ程多くなくて、Expert System というよりNon-Amateur Systemとでも言った方がふさわしいかもしれない。ほんとの Expert Systemになるにはルール数が数千に増えて、非単調論理の問題が解決されたとき(ファジーの考えが必要な気がする)ではあるまいか。

ともあれ、Flexible Programmingの段階でもある(にすぎない)が、少しづつ実用化されていることは喜ばしい。(宮原 豊中)

途中から編集委員に参加した筆者は、今回の特集号のお手伝いをするのが初めての仕事らしい仕事であった。宮原委員の御尽力で集められたユーザーサイドからの寄稿原稿をまとめさせて頂いたが、いずれの原稿も苦心の跡が伺えるもので、限られた紙面に納めるために一部を割愛せざるを得なかったのは心苦しい次第だった。また、短い報告ではあっても経済活動上の戦略に活用されることも有り得る人工知能の紹介のため企業秘密に属する内容のことも多い中で、ご紹介頂いたのは氷山の一角と思われる。確実なことは、昨年一昨年頃の“人工知能”講習会ブームが過ぎ去り、化学関連の民間企業でも実用化段階に入っていることである。急がれるべきことは、化学系の学生へもナリッジ・エンジニアの素養を身に付けさせるような人材養成のコースを設けるぐらの、教育機関の先見性である。(石田 嘉明)

エキスパート・システムが流行していることは知っていたが、化学の会社がこれほど熱心に取り組んでいるとは正直思わなかった。この特集のお手伝いをしたお蔭で、この二年半の状況変化を実感することができた。大学、大学院と化学を専攻し、必要に迫られて専門をデータベースや情報処理に転じ、最近知識ベースに興味を持っている者としては、嬉しくまた頼もしい感じがする。

もっとも、これからが大切な時期であろう。第5世代コンピュータのプロジェクトでも最近益々基礎研究の重要性が認識されていると聞く。化学の分野で現場の知恵と研究が結びつき、エキスパート・システムが一層発展することを期待したい。(石塚 英弘)

「化学者のためのパソコン講習会」報告

情報化学部会の昭和63年度の活動の一つとして、9月2日と3日の両日、それぞれ神戸学院女子短期大学第一学舎と日本電気パソコン教室（大阪市新大ビル）にて上記講習会を開催したので、その状況を報告する。

化学関係の研究室においてもパソコンが見られることが普通になってきたが、まだ十分に活用されていない場合も多いと思われる。そこで、パソコンをもっと化学の研究に役立てたいと思っている人を対象に、実習を中心とした1日コースを企画した。講師としては、三重大学農学部田口 寛氏、広島大学理学部深沢義正氏および姫路工業大学工学部中野英彦氏の三氏に、それぞれ約2時間の講習時間をお願いした。また、実習機材としては、日本電気のPC-9801シリーズ機を使用した。

まず、田口氏により「化学領域におけるパソコンの各種活用法」と題して、氏の幅広い経験に基づいた、化学計測・制御、数値計算、作図・作表、通信、ワープロなどの場面におけるパソコンの利用法の、スライドによる事例紹介があった。そして後半、(備)ソフトサイエンスのサイエンスグラフを使った化学反応式、曲線グラフなどの作図実習があった。参加者各自が、思い思いの作図に熱心に取り組まれていた。

昼食後、深沢氏による「パソコンによる分子力学計算入門」があった。ここでは、まず、アリンジャーにより開発され、現在広く利用されている分子力学計算プログラムMM2を中心に、分子力学計算についての概説および、反応性の説明・予測など有機化学の分野における応用例の紹介があった。次いで、3-メチルシクロヘキセンを例として取り上げて、MM2計算の実習が行われた。この講習により、分子力学計算を身近に感じられたことと思う。

最後に、中野氏により「パソコンによる分子構造表示」についての実習があった。ここでは、氏により開発され、種々の機能を備えたプログラムMODRAST-Eが使われた。表示する分子として、まず、深沢氏の講習の際計算された化合物が取り上げられた。また、包接化合物の空間充填模型の切断図形の表示なども行われた。

本講習会では、1日目24台、2日目16台のパソコンを使用し、1人1台あるいは2人1台で実習を行った。この中の何人かの方には、参加申し込み締め切り後使用できるパソコン台数が減ったために、1人1台の方を希望されていたにもかかわらず、無理をお願いして2人1台の方へ回って頂いた。

参加者の地域別人数を見ると、当然のことながら、近畿地区が39名と全体の約70%を占めた。この他に、東海4名、北陸2名、中国3名、関東4名、北海道1名であった。また、勤務先別では、企業35名、大学14名、短大、高校、公立研究所、その他各1名であった。なお、満員のために断った方の数が約10名あった。

最後に、本講習会の開催にあたり、ご援助・ご協力を頂いた神戸学院女子短期大学および日本電気株式会社のご関係各位に、本紙面を借りて深謝の意を表したい。特に、神戸学院女子短大の中野 修氏および日本電気の三原宏記氏には、会の運営にあたり、いろいろとご助力頂いた。また、忙しい中、2日間にわたり講師を引き受けて頂いた先生方に心からお礼申し上げたい。

(住友化学工業備宝塚総合研究所 高山 千代蔵)

第57秋季年会 報告

1B401~1B407

筆者が座長を務めた 1B401 - 1B407の講演についてその概要を報告する。やむおえないことではあるが、講演時間が短かったことと、継続的に行なわれている研究の現状報告的なものが多かったせいで、初めて聞く人にとっては内容がわかりにくかった様に思われた。

1B401 は無機結晶構造データのグラフィック表示を目的としたライブラリファイルの作成に関する報告であった。

1B402 と1B403 は同じ演者によるものでまとめて報告されたが、内容は ^1H 及び ^{13}C -NMR スペクトルデータベースの検索システムにおいて単独スペクトルによった場合と両スペクトルを併用した場合の検索精度に関する報告であった。

1B404 ではX線粉末回折データから格子定数及び空間群を求める為のパーソナルコンピュータプログラムの作成の現状報告がおこなわれた。

1B405 はX線結晶構造解析のパーソナルコンピュータ化に関するものでその進捗状況とパーソナルコンピュータとスーパーコンピュータの演算速度の比較などが報告された。

1B406 は多環芳香族炭化水素類(PAH)の発ガン性の予測と、構造と変異原性の相関をパターン認識法で検討した結果の報告であった。

1B407 では有機化学反応の出発物と生成物の構造式を入力することによって、可能なすべての反応経路を列挙するプログラムが報告された。

(豊橋技科大 阿部 英次)

1B408~1B413

1B408 エキスパートシェルによる有機合成支援システム構築の試み(富士通)馬場、湯田
標的とする有機化合物の修飾によってその物質の合成におけるキー化合物を形成する作業を ESHELL によって実現した結果を報告した。

1B409 有機合成設計システム CASINO の開発(7)(化技研)内丸ら(富士通)湯田ら
候補出発物質と標的化合物の間の候補反応行列を、結合組替え数と共通原子数を指標として設定する方法と実行検証例について報告した。

1B410 アミノ酸・核酸配列解析システムの開発(1)(大日本製薬)藤原ら
配列の決定されている未知物質とデータベース中の既知物質のホモロジーを計算評価し未知物質の機能予測を行なうシステムを作成し、その応用例とともに報告した。

1B411 環系部分構造の自動認識(豊橋技科大)高橋ら
与えられた構造式に含まれる可能な全ての環系部分構造を抽出するためのアルゴリズムとその実行例について報告した。

1B412 複数種半導体ガスセンサーシステムによる、ある環境物質の存在下における特定の物質の検出(豊橋技科大)金谷ら

複数種の半導体ガスセンサーを用い、ある環境物質の存在下で特定の物質の注入前後のセンサー抵抗値から物質の認識を行なう方法とその応用例について報告した。

1B413 活性点のトポケミカルな分布を有する微粒子固体の反応速度過程の解析(慶大理工)町田、仙名

ほぼ等しい局部ポテンシャルエネルギーを持つ2つの2次元粒子モデルを作成し原子配列による原子除去の速度過程の違いを計算した結果について報告した。

(東北大・工 山下 善之)

文献紹介

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

第28卷第3号(8月) 論文題目、著者、頁

Use of Augmented Lagrangians in the Calculation of Molecular Conformations by Distance Geometry, *G. M. Crippen, A. S. Smellie, and Jeffrey W. Peng*, p.125

Canonical Numbering and Coding of Imaginary Transition Structures. A Novel Approach to the Linear Coding of Individual Organic Reactions, *Shinsaku Fujita*, p.128

Canonical Numbering and Coding of Reaction Center Graphs and Reduced Reaction Center Graphs Abstracted from Imaginary Transition Structures. A Novel Approach to the Linear Coding of Reaction Types, *Shinsaku Fujita*, p.137

Ring ID Numbers, *Milan Randic*, p.142

Chemical Reaction Searching Compared in REACCS, SYNLIB, and ORAC, *J. H. Borkent, F. Oukes, and J. H. Noordik*, p.148

ACS Committee on Nomenclature: Annual Report for 1987, *Kurt L. Loening*, p.150

REACCS in the Chemical Development Environment. 1, *John E. Mills, Cynthia A. Maryanoff, Kirk L. Sorgi, Lorraine Scott, and Robin Stanzione*, p.153

REACCS in the Chemical Development Environment. 2. Structure and Construction of Proprietary Databases, *John E. Mills, Cynthia A. Maryanoff, Kirk L. Sorgi, Robin Stanzione, Lorraine Scott, Leonard Herring, Julie Spink, Barbara Baughman, and William Bullock*, p.155

Using Analytical Data to Build Expert Systems, *W. A. Schlieper, T. L. Isenhour, and J. C. Marshall*, p.159

COMPUTER SOFTWARE REVIEWS

NBS Standard Reference Database, NBS/EPA/MSDC Mass Spectral Database PC Version, Reviewed by *Yechezkel Wolman*, p.164

JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN

1988年第2卷第2号(7月) 論文題目、著者、頁

Comparative review of molecular modelling software for personal computers, *Maruse Sadek and Sharon Munro*, p.81

Computer simulation of the binding of quinocarcin to DNA. Prediction of mode of action and absolute conformation, *G. Craig Hill, Timothy P. Wunz and William A. Remers*, p.91

An investigation into the construction of molecular models by the template joining method, *Andrew R. Leach, Keith Prout and Daniel P. Dolata*, p.107

A modification to the COSMIC parameterisation using ab initio constrained potential functions, *Raymond J. Abraham and Ian S. Haworth*, p.125

Computer simulations in zeolite chemistry, *S. Ramdas*, p. 137

Perspective in QSAR: Computer chemistry and pattern recognition, *R. M. Hyde and D. J. Livingstone*, p. 145

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1988年第6卷第3号(9月) 論文題目、著者、頁

Spatial density distributions for illustrating the base sequence depending features of double helical DNA: Computer graphic visualization of Monte Carlo chain simulations, *A. R. Srinivasan and W. K. Olson*, p. 126

The matching of protein sequences using color intrasequence homology displays, *G. M. Morris*, p. 135

Context-free spheres: A new method for rapid CPK image generation, *T. C. Palmer and F. H. Hausheer*, p. 149

MANOSK: A graphic program for analyzing and modeling molecular structure and functions, *J. Cherfils, M. C. Vaney, I. Morize, E. Surcouf, N. Colloc'h, and J. P. Morton*, p. 155

BRAGI: A comprehensive protein modeling program system, *D. Schomburg and J. Reichelt*, p. 161

A model for the graphical display of pseudorotation in small rings, *A. P. Tonge, D. A. Chan, and P. Murray-Rust*, p. 166

Theoretical studies of the electrostatic potential of some enzyme inhibitors using computer graphics techniques, *C. Thomson, D. Higgins, and C. Edge*, p. 171

COMPUTERS & CHEMISTRY

1988年第12卷第4号 論文題目、著者、頁

Etude par microordinateur de l'influence des atomes voisins sur les signaux RMN de ^{13}C , *J. P. Gastmans, V. E. de Paula et H. Furlan*, p. 285

Determination of the first order consecutive reaction rate constants from final product, *Joseph Chraszil*, p. 289

A comparative study on some methods for computing equilibrium concentrations, *Jaroslav Kostrowicki, Adam Liwo and Krzysztof Sokolowski*, p. 293

A Computer-based temperature measurement system, *F. T. Chau and K. D. Chan*, p. 301

The calculation of equilibrium concentrations. ESTIME: a computer program for comparing execution times on different machines, *Concetta De Stefano, Pietro Princi, Carmelo Rigano and and Silvio Sammartano*, p. 305

Microcomputer-assisted temperature programmed desorption studies, *H. S. Tan, P. Chiarot and W. E. Jones*, p. 317

A generalization for mixtures of a fast algorithm to calculate some intermolecular orientational averages, *S. Lago and C. Vega*, p. 343

Performance of the HQR111 diagonalization routine, Tom Nicol, p. 357

The Visual Display of Quantitative Information, by Edward R. Tufte, DeLos F. Derar, p. 359

*
* 本誌への寄稿のお願い *
*
*
*
*
*
*
*
*
*
*
*
*
*

本CICSJ Bulletinでは、部会員の方々の寄稿をお待ちしております。
本誌に相当と思われる原稿を出来ればワープロ原稿（A4またはB5）にてお送り下さい。
会員広場への投稿或いは海外で開催されるシンポジウム等のニュース・予告などでも結構です。
尚、原稿締切日は発行月（奇数月）の10日です。

情報・原稿の送付先 ㊟101 東京都千代田区神田駿河台 1-5
社団法人 日本化学会 情報化学部会 事務局
電話 (03) 292-6162

*
* 情報化学部会部会員増加にご協力を! *
*
*
*
*
*
*
*
*
*
*
*
*
*

【昭和64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、下記までご連絡下さい。

㊟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）

国内の動き

日本薬学会第109年会

応用コンピュータ部会（旧視聴覚教育部会）

さて、会誌「ファルマシア」9月号などで予告されておりますように、来春名古屋で開催されます日本薬学会第109年会（1989年4月4日～6日）においては、従来の視聴覚教育部会が応用コンピュータ部会に改められ、コンピュータを利用した薬学諸分野の研究発表、討論の場が設けられることになりました。

応用コンピュータ部会では、一般講演（口頭発表）を募集いたします。今後のこの分野の進歩と本部会の定着、発展のために、奮ってお申し込み下さいますよう、お願いいたします。講演要旨締切は11月19日（土）です。詳細は「ファルマシア」をご覧ください。予想されます内容としては、次のようなものがあります。

- | | |
|-----------------------|--------------|
| ◇生体情報、分子情報、遺伝子情報 | ◇構造解析、物性推算 |
| ◇分子間相互作用、薬物受容体相互作用 | ◇構造活性相関 |
| ◇分子設計、薬物設計 | ◇合成設計、反応予測 |
| ◇自動分析、ラボラトリー・オートメーション | |
| ◇医薬品情報、医療システム | ◇薬物動態解析、投与設計 |
| ◇データベース、データ管理、データ通信 | ◇各種シミュレーション |
| ◇プログラム、システムの開発 | ◇薬学教育とコンピュータ |
| ◇その他 | |

なお応用コンピュータ部会では一般講演のほかに外人特別講演、パネルディスカッション、デモンストレーションなども計画しておりますので多数の参加をお待ちしております。

一般講演についての問い合わせ先：

〒108 東京都港区白金5-9-1

北里大学薬学部 森口郁生

TEL 03-444-6161

〒606 京都市左京区吉田下安達町46-29

京都大学薬学部 町田勝之輔

TEL 0756-753-7531

コンピューターケミストリーシステム一覽

(63年10月現在)

*この表は昭和63年10月31日(月)の化学工業日報に掲載されたものを、ご好意で転載したものです。

商 品 名	国内販売会社	開発会社	機 能	特 徴	シ ス テ ム 構 成	ソ フ ト 価 値	出 産 年 月	販 売 展 望
ACACS	日本電気	日本電気、住友化学工業	データベースから三次元グラフィックシステム、理論計算までの統合型分子設計支援システム	未知たん白質のモザイクと、ACACSと連動した薬物-受容体の相関研究が可能 薬物-受容体の管理、加工、技術から研究レポート作成まで一貫処理する	ACOS-4系	6500万円	60年12月	
BIOCES	"	日本電気、住友化学工業、キヤセイ薬品工業など			"	2,000万円	61年10月	
micro-RESEARCH	"	日本電気			EWS4800シリーズ	15万円	61年7月	
ANCHOR	富士通	富士通、興羽化学工業	理論化学計算をベースにした分子設計支援システム	ANCHORと連動する分子情報/反応情報データベースマネージメントシステム	FACOM M.Aシリーズ	2,900万円	61年6月	14システム
MACCS	"	米モレキュラーデザイン			"	3,500万円	58年11月	15システム
REACCS	"	"			"	2,300万円	60年5月	7システム
ADAPT	"	"			"	1,200万円	61年7月	9システム
CHEMTERM-BM	"	富士通			FMR-60, 70	30万円	63年5月	約90本
CHEMTERM-E	"	"			"	20万円	62年1月	"
MODEL-MATE	日立製作所	日立製作所、クラレ	分子設計支援のトータルシステム、データベースを充実し、あらゆる材料設計に対応		H-1 TACSシリーズ M-240, 640以上	3,300万円	62年12月	
MOL-GGRAPH	ダイキン工業	ダイキン工業	汎用型分子設計支援システム、たん白、材料設計向けの機能を拡張、新モジュールを年間5-6本追加する		IBMなど各社採用コンピュータ、VAXシリーズ、TRIS-4D/G Tシリーズ	1,100万円~	62年7月	23システム
INTERMOL	分子	分子	分子力場法および分子動力学法を背景とした分子設計支援システム、たん白質のデザインも可能		クレイ、SUN-4	2,500万-6,000万円	62年7月	2システム
MOGLI	理経	米エバンズ&サザランド	対話型三次元グラフィックSPS300の機能を注した分子モデリングソフト。各種データベースとQCPEプログラムへのインターフェースを装備。ソースコードも提供		VAXシリーズとPS 300	1,000万円	60年9月	
CONCORD	"	"	スマイル表記法で記述された構造式を入力すると、立体構造の三次元座標を高速生成するシステム		"	400万円	63年4月	
CHEM-X	"	英ケミカルデザイン	拡張可能なモジュラー形式の分子設計システム。取り扱える原子、分子、ボンドの数に制限がなく、コンフォメーション解析、各種エネルギー計算とその表示機能が優れている		"	1,100万円~	61年3月	
BIOGRAF	"	米バイオデザイン	生体高分子を主とした分子設計システム。たん白質の一部や後置をその属性に応じて対話形式でまとめて扱うグループ機能が便利		VAXシリーズ、SUN-4、アライアントFXシリーズ	945万円~	61年2月	
POLYGRAF	"	"	合成高分子用の分子設計支援システム		"	"	63年	
ALCHEMY	"	米トリボス	汎用型分子設計支援システム		IBM-PC/AT	20万円	60年7月	
MACCS/DATA	伊藤忠/テクノサ	米モレキュラーデザイン	化合物データベース管理システムとゲーム		ホスト...VAXおよびIBM	2,700万-6,000万円(1システム当たりソフト価格)		
CCSH	"	"	反応情報データベース管理システム		ディズプレ...エンビジョン、テクトロニクス			
REACCS	"	"	分子設計支援システム、約100本のプログラムで構成、分析化学関連の処理も追加					
CHEMLAB-II	"	"	構造解析システム、自動的に三次元					
ADAPT	"	"	配座を計算、パターン認識によるQSA					

BIONSTATION		米インテリジェネティク	エンジニアリングウエクスプレッションSUN-2ベースの遺伝子情報解析システム	SUN-2	約2,400万円(システム価格)	60年1月
BION	"	"	遺伝子情報解析システム。ミニコンベースの高信頼性が特徴	VAXシリーズ	約1,800万円(システム価格)	61年4月
RS/1	"	米BBN	化学実験データの管理および解析システム	"	2,000万~3,000万円	62年3月
CHARMM	"	米ポリジェン	分子動力学法を用いたタンパク質分子設計支援システム	IRIS-4D/GTシリーズ、FPS、グレイ、スチラスGS1000、コンパックス		62年3月
QUANTA X-FLOR	"	"	CHARMM用のグラフィックソフト	TITAN	3,000万円(ハード含む)	63年9月
サ・モレキュラー・シミュレーション	クボタコンピュータ	米バイオデザイン	BIOGRAF、POLYGRAFをグラフィックスーパーコンピュータにチェーシングし、一体化したシステム	VAXシリーズ、IRIS-4D/GTシリーズ、SUN-4、コンパックス	800万円(モデル当たり)	60年
SYBYL	三井物産	米トリボス	モジュールの拡張で、生体高分子、合成高分子にも対応できる汎用型分子設計支援システム	SUN-4、コンパックス	30万円	62年9月
NITRO	"	"	パソコンをSYBYLの端末として使うための専用ソフト	IBM-PC/AT、マックINTOSH	20万円	62年
ALCHEMY	"	米ハイオシム	有価底分子から生体高分子まで対応可能な分子設計支援システム。ピッキングユーザによるリアルタイムコンソシアムで力場のパラメーターを吟味	IBM-PC/AT	1,600万~2,300万円(INS1 GHT含む)	62年9月
DISCOVER	三菱商事、薬化システム	"	DISCOVER用のグラフィックソフト	クレイ、VAX、FPS、コンパックス、アライメント、IRIS		62年9月
-INGLIGHT	"	"	電子密度汎用法の計算プログラム。非経験的分子軌道法による疎水定数 ϵ_0 & Pの推定プログラム	FACOM、IBM、VAXXシリーズ	150万~200万円	64年 62年11月
D-MOL A-LOG P	"	薬化システム	有機合成反応のライブラリーとデータベース管理システム。52,000件の反応を取録	VAXシリーズ	1,400万円	62年
SYNLIB	東洋情報システム、ディアイエシステム、エイジシステム	米ディストリビューテッド・ケミカルグラフィックス	リードセネレーション志向の分子設計支援システム。データベース管理からモデリング、理論解析、グラフィックスなどEWSで実行	DS/7500シリーズ	950万~(ハード含む)	63年4月
TEO/CHEMICAL	日本データセナラ、真備産業	真備医科大学	有機薬理法を用い、複合材料の構造体の設計、解析を行うシステム。様々な樹脂ファイバーの組み合わせに対応	VAX、SUN、IRISなど	480万円(年間ライセンス料)	62年
P/COMPOSITE	サイバネットシステム	米PDAエンジニアリング	ニューロコンピュータの原理を応用して、スベクトルのデータベースから未知材料のスベクトルを逆推検する。化合物の同定に役立つ	VAXシリーズ	約500万円~	63年8月
SAVVY/Analysis	日経情報システム	日経情報システム	X線結晶構造解析の結果を表示できる分子グラフィックスシステム	IRISシリーズ	600万円	62年
FRODO	住友電子システム	カリフォルニア大学サンディエゴ校	市内の分子グラフィックスシステム。外部計算プログラムとのインターフェースも完備	"	850万円	62年
MMS	"	"				
GEM	グラフィカ	グラフィカ	ユーザーが解析したりプログラム処理してできた分子構造に関するデータベースから、三次元分子モデルを作成する	ホスト名機種 +自社製グラフィック ディスプレイ 1, Mシリーズ	60万円	58年

GDP-98	日興通信	東京大学 環島二部	米國プロテインデータバンクが提供するたんぱく質、核酸などの三次元配座データをもとに別所蔵でパソコン上に分子構造を立体表示。最大9,000原子まで表示可能。グレースケール、グラフィックス機能を大幅に向上。実用的機能を重視し専門研究者の間で広く使えた	PC-9801シリーズ	17万円	61年5月
GDP-98PTO	"	"	三次元分子構造表示ソフト	PC-9801シリーズ	5万円	62年11月
MOL	ミタススタジオ	IBC	生化学用ソフト	PC-9801シリーズ	1万円	
化学ライブラリー1-13	IBC	大久保マイコン	化学情報ファイルシステム	PC-9801シリーズ	12万円8千円	
BIOCHEM	大久保マイコン	データマック	パソコンで核酸配列データ、たんぱく質データを解析するソフト。完全カラーグラフィック版。核酸配列解析、核酸配列決定、ベプチド、たんぱく質構造解析、たんぱく質データベースの利用	16ビットパソコンと自社製各種周辺機器	38万円	58年1月
サーチマック	データマック	ソフトウェア開発	先子データベースの構築、たんぱく質データベースの構築、たんぱく質配列、A・T・G・Cの音声出力		50万円(ハード含む)	約350台
GENETYX-CD	"	"	核酸配列入力、DNAフラグメントサイジング装置、核酸配列フィルム映写機		45万円(ハード含む)	
GENETYX-VOI	"	"	シーケンスを自動的に核酸塩基情報として入力		38万円(ハード含む)	
GENETYX-IN	"	"	遺伝情報配列処理。DNA、アミノ酸配列解析が必要とされるKb、P単位の結果を一画面に出力		30万円(ハード含む)	
GENETYX-PL	"	"	遺伝子情報解析システム。DNAシーケンスの入力、解析、DNAシーケンスの連結、アミノ酸の入力、解析、たんぱく質の解析、簡易な入力方式とデータベース検索方式。直感的な解析ソフト。簡便なデータベース検索方式。シーケンスフィルム全自動認識装置も新発売	B-16EX IIシリーズ、PC-9801	160万円	59年10月
DNASIS	宝通、日製産業	日立ソフトウェアエンジニアリング	遺伝子情報解析ソフト。ホモロジー検索が得意。三年の実績			300本(海外400本)
GENIAS	東洋紡エンジニアリング科学機器部	三井情報開発	パソコン用遺伝子情報解析ソフト。ホモロジー検索が得意。三年の実績	16ビットパソコン用	52万円	57年
GRASE	"	"	DNA組合集プログラム。MBジョイントガン法などのフラグメントを自動結合	"	25万円	59年
PRINAS	"	"	ベプチド、たんぱく質一次構造解析ソフト	ソフトウェア+データベース	70万円	59年12月
EKAS	"	"	おおよびアミノ酸配列データベース	16ビットパソコン用	10万円	61年6月
GEMS	"	"	酵素活性解析ソフト。Km、Vmax、Kiなどを決定するためのソフトウェア	"	8万円	61年1月
BIODIS	"	"	フィンダイジエーション法による計算	"	10万円	61年3月
GENAR	"	"	生体高分子の立体構造プログラム。たんぱく質などの三次元グラフィックス表示	ソフトウェア+デジタルライザ	(A)40万円 (B)50万円	59年12月
GEFRAS	"	"	核酸配列入力システム。デジタルライザ利用	ソフトウェア+デジタルライザ	(A)25万円 (B)46万円	61年3月
Microgenie	ベックマン	米ベックマン	パソコン用遺伝子情報解析システム。米ベックマンのアルゴリズムを採用しており、迅速でハードディスクからデータ検索する	IBM-PC/AT、PC-9801シリーズ	78万円	62年3月
バイオブレイン	システムブレイン、ターアブシステムズ	システムブレイン	DNA配列の抽出、検索、合成、アミノ酸配列、組成、検索。コードンの使用頻度、分子重計算。変性地図の作成。ホモロジー解析。HAR-Plot圖の作成など。操作性の向上	PC-9801シリーズ他	30万円(1モジュール当たりソフト価格)	60年9月
DNA解析システム	電子システム	電子システム	パソコン用遺伝子情報解析システム	PC-9801シリーズ		

海外動向

Meetings

23-25 January 1989.
Drug Information Association's 5th Biennial Computer-Assisted Chemistry Workshop.
San Francisco, CA.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 113, Maple Glen, PA 19002 or Dr.
"Babu" Venkataraghavan, (914-735-5000, x3406), or Dr. R. Venkataraghavan, Director,
Research Computing, Lederle Laboratories, Pearl River, NY 10965

21-23 February 1989.
Super computing Europe '89
Utrecht, THE NETHERLANDS.
Contact: Meridian Pacific Group, Inc., 116 East Blithedale Avenue, Suite 2, Mill
Valley, CA 94941 (415-381-2255).

6-10 March 1989.
The Pittsburgh Conference and Exposition.
Atlanta, Georgia.
Contact: Dr. Richard Obrycki or Dr. Thomas Conti, The Pittsburgh Conference &
Exposition, 12 Federal Drive--Suite 322, Pittsburgh, PA 15235 (412-795-7110).

9-14 April 1989.
197th ACS National Meeting.
Dallas, TX.
Contact: B. R. Hodsdon, 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).
Program Chairman for Division of Computers in Chemistry: A. L. Smith, Department of
Chemistry, Drexel University, Philadelphia, PA 19104 (215-895-1861).

14-19 April 1989.
Computer Modeling of Carbohydrates.
Dallas, TX.
Contact: Dr. Alfred D. French, Southern Regional Research Center, U. S. Department
of Agriculture, P. O. Box 19687, New Orleans, LA 70179 (504-286-4250).

28 May-2 June 1989.
IXth International Conference on computers in Chemical Education and Research
(ICCRE).
Riva del Garda, ITALY.
Contact: Dr. Mario Marsili, IXth ICCRE, Piazza Gondar, 14, 00199 Rome, ITALY

1-11 June 1989.
Three-Dimensional Molecular Structure and Drug Action.
Erice Trapani, Italy.
Contact: Prof. L. Riva di Sanseverino, Istituto de Mineralogia, Piazza Porta San
Donato 1, 40127 Bologna, Italy.

20-25 August
Protein Engineering '89 第2回蛋白質工学国際会議
神戸国際会議場
Scientific Programme
Session I : Theoretical aspects of protein
Session II : Structural aspects of protein
Session III : Functional aspects of protein
Session IV : Medical and industrial aspects of protein
Workshop I : Database

Workshop II : Secretion and translocation of prrotein

連絡先: 〒565 吹田市古江台6-2-1 00蛋白質工学研究所 ☎06-872-8206 FAX 06-872-8210

10-15 September 1989;

198th ACS National Meeting.

Miami, FL.

Contact: B. R. Hodsdon, 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).