ISSN 0913-3747

CICSJ Bulletin

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

新しいFORTRAN 特集号

日本化学会
情報化学部会
Volume 8, Number 1
January 1990

目 次

特集：新しいFORTRAN

「新しいＦＯＲＴＲＡＮ」特集にあたって
＝　編集委員会より　＝

今井　賢（立正大・教養）

プログラミング言語に関する特集の企画は、かなり以前から度々編集会議に挙がっていたそうである。当編集委員会ではこれを受け、実現に向けての検討を重ねてきた。その結果、プログラミング言語全体としての特集はあまりにも広範囲に渡るため、１つの言語にテーマを絞ることとし、本号を組む運びとなった。側聞するところによれば、世の中で動いているプログラムの中で最も多いものはＣＯＢＯＬであり、作られたプログラムの中で最も多いものはＦＯＲＴＲＡＮであると言われている。特に化学者が大半の当部会員にとって最も使用されているプログラミング言語は今も昔もＦＯＲＴＲＡＮであろう。もっとも、以前からＡＰＬ大好き人間も居れば、最近ではＢＡＳＩＣ、Ｃ、Ｌｉｓｐ、Ｐｒｏｌｏｇ、の利用者も増加していることは確かであるが、まだ小数派である。現在はＦＯＲＴＲＡＮ７７の時代であるが、数年前新しいＦＯＲＴＲＡＮ（Ｆｏｒｔｒａｎ８Ｘ）の標準化についての記事がｂｉｔに掲載された。当時ＦＯＲＴＲＡＮユーザの間で話題となったが、その後の情報は一般に公開されずに今日に至っている。しかし、その間Ｆｏｒｔｒａｎ８Ｘの標準化は停滞していたのではなく、着実に脱皮を繰り返していたのである。８Ｘはまだドラフトの段階で制定されたわけではないが、編集部では、会員の大多数に直接的に影響を与える「新しいＦＯＲＴＲＡＮ」について、本誌を通していち早く最新情報を提供したいと考えるものである。

さて、Ｆｏｒｔｒａｎ８Ｘの総説を菅忠義先生（学習院大学理学部）にお願いした。菅先生は一昨年まで、ＪＩＳ－ＦＯＲＴＲＡＮの主査を務められ、文字どおり日本におけるＦＯＲＴＲＡＮの育ての親であられる。流石に標準化のプロの原稿は論理的に一寸のバグのないもので、化学者向きにご執筆頂いたとは言え、経験とそれに裏付けされる直感とを誇る化学者にとっては多少読み慣れない論調となっている。しかし、言語の国際標準に至るまでの経緯についての簡単な紹介もあり、標準化に係わる多くの方々の正確な作業と地道な努力とを読み取ることができよう。この地味で目立たぬご苦労を我々ユーザは忘れてはならない。

更に、その内容で特に化学者にとって注目すべき点は、計算的機能の拡張とＣＨＡＲＡＣＴＥＲ文のパラメタ化である。前者は、並列処理や配列処理等において計算化学者がすぐにも適用したい機能である。後者は、ＫＩＮＤパラメタを各分野または各研究機関が如何に活用できるかにかかっていると受け取れよう。ユーザの活用能力によっては興味のあるところである。

総説にも述べられているように、Ｆｏｒｔｒａｎ８ＸはＦＯＲＴＲＡＮ７７が国際標準となる1977年から既に検討委員会が作られている。その後１０数年という永い期間検討がなされてきたこと、並びに委員会のメンバの多くがユーザ側であることなどからＦｏｒｔｒａｎ８Ｘの仕様は膨大なものになっている。従って、そのコンパイラを提供するメーカの対応は厳しいものであると推察する。そこで、各メーカの８Ｘへの準備状況（コンパイラ、ライブラリ等）、特に強調したい点、独自の機能等について、現在のコンパイラの紹介も併せて各社から原稿をお寄せ頂いた。（残念ながら、ご辞退されたメーカもあったことをお断わりする。）

最後に、趣旨にご賛同頂きご多忙中玉稿をお送り頂いたご執筆者・ご協力者に対し厚く御礼を申し上げるとともに、ＦＯＲＴＲＡＮに限らずプログラミング言語のよりよい発展・進化を心から願う次第である。

Fortran８Ｘの総説

（学習院大・理）　菅　忠義

０．はじめに

ＦＯＲＴＲＡＮは、８Ｘ以後はＦｏｒｔｒａｎと書くようになった（以下では、両者を使い分ける）。開発中の８Ｘは膨大な仕様を持つので、ページ数の制限を考えて、ここでは思想面に重点をおいて解説し、その考えがどの様に具体化されているかをごく簡単に項目を示す程度に紹介する。具体的仕様については、当特集の他の記事および、１９８５年時の仕様であるので、多少の変更点はあるが、［１］を参照されたい。なお、ＪＩＳで未定の用語は英語のまま用いる。

１．８Ｘの開発

１．１　ＦＯＲＴＲＡＮの国際（ＩＳＯ）標準制定の歴史的経過

（１）最初の標準ＦＯＲＴＲＡＮ：ＦＯＲＴＲＡＮは、１９５６年にＩＢＭが言語仕様を発表し、１９５７年にそのコンパイラも公開された。その後、ＩＢＭ以外でもＦＯＲＴＲＡＮ風の言語及びコンパイラが作成されるようになり、多くの方言ができて利用者を悩ませるようになった。このような状況からＦＯＲＴＲＡＮの標準化の要求が高まり、ＡＳＡ（現在のＡＮＳＩ）において、ＦＯＲＴＲＡＮを標準化する作業委員会（Ｘ３．４．３）が設けられ、１９６６年に米国の国内規格として制定された。これがＩＳＯでも国際規格として承認され、日本では１９６７年にＪＩＳ　ＦＯＲＴＲＡＮとなった。このＦＯＲＴＲＡＮのことを米国ではＦＯＲＴＲＡＮ６６といっている。

（２）ＦＯＲＴＲＡＮ７７：米国では、１９７０年以来ＡＮＳＩのＸ３Ｊ３という委員会が改訂ＦＯＲＴＲＡＮの開発を行い、１９７７年に改訂原案をＦＯＲＴＲＡＮ７７という名前で公表した。これがＩＳＯでも承認され、国際規格となり、日本では１９８２年に改正ＪＩＳ　ＦＯＲＴＲＡＮとなった。現在、広く用いられているＦＯＲＴＲＡＮはこれである。

（３）Ｆｏｒｔｒａｎ８Ｘ：１９７７年１１月にハーグで、ＩＳＯのプログラム言語に関する委員会（ＩＳＯ／ＴＣ９７／ＳＣ５）の国際会議が開かれＦＯＲＴＲＡＮ７７を国際規格の原案（ＤＰ）とするか否かが審議されたが、この会議中に次期Fortranに関するadhocグループがつくられ、議論された。また、この時の総会（plenary）で、次期Fortranの開発をＡＮＳＩに委託することが決められた。ＡＮＳＩのＦＯＲＴＲＡＮ開発作業委員会Ｘ３Ｊ３は、これを受けて数十人のメンバーが隔月に、米国の各地で、１週間ホテルに泊り込みで作業委員会を開き、今日にいたるまで十年余り作業を精力的に継続してきた。１９８５年7月にＸ３Ｊ３内でＳ８．９８という文書が出され、それまでの開発結果が一応まとめられ、その後の修正を行なった文書が１９８７年末に、米国内で公開審議（public review）にかけられた。１９８６年頃からは、ＩＳＯの場においても積極的にＦｏｒｔｒａｎ８Ｘに対して議論が行なわれるようになり、Ｓ８．９８の内容にかなりの変更要求が出され、ＩＳＯの規格原案（ＤＰ）の候補として、１９８８年末にＩＳＯ／Ｎ３３５、また１９８９年3月にＩＳＯ／Ｎ３５７（Ｓ８．１１１）という文書が出され、更に１９８９年6月にＸ３Ｊ３からＳ８．１１２　という文書が配付され、これがＩＳＯの規格原案として、１９９０年1月を期限として投票にかけられている。以下これによって内容を紹介する。

1．2　日本の寄与（2．2（3）、3．2（1）参照）

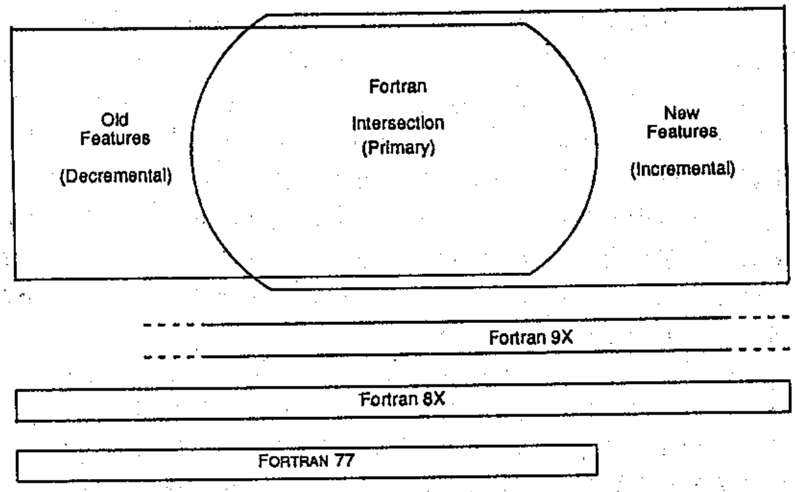
（1）文字型の拡張：1986年頃から、日本はX3J3へ積極的に意見を文書によって提案し、特に文字型の拡張を強く主張したが、採用されなかった。1987年に入って、種々手段をつくして、代表をX3J3の委員会に出席させ、かつ文字型の検討を議題に採用してもらうことに成功した。ISOにおいても、各国の文字を扱えるようにするということで、作業委員会（SC22／WG5）のバックアップもあり、紆余曲折を経て文字型の拡張は採用されることとなった。

（2）CHARACTER文のパラメタ化：文字型の拡張に際して、CHARACTER文をパラメタ化して、KINDという構文要素を含めることを提案したが、これが8X全体に大きな影響を及ぼし、型宣言文全体にkind-selectorが採り入れられることになった。文字型の拡張は、各国独自の文字を扱えるようにするということはもちろんであるが、90年代に使われるFortranでは、計算センター（処理系）ごとに、もっと広い分野（分子構造、素粒子、各種図形など）での一般的なコードが、扱えるようにしようというのが本来の趣旨であり、そこからパラメタ化する考えが導かれるわけである。しかし、この広い視野は、当時（1987年）の日本国内では、日本語（各国語）ということに重点がおかれ、Fortranの文字型であるという認識が欠けていたために、むしろ理解されなかった。

2．8Xの設計思想上の基本特性

2．1　進歩と伝統の調和

1．1に述べたようにFORTRANは最も歴史の長いプログラム言語であり、科学・技術計算に関するプログラム・ライブラリは膨大である。一方、情報処理の分野は周知のように進歩が急速であり、FORTRANの規格改訂に当たっては、どのように伝統的なものと進歩に対応した新しいものとを調和させていくかが大きな問題となる。8Xの開発に当たって、この問題は当初から議論され、多くの曲折を経て、図1．のようなアーキテクチャがとられることとなった。



Core Fortran is
Primary plus Incremental Features

ここで、Primary,Incremental,Decremental Featuresは、それぞれ次のようなCriteriaで特性付けられている。

（１）Primary Features :

(i) These features are those from ＦＯＲＴＲＡＮ７７ standard that continue to be useful and characteristic of the language.

(ii) Primary features are expected to continue throughoutthe life of Fortran or at least for the next several revisions of the language.

（２）Incremental Features :

(i) The feature is responsive to new system architecture.

(ii) The feature improve the functionality of Fortran.

(iii) The feature is desirable for certain important special purpose applications.

(iv) The feature's inclusion enhances portability.

(v) The feature uses modern language technology.

(vi) The feature is compatible with the primary and decremental features.

（３）Decremental Features:

(i) Decremental features are these features that are deleted or obsolescent in the Fortran Standard.

(ii) Obsolescent features are candidates for removal from future versions of the Fortran Standard.

２．２　現代化

８Ｘの言語仕様が、７７に対して著しく拡充された点は、当然のことながら２．１に述べたIncremental Features の部分で、特に(i)～(v)によるものである。この部分の言語仕様は、種々の意味で現代化をしようという意図から導かれたものが多い。

（１）Data abstraction の考え方：これは、２．１（２）(iv)、(v)を反映するものの一つである。１９８０年頃からdata abstraction（データ抽象化）ということが、プログラム言語やソフトウェア理論で議論され始めた。これは情報処理で扱う各種の値(value)とその上で定義される演算とを一まとめにして考えようというものであり、このようにして与えられる型をabstract data type またはencapsulated data type といい、その定義をする機能構造をmoduleという。この考え方を用いて、８Ｘではderived data type（３．２（２）参照）とmodule（３．２（３）参照）が具体的に導入されている。

（２）構造化プログラミングの考え方：１９７０年代にはいる頃から、ソフトウェアの需要に関して、その量と規模が急速に増大し、１９７０年代の中頃にはソフトウェア産業が一つの産業として成長するようになった。産業となるとその製品の品質が問題になり、いかにして良いプログラムを効率よく作るかということがソフトウェア工学の一つの基本問題となった。この場合、製品であるプログラムを作るプログラマは、熟練者ではなく、むしろ経験の少ない多数のプログラマであり、各プログラマが分担してプログラムの部分を作成して、最終的にそれらを結合して一つの大きいプログラムを作るという条件の下で、この問題を解決しなければならない。その一つの答えが構造化プログラミングということ

であり、これについて１９７０年代以来多くの議論があった。この考え方に沿って導入されたものの一つが、Execution　Control（３．４参照）におけるBlockの概念である。これも２．１（２）(v)の一つの具体化とみれる。

（３）文字処理の拡張：７７で、文字型のデータを扱えるようにはなってはいたが、従来ＦＯＲＴＲＡＮでは、文字処理は付加的なものでしかなかった。それは、本来ＦＯＲＴＲＡＮの伝統的利用者は、科学者、技術者であって、数値上の計算をすることを主目的としていたためである。しかし、１９８０年代に入って、ワープロやデータベースシステムの発達・普及にみるように、文字処理の需要は急速に高まってきた。一方、ＦＯＲＴＲＡＮは、コンパイラがよく研究されていて目的プログラムの効率がよいことは一つの特徴であるので、ＦＯＲＴＲＡＮの文字型を拡張して、文字に限らず図形パターンに対する種々のコードを扱いうるようにすれば、効率の良いワープロ的な文字処理システムはもちろん広範なデータベースシステム、記号処理システム、機械翻訳システムなどを作成するためにＦｏｒｔｒａｎを利用できるようになり、伝統的利用者とは異なる新しいＦｏｒｔｒａｎ利用者が生まれることになるであろう。１．２に述べた日本の寄与は、このような意図を持ったものであり、実際、ＫＩＮＤパラメタによって、それが可能になった。

（４）鍵盤入力(keyin)：ＦＯＲＴＲＡＮのプログラムの書き方は、行と桁（column）があって、第７桁から第７２桁の間に文を書き、第１桁から第５桁には文番号を書くというものであった。これは、プログラムの見易さや読み易さには役立つことであり、またパンチカードが主な入力法であった時代は、プログラム用紙上とカード上との表現の対応からの制約でもあった。しかし、１９８０年代に入ってからは、カード入力に代わって、表示装置（display）から鍵盤による入力が主力となり、このようなハードウェアの進歩を反映して、free　source　form　も採用されることになった。この場合、文の区切りには、セミコロン；を用い、注釈の頭には！をおく。

（５）並行処理：スーパーコンピュータやコネクションマシンなど並行処理が可能な機械が実用化され、今後ますますこの傾向は推進されることを反映して、配列式（３．３（２）参照）の計算には、element-by-element　evalutionということが明示されている。これは並行処理を行なうコンパイラの作成に有効である。

３．新しい機能の導入と機能の拡張

３．１　動的機能の導入

従来、ＦＯＲＴＲＡＮの言語としての大きな特徴は、言語機能が静的である、すなわちプログラムの仕組みをコンパイル時に決定できるという性質であった。これが、ＦＯＲＴＲＡＮプログラムの目的プログラムの効率を良くする一つの理由でもあった。しかし、８Ｘでは、ハードウェアの進歩、コンパイラやＯＳの進歩を考慮して、動的機能を導入することとなった。これは、２．１（２）(ii)、(v)によるものである。

（１）Pointerの導入：これは、８Ｘには１９８７年の時点では、含まれていなかったが、１９８８年に入って特にＩＳＯの場において強い要求があり、Ｓ８．１１０に付加されることになった。pointerとは、動的にtarget　objectとの結合を変えることができるものである。通常の変数の場合、その名前は一定の記憶場所を指しているが、pointerの名前は、それが指す記憶場所が、プログラマの指定によって変わりうるものである。８Ｘ（Ｓ８．

１１２）では、data objectにＰＯＩＮＴＥＲおよびＴＡＲＧＥＴというattribute（属性）を指定でき、pointer assignment statementによって、pointerとtarget objectの結合が行えるようになっている。

（２）Dynamic allocation：配列のattributeとしてＡＬＬＯＣＡＴＡＢＬＥという属性を指定できる。このattributeをもつ配列は、実行時にＡＬＬＯＣＡＴＥ文が実行された時点で、その記憶場所が割り振られ、ＤＥＡＬＬＯＣＡＴＥ文によってそれが解消される。dynamic allocationは、７７でも、整合配列や擬寸法配列の場合、コンパイラがそれを行なっていたのであるが、８Ｘではプログラマが積極的に指定でき、記憶場所のoptimizationなどに利用できるようになった。

（３）再帰的定義：一般に再帰的定義は、従来のＦＯＲＴＲＡＮでは排除されていた。それは目的プログラムの実行時の効率を大きな特徴とするＦＯＲＴＲＡＮとしては当然のことであったが、９０年代に用いられる８Ｘとしては、ハードウェア、コンパイラ、ＯＳの進歩を考慮して、関数やサブルーチンの場合、ＲＥＣＵＲＳＩＶという指定をすることによって再帰的定義を行えるようになった。

３．２　データ構造の拡張

ＦＯＲＴＲＡＮは、従来、ＣＯＢＯＬなどに比べてデータ構造が貧弱であるといわれていたが、８Ｘでは著しく拡張された。これは２．１(ii)、(v)を反映するものである。８Ｘでは、データの型をintrinsic typeとderived typeとの二つに分ける。intrinsic typeは、言語が固有に規定している型であり、derived typeは、プログラマが自分で固有の型を組み合わせて定義して使うことができる型である。データそのものをdata object（データ対象）といい、data objectは、型とattribute（属性）を持つ。attributeは、型と同様にプログラマが宣言するものであり、例えば、ＰＡＲＡＭＥＴＥＲ、ＤＩＭＥＮＳＩＯＮ、ＥＸＴＥＲＮＡＬ、ＩＮＴＲＩＮＳＩＣ、などのように７７にあったものの他に、前述のＡＬＬＯＣＡＴＡＢＬＥ、ＰＯＩＮＴＥＲ、ＴＡＲＧＥＴなどがある。

（１）Intrinsic type： intrinsic typeは、数値に関する型として整数型、実数型、複素数型があり、非数値のものとして、文字型と論理型がある。７７と著しく異なる点は、各型には、kind-selectorによって、更に何種類かの第２レベルとしての型を指定しうることである。例えば、実数型では、近似の仕方（精度や範囲）を処理系が定めている正の整数などを用いて指定できる。また、前述したように、文字型の場合は、文字の表現法（コード）の種類を指定できる。

（２）Derived data type：これは、intrinsic typeを組み合わせて自作できる型であって、その型の全体に付ける名前及び各成分の名前と型や属性を宣言することによってデータ構造を定義する。これは、物理や化学における従来のような問題に対するＦｏｒｔｒａｎの利用に際して、著しく強力な武器となることは明らかであるが、更に従来とは異なる分野（ケミアブ的データベースのシステム作成など）へのＦｏｒｔｒａｎの利用の道を開くものである。

（３）Module：これは、データの定義と必要ならばそれらデータに関する演算などを定義する手続きから成るプログラム単位であって、実行可能プログラム中の他のプログラム単位から、ＵＳＥ文によって、moduleに含まれるデータや手続きの定義に関して要求され

たaccessを可能にするものである。

3．3　配列処理の機能拡張

配列処理の拡張は、７７の原案作成の時点で既に多くの要求が出されていたが、次期改訂の時に考慮するということで７７では採用されなかったという事情もあり、８Ｘではそれを含めて著しい拡張が行なわれることになった。これは、２．１（２）(ii)、(iii)によるものである。

（１）配列の基本概念と部分配列：配列の構造を、rank, shape, sizeを用いて考える。rankは次元の数を、shapeは添字式の範囲を意味し、配列のshapeとは各次元のshapeをまとめたものである。二つの配列のshapeが同じとき、両者はconformable であるという。sizeは従来と同様、配列に含まれる要素の個数をいう。部分配列をarray sectionといい、section-selectorによってそれを指定する。

（２）配列の演算と式および代入文：配列要素がスカラーであるとき、そのスカラーに定義される二項演算は、conformable array間にも定義され、element-by-element（対応要素ごと）に演算をして得られる配列となる。したがって、このような配列を含む式及び代入文も導入された。

3．4　制御構造

制御構造を構成するに際して、Blockの概念は、７７でもＢＬＯＣＫ ＩＦでは用いられていたが、８Ｘでは、ＩＦ construct、ＣＡＳＥ construct、ＤＯ constructがこの概念を用いて導入された（２．２（２）参照）。

3．5　手続き

手続き関連は、著しい拡充が行なわれているが、特に目立つものだけを示す。

（１）Interval procedure：手続きを引用するプログラム単位内に、ＣＯＮＴＡＩＮ文を書きその次に副プログラムと同じ形式で関数やサブルーチンを定義できるようになった。これは２．１（２）(ii)の一つの実現である。

（２）Interface block：これは２．１（２）(iv)、(v)の一つの具体化であるが、手続きを引用するプログラム単位に、その引用の仕方をinterface blockに記述することによって、プログラム単位間の情報のやりとりを確実にするものである。

（３）Intrinsic procedure：２．１（２）(ii)、(iii)を反映して、著しく拡充され、その種類は１００を越えている。その中で特に注目されるのは配列処理関係の手続きである。例えば、これを用いて、ΣやΠをＤＯループを使わないで、一つの式で書くことができる。

4．おわりに

７７までは、既存の実績がある言語仕様を規格としてまとめるという標準の作成法がとられていたが、８Ｘは１９９０年代の約１０年間を見透して、規格先行的標準になっている。本文中にも随所に指唆したが、伝統的Fortran利用者を十分満足させ、かつ新しい分野の利用者の参入の可能性が期待される。８Ｘは、１９９０年中にはＩＳＯの規格原案（ＤＰ）として承認され、さらに国際規格案（ＤＩＳ）としての処置がとられるであろう。

参考文献　[1] 菅：ＦＯＲＴＲＡＮ８Ｘの紹介：ｂｉｔ vol.17(1985), No.12

ＩＢＭ　ＶＦ　ＦＯＲＴＲＡＮについて

日本アイ・ビー・エム株式会社
東京ＮＩＣセンター
高橋　信隆

１．はじめに

ＩＢＭ　ＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮは最新のＦＯＲＴＲＡＮ規格に準拠して設計されており、その最新バージョンであるＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第2版は、ＩＢＭの仮想記憶装置体系およびＩＢＭ ＥＳ／３０９０（ベクトル機構づき）の特徴を最大限に生かすように設計されています。以下にＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第2版について、その歴史、機能、特徴などを紹介します。

２．ＩＢＭ　ＦＯＲＴＲＡＮの歴史

ＦＯＲＴＲＡＮは１９５７年にＩＢＭ７０４コンピュータを対象とする自動プログラミング・プロジェクトよりＦＯＲＴＲＡＮ　Ⅰとして生まれました。その後、ＦＯＲＴＲＡＮⅡに発展し、これにより大規模なアプリケーションを開発することが可能となりました。１９６１年にＦＯＲＴＲＡＮⅣが発表され、後に最初の米国規格協会によるＦＯＲＴＲＡＮ規格であるＦＯＲＴＲＡＮ６６のベースとなりました。その後いくたびかのリリースののち、ＦＯＲＴＲＡＮ７７に準拠したＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第１版が１９８１年に発表され、毎年の機能向上をへて現在のＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第2版（１９８５年発表）に至っております。

３．標準化

ＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第2版は、従来の機能を維持した上で最新のＦＯＲＴＲＡＮ規格、すなわち１９７８米国規格協会ＦＯＲＴＲＡＮ（ＦＯＲＴＲＡＮ７７）および１９６６米国規格協会ＦＯＲＴＲＡＮ（ＦＯＲＴＲＡＮ６６）を満たしています。

また、ＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第2版はＩＢＭシステム・アプリケーション体系（ＳＡＡ）ＦＯＲＴＲＡＮの１つであり、現時点で以下のコンピュータ・システム環境において容易に相互に統合できる適用業務を開発し、実行することができます。

－エンタープライズ・システム体系／３７０（ＥＳＡ）
－ＶＭ／システム・プロダクトまたはＶＭ／拡張体系
－オペレーティング・システム／２

また、ＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第2版はＩＢＭ　ＡＩＸ／３７０、ＡＩＸ／ＲＴ、ＡＩＸ　ＰＳ／２ のもとでも稼働します。

４．高性能

ＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第2版はＥＳ／３０９０およびベクトル機構を有効に利用するための最適化機能およびベクトル化機能を備えており、高いパフォーマンスを得ることができます。またＥＳ／３０９０の多重プロセッサーを利用した並列処理機能、大容量データ処理の高速化のための仮想記憶機構、入出力の高速化のための並列入出力処理機能により更に高いパフォーマンスを得ることができます。以下に並列処理機能、仮想記憶機構、並列入出力処理機能について紹介します。

－並列処理機能

多重プロセッサー上でジョブをいくつかに分割し実行する並列コードを自動生成します。ＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第2版では、従来、多重タスク処理機能（ＭＴＦ）のみを提供しておりましたが、リリース５（１９９０年８月使用可能予定）より、ＩＢＭパラレルＦＯＲＴＲＡＮとして限定提供されていたタスクレベル、ブロックレベル、ループレベルの並列処理機能を提供します。

また、コンパイル時の指定により通常のＤＯループ文を自動並列化することが可能です。
なお、この並列処理機能はベクトル処理と同時に使用されます。

－仮想記憶

ＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第2版では、中央記憶機構に入りきらない２ギガ・バイト以内の大きな行列を扱うときには、ダイナミックコモン（ＤＣ）の指定をプログラム中で指定することにより自動的に仮想記憶域上に行列が割付られます。ベクトル計算では、演算能力に応じて仮想記憶のデータ供給能力を高める必要がありますが、ＥＳ／３０９０ではこのために拡張記憶機構を活用することができます。これはＦＯＲＴＲＡＮプログラムからは中央記憶機構と同一階層のストレッジとみなせ、高いパフォーマンスを維持することができます。また、仮想記憶データ機能（Ｄａｔａ　Ｉｎ　Ｖｉｒｔｕａｌ）を使うと、プログラマーの目から見れば求めるデータが仮想記憶域上にあると解釈でき、ＲＥＡＤ／ＷＡＩＴＥ文が不要となり、修正されたデータの部分が４Ｋバイトのページ単位でＤＡＳＤ上に書き戻します。

他にエンタープライズ・システム体系／３７０（ＥＳＡ／３７０）のハイパー・スペースの機能を使うことにより１６テラ・バイトのデータを取り扱うことも可能です。

－並列入出力処理機能（データ・ストライピング）

順次ファイルに対し複数のディスクを使い、並列処理による入出力を高速に実行できます。プログラム上の変更は不要でＪＣＬ（ジョブ制御言語）上の指定で対応します。これにより、入出力中心で、そのためベクトルの高演算能力を享受できなかったプログラムの処理時間の高速化が期待できるようになります。

５．開発支援

プログラム開発支援のためにいくつかの機能およびツールを提供しています。

－対話型デバッグ機能

全画面形式で対話的にプログラムをデバッグする機能で、ウィンドー機能、アニメーション機能を備えています。

－実行分析機能

プログラムのチューニング時に用います。サブルーチンごとのプログラムでの実行時間の割合の情報と、ステートメント単位での割合の情報を表示します。

－コンパイル間分析機能

サブルーチン名、コモン名のクロスリファレンスの作成、ＣＡＬＬ文とサブルーチン間の引数チェック、ラベルコモンの長さチェックを、コンパイル時の行い机上デバッグが容易にできるようにします。

－ベクトル化チューニングエイド

コンパイル時と実行時のベクトル長およびストライドに関する統計値を表示します。

－ＶＡＳＴ－２®　（®は米国 Pacific Sierra Research Corporation の登録商標）

ＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮのプリ・プロセッサーとしてＩＢＭより提供されるＶＡＳＴ－２®は、ベクトル化、パラレル化可能な構文を自動的に検出し、プロプラムへの書き換えを行ったりＦＯＲＴＲＡＮステートメントをより高速なＥＳＳＬルーチンに置き換えする機能を備えています。

使用可能時期：ベクトル化機能　　　　　　　　　：１９９０年２月予定
　　　　　　　：パラレル化機能、ＡＩＸ／３７０版：１９９０年８月予定

－漢字サポート

変数名、文字指定、入出力データとしての漢字の使用が可能です。

－ＥＳＳＬ（科学技術計算サブルーチン・ライブラリー）

ＥＳＳＬは ＥＳ／３０９０ ベクトル機構アーキテクチャーを最大限に利用した、高性能数学計算サブルーチンでＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮより呼び出して使用します。

6．ＦＯＲＴＲＡＮ８Ｘへの対応

ＶＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ第2版はＦＯＲＴＲＡＮ　８Ｘの以下の項目を採用しています。

- 大文字小文字両使用
- ３１文字識別名（含む下線'＿'文字使用）
- ＮＡＭＥＬＩＳＴステートメント
- ＩＮＰＬＩＣＩＴ　ＮＯＮＥステートメント
- インライン・コメント（！）
- ＤＯ ＷＨＩＬＥ／ＥＮＤＤＯステートメント
- ターゲットラベルなしのＤＯ
- グラフィック演算子
- ＩＮＣＬＵＤＥコンパイラー指示ステートメント

また、ＶＡＳＴ－２®により ＦＯＲＴＲＡＮ　８Ｘ配列文脈もサポートします。

7．おわりに

以上の紹介でおわかりのように、ＩＢＭは御客様の要望を取り込んで、機能拡張を、

－システム間の移行容易性
－標準への対応
－大規模アプリケーションへの対応
－パフォーマンスの向上
－新機能の追加

等に重点をおいて行なっております。

CRAY FORTRANについて

日本クレイ応用ソフトウェア部
三上和徳

1、CRAY FORTRANコンパイラの推移について

CRAY FORTRANコンパイラの始まりは世界で最初の商用スーパーコンピュータCRAY－1の発表と同時である。DOループのベクトル化処理機能によって、当時群を抜いて高速な計算を可能としたため第1世代のスーパーコンピューター＝ベクトル計算機として認識された。

現在のクレイ標準FORTRANコンパイラであるCFT77は最新のハードウエアアーキテクチャを有効に利用するために様々な点に於て発展しつつある。その中で際だつのは自動マルチタスク化機能（自動並列処理機能）である。

CRAY Y－MPに代表される現在最も進んだスーパーコンピュータのアーキテクチュアは密結合型の多重CPUを基本としている。
現在各社スーパーコンピュータ用のFORTRANコンパイラは高度な自動ベクトル化機能を標準的に装備しているが、自動マルチタスク化機能は過去1年間に大きく進歩してCRAYスーパーコンピュータをはじめとして、ミニスーパーコンピュータ各社において充分現実的な水準に達している。ここでマルチタスク化処理とは1つのプログラムを多数のCPUに分散して計算を行ない、処理速度を上げることをさす。

現在の自動マルチタスク化機能の代表的な例は多重ループ演算の独立性を検知し、最外側のループあるいは中間のループを各々別々なCPUに振り分けるものである。マルチタスク化を行なったときに充分な高速化が図られるとコンパイラが判断したときにマルチタスク処理用のオブジェクトを生成し、さもなければ通常のベクトル処理用のオブジェクトを生成する。
もっと高いレベルでのマルチタスク処理、例えば複数のサブルーチンを並列処理するためにはある程度のプログラムに対する見識が必要になる。具体的にはコメント形式のディレクティブを挿入することによって実現する。
得られる高速化率はプログラムの種類により、CPUの数にほぼ比例した高い値を得ることも可能である。

2、FORTRAN8Xの準拠について

スーパーコンピュータ用のFORTRANコンパイラはまず使いやすくて柔軟な仕様を持つうえに、ハードウェアの性能を充分に引き出す必要がある。前者の使いやすさに焦点をあてると、FORTRAN77の準拠は当然ながら、現在その仕様が検討されつつあるFORTRAN8Xの文法、機能を先取りして取り込む必要がある。現在CFT77で支援されている8X文法のいくつかを挙げると、

大文字と小文字の両方が使える。
文の途中にコメントを挿入できる。
変数名の長さは31文字まで使用できる。

サブプログラムの再帰的な呼び出しが可能である。
ブーリアン型の変数を定義できる。
ポインター型の変数を定義できる。
自動配列を定義できる。
配列式や部分配列を文脈中に使用できる。
ドル記号編集を使用できる。
ＮＡＭＥＬＩＳＴ文を使用できる。
ＩＮＣＬＵＤＥ文を使用できる。
ＩＭＰＬＩＣＩＴ　ＮＯＮＥ文を使用できる。

などがある。
このような文法レベルでの先取りに加えて、現在ＣＲＡＹのＯＳとして標準となっているＵＮＩＣＯＳ（ｕｎｉｘ）の長所を取り入れ、実行時に使われる一時的なファイルのｏｐｅｎ，ｃｌｏｓｅが不要（必要に応じて動的に処理される）である、あるいは実行中のプログラムの中間結果を動的に観察できるといった柔軟さを重視している。

また後者のために強化されている機能のいくつかを挙げると、
標準で６４ビット、倍精度で１２８ビットのデータ構造を採用してあるため、計算精度が高い。汎用機用に倍精度でかかれたプログラムをソースの修正無しで単精度の分脈に自動的に変換するオプションがある。
科学技術計算用の高速なサブルーチンライブラリが多数標準装備されている。
コンパイラに対する様々な最適化指示をディレクティブで指定できる。
マスク演算やシフト演算のようなビット単位でのデータ処理用に高速な組み込み関数が準備されている。
ファイル入出力を高速に行なうために非同期入出力文が準備されている。
マルチタスク処理用にＴＡＳＫ　ＣＯＭＭＯＮが準備されている。
などがある。

３、総合的なＦＯＲＴＲＡＮプログラミング環境

柔軟性の追求、あるいは自動的最適化ツールの開発は、プログラミング環境の向上のためであるといえる。ＣＲＡＹではより高速な計算の実現とプログラミングのための負荷の軽減を目的として、ライブラリの充実、会話型デバッガや負荷の解析のためのフロートレースの整備、ｕｎｉｘ環境の提供、計算結果の可視化を含む総合的なＦＯＲＴＲＡＮプログラミング環境の向上を目指している。
プログラム実行時には、最大２５６メガ語（２ギガバイト）の実記憶領域を使用することにより、仮想記憶計算機で問題となるページングのオーバーヘッドはなくなり、また半導体記憶装置を使用することによりファイル入出力にかかる時間も実質的にゼロとなる。つまりＣＲＡＹは従来のＣＰＵ時間による評価ではなく、実際の経過時間を短縮するために必要な要素でＦＯＲＴＲＡＮ環境を支持している。

日立のＦＯＲＴ７７／ＨＡＰについて

㈱日立製作所ソフトウェア工場
後藤志津雄、青山明夫

１．はじめに

自然科学の探求から産業界での製品開発まで、スーパーコンピュータの適用分野は広がっています。実験が難しい、あるいは実験さえもできない事象の解明は、数値シミュレーションを超高速で処理できるスーパーコンピュータ抜きでは考えられません。

日立では昭和58年10月にスーパーコンピュータＳ-810を世に出して以来、ハードウェアの強化、ソフトウェアの拡充を行ってきました。ここでは、日立の最新のスーパーコンピュータＳ-820用のＦＯＲＴＲＡＮコンパイラＦＯＲＴ７７／ＨＡＰ、開発支援システム、技術計算ソフトウェアについて、機能や特徴などを紹介します。

２．ＦＯＲＴ７７／ＨＡＰコンパイラ

（１）言語仕様

ＦＯＲＴ７７／ＨＡＰは、最新のＦＯＲＴＲＡＮ国際規格　ＩＳＯ 1539-1980（ＡＮＳＩ　Ｘ 3.9-1978　ＡＮＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ　７７と同一内容）およびそれと同じ内容をもつ日本工業規格ＪＩＳ　ＦＯＲＴＲＡＮ（上位水準）を包含しています。これらの規格に対する拡張仕様として、漢字言語仕様（漢字型の変数や定数が使え、漢字データの入出力ができる）や構造化プログラミング仕様（ＤＯ　ＲＥＰＥＡＴ文、ＳＥＬＥＣＴ　ＣＡＳＥ文が使える）があります。

（２）自動ベクトル化機能

ＦＯＲＴ７７／ＨＡＰは、標準の言語仕様のＦＯＲＴＲＡＮプログラムを解析し、自動的にベクトル命令を含んだオブジェクトを生成します。この自動ベクトル化機能により、特別な言語仕様を習得しなくても、標準のＦＯＲＴＲＡＮ言語でＳ-820の高速性能を引き出すことができます。

（３）拡張記憶装置を利用する高速入出力

拡張記憶装置は、１Ｍビットのダイナミックメモリ素子により構成され、最大12Ｇバイトの大容量の記憶装置であり、最大２Ｇバイト／秒の転送ができます。

・ＦＯＲＴＲＡＮプログラムで計算したデータを蓄えておくデータセットとして使用でき、入出力時間を大幅に短縮できます。ＦＯＲＴＲＡＮの標準入出力文でアクセスできます。
・ベクトルジョブの高速の退避用データセットとして使用されます。これにより、複数のベクトルジョブの効率の良い同時実行を実現します。
・動画像出力機構より出力する大容量の画像データセットとしても使用できます。

（４）パラレル入出力

ＦＯＲＴＲＡＮプログラムで計算したデータを磁気ディスク上のデータセットに出力したり、そこから入力するときなど、複数のボリュームに並行して入出力することができます。

３．開発支援システム　ＦＯＲＴ／ＡＳＳＩＳＴ

対話環境の下でプログラムの作成、コンパイル、デバッグ、チューニング、保守ドキュメント作成など一連の開発作業が一貫して実行でき、効率の良いプログラム開発が可能です。ＦＯＲＴ／ＡＳＳＩＳＴはプログラム支援エディタと連携しており、エディタ画面でのガイド方式によるチューニングができるなど、操作性に優れています。

（１）対話型テスト・デバッグ支援　ＦＯＲＴ７７／ＴＤ

メニュー方式による実行環境設定機能と、フルスクリーン・モード／ライン・モードでのデバッグ機能を持っています。

（２）対話型ベクトルチューニング支援　ＦＯＲＴ／ＶＦ

ＤＯループの実行比率・ベクトル化率などの解析情報、ベクトル化診断メッセージなどのチューニング情報を提供し、それを見ながら同一画面でソース・プログラムを修正できます。

（３）対話型プログラム解析支援　ＦＯＲＴ／ＡＦ

複数のモジュール間の整合性のチェック、共通ブロックのチェックを、コンパイル情報によって行います。解析情報と対応するソース・プログラムを同一画面で修正できます。

（４）ドキュメント作成支援　ＦＯＲＴ／ＤＦ

複数モジュール間のモジュール関連図や共通ブロック使用状況、変数名一覧や相互参照リストなどＦＯＲＴＲＡＮプログラムの保守ドキュメントを、見易い帳票形式で作成します。

４．技術計算ソフトウェア

Ｓ-820の性能を有効に発揮させるためいくつかの技術計算ソフトウェアを提供しています。

（１）偏微分方程式向き数値シミュレーション言語　ＤＥＱＳＯＬ　Ｅ２

偏微分方程式で表される物理現象のシミュレーション・プログラムを偏微分方程式とほぼ同様の形式で記述できます。内在する並列性を活かしたＦＯＲＴＲＡＮプログラムに展開されます。

（２）行列計算ライブラリ　ＭＡＴＲＩＸ／ＨＡＰ

連立一次方程式、固有値解析、高速フーリエ変換などが扱え、拡張記憶装置を用いた大次元行列計算サブルーチンもあり、Ｓ-820の性能を十分に発揮させることができます。

（３）動画像作成ソフトウェア　ＳＧＲＡＦ　Ｅ２、ＫＧＲＡＦ　Ｅ２／ＭＯＶＩＥ

ＳＧＲＡＦ　Ｅ２は数値シミュレーションの結果得られた大量の数値データから多次元カラーグラフを作成・出力するプログラムであり、対話的に作画情報を設定できます。ＤＥＱＳＯＬ　Ｅ２などによるシミュレーション結果を、ＫＧＲＡＦ　Ｅ２、ＫＧＲＡＦ／ＭＯＶＩＥと連携して動画化することができます。作画情報を拡張記憶装置に蓄えた後、ＮＴＳＣ信号などに変換し、ビデオ・レート（毎秒30画面）でモニタやＶＴＲに出力します。

５．ＦＯＲＴＲＡＮ　８Ｘへの対応

ＦＯＲＴ７７／ＨＡＰは、ＦＯＲＴＲＡＮ８Ｘの以下の項目を実現しています。

（１）変数などの英字名の最大長の３１文字化ならびに下線文字（“＿”）の使用　*

（２）ＩＭＰＬＩＣＩＴ　ＮＯＮＥ文（暗黙の型宣言の無効化）*

（３）英字の大文字と小文字の併用

（４）自由形式（どの桁から書き始めてもよい）

（５）複文（１行中に；で区切って複数の文が書ける）

（６）行中にコメントが書ける　　　　　　　　　　　　　* ：1990年４月サポート予定

６．おわりに

以上、スーパーコンピュータ用ＦＯＲＴＲＡＮコンパイラＦＯＲＴ７７／ＨＡＰの特徴を述べましたが、汎用計算機用には、最適化ＦＯＲＴＲＡＮ７７（ＯＦＯＲＴ７７　Ｅ２）があります。両者の言語仕様は同一であり、既存のＦＯＲＴＲＡＮプログラムも、リコンパイルするだけで、Ｓ-820に適用できることを付記します。

ＦＯＲＴＲＡＮ８Ｘについて

１９８９．１０．１６

富士通）第五開発部

Ｆｏｒｔｒａｎの規格改訂審議がＩＳＯと幹事国ＡＮＳＩ（米国規格協会）で行われている．最初のドラフトは８７年に完成したが，反対多数で否決された．その後ドラフトの作り直しが行われ，現在は，本年１１月頃の予定で，第２回目のパブリックレビュがＡＮＳＩで行われている．改版されたドラフトはＩＳＯ及びＡＮＳＩで多くの支持を得ており，規格制定に向けて加速されるものと思われる．

富士通は標準化の重要性に鑑み，従来より積極的な対応を心掛けてきている．今回のＦｏｒｔｒａｎ規格審議に当たっては，ＩＳＯ及びＡＮＳＩ委員会に継続的に日本代表として出席し（特に，８９年からは国内Ｆｏｒｔｒａｎ委員会主査を担当），具体的な提案活動を実施してきている．この一つの成果が，新規格案に日本語や中国語など多種類の文字型を操作する機能が採用されている事である．この機能は日本国内では当たり前になっているが，提案当初は，まだ何れの言語規格にも採用されていなかった．日本からの強い働きかけによりＦｏｒｔｒａｎで検討が開始され，それを契機に他の言語でも検討が開始され採用されつつある．当社は，今後ともユーザの皆様の声を反映した標準規格が制定されるように継続的に努力していく所存である．

Ｆｏｒｔｒａｎは，科学技術分野では勿論のこと，経済・経営の分野でも科学的手法の導入とともに幅広く使われている．コンパイラも数多く提供されており，プログラミング言語としての確固たる地位を占めている．しかし，規格制定から１０年余が経過しており，プログラミング領域の一層の拡大や要求機能の多様化および他のプログラミング言語の高級機能化の状況の中で，その言語機能の不充分さや一部仕様のまずさが目立ちつつある．従って，新規格案が現行（Ｆｏｒｔｒａｎ７７）規格との上位互換を保持しつつ，科学及び工学分野に適したプログラミング言語として今後も充分な発展が出来るように改革しようとしているのは大いに評価できる．これにより，現在との継続性を保障しつつ，近代的な言語仕様にゆるやかに移行することができる．新言語仕様には，ユーザ要望の高い配列のベクトル演算を初めとして，ポインタやパッケージ機能などの有用な機能が採用されている．これらの機能は，ハードウェアや他のプログラミング言語の進歩の成果を取り入れたものであり，全体として見ると非常に強力なＦｏｒｔｒａｎになっている．新規格の制定が確実視される現在，Ｆｏｒｔｒａｎ８ｘがどれだけ浸透していくかは，効率良い処理系がどれだけ幅広く提供されるかにかかっている．近年の計算機システムの動向とプログラムポータビリティの観点から，大型コンピュータからワークステーションまでの広い範囲に渡ってのサポートが必要である．

当社のＦｏｒｔｒａｎ製品は，１０年前Ｆｏｒｔｒａｎ７７言語仕様の制定に合わせていち早く御提供申し上げて以来，機能強化，性能強化を図ってきた．Ｆｏｒｔｒａｎシステムの概念のもとに，最適化コンパイラ（ＦＯＲＴＲＡＮ７７）のほか，対話型デバッガ（ＤＯＣＫ／ＦＯＲＴＲＡＮ７７），プログラム解析ツール（ＦＯＲＴＵＮＥ，ＷＩＳＥ ＰＡＣＫ），数値計算ライブラリ（ＳＳＬⅡ）など，効率的プログラム開発を支援する製品群を御提供してきた．また，スーパーコンピュータについても，自動ベクトル化コンパ

イラ（ＦＯＲＴＲＡＮ７７／ＶＰ），ベクトル化支援ツール（会話型ベクトライザ），ベクトル化数値計算ライブラリ（ＳＳＬⅡ／ＶＰ）など，スーパーコンピュータを汎用機並みに御利用頂けるＦｏｒｔｒａｎシステムを御提供してきた．そこでは，①使いやすさを徹底的に追求し，従来のＦｏｒｔｒａｎプログラムでスーパーコンピュータの性能を充分に利用できる，②各種チューニングツールの充実により，徹底的に性能が追求できる，③多種多様な運用と利用形態に応えるため，柔軟なシステム構成がとれる，などの特徴を持つことにより，スーパーコンピュータの適用分野を研究機関のみならず，多方面に拡大してきた．

富士通としては，今後とも機能強化，性能強化を図り，ユーザの皆様の御要望にお応えした製品を御提供申しあげる所存である．９０年初に出荷予定の『ＦＯＲＴＲＡＮ７７ ＥＸ』では，次のような機能エンハンスを予定している．

－ユーザ要望の高い言語仕様サポート
- ・３１文字名標，英小文字，インラインコメント，ＩＭＰＬＩＣＩＴ　ＮＯＮＥ（Ｆｏｒｔｒａｎ８ｘ仕様の一部採用）
- ・日本語名標
- ・８バイト整数型
- ・索引入出力機能強化

－実運用プログラムの会話型デバッグ機能（デバッグモードでの再翻訳不要）

－サポート機能強化
- ・巨大プログラムの翻訳，翻訳＆実行機能
- ・最適化されたプログラムの精度依存性の診断機能

－富士通標準言語仕様（ＳＩＡ）定義によるプログラム流通性向上

Ｆｏｒｔｒａｎ８ｘに対しても，より近代的なプログラミング環境を御提供すべく，規格化の動向に留意しつつ前向きに取り組んでいく所存である．

部 会 行 事

第12回情報化学討論会総括

世話人による報告

討論会雑感

姫路工大工学基礎研　安岡　則武

○風光明媚なところで

「討論会の開催地は風光明媚なところを選ぶように」今回の世話人を引き受けた私に、この言葉が伝えされた。

大阪から姫路あたりの間で、風光明媚なところはたくさんある。リゾートホテルを借り切って討論会をやったら、ご満足いただけるだろうと夢を拡げては見るものの、数千円の登録費でやれるわけではない。結局のころ、新大阪に近くて便利なホールを借りるということになり、よみうり文化ホールと協栄生命ホールが見つかったという次第である。協栄生命ホールの赤い絨毯はお気に召したでしょうか。

客席にテーブルがなかったのは、やはり不便である。舞台があるのも良し悪しで、ＯＨＰのとき講演者が画面を大きくさえぎることがあるのは気になった。それにＯＨＰというのは小さい会場での簡易型映写器なのであって、このように舞台のある大きいホールには適していない。座席がふかふかと快適で眠気を催すのも困りものであった。

○学問をやって下さい

講演申し込み件数49件で、昨年より１件少なかった。私が申し込めば丁度同数だったのに、いろいろと雑事に追いまくられて論文を出せなかった。心残りである。討論会の世話だけして、学術活動をしないのでは話にならないと思いつつ、結局そうなってしまった。ホールの借料、プロジェクターの借料、ポスターパネルの設営などに費用がかさむので、アルバイターの数を極力少なくする必要があった。そのために受付に居なければならず、講演を聞く機会が少なかった。同じように実行委員を引き受けて下さった岡田さん、高山さん、中野さんが、代わりましょうかと声をかけて下さったが、引き継ぎにも手間がかかるし、このところは私が引き受けようと思い、皆さん方にはどうぞ学問をやって下さいと答えたわけである。それでも時には私も学問をしたくなり、会場へ入ったが、途端に写し出されたスライドが上下逆さまになっていて、あわてて映写室へ走るということになってしまった。学問ができなかったのは残念だが、多くの方々と言葉を交わす機会が多くて楽しかった。生来シャイであると自覚していて、ひとさまとうまく話ができないのだが、こんな世話をしていると、多くの方が声をかけて下さり、親密に話のできたことは望外の幸せであった。

○綱わたり

大学の教室、講堂などを使って開催する学会などは数多く経験したが、このようなホールを借りる学会の世話ははじめてであった。自分のホームグラウンドなら、プロジェクターもポスターパネルも自分たちで用意することになるが、このような立派なホールとなると、プロジェクターは大きいものでないといけないし、ポスターもベニヤ板を並べるだけというわけにはい

かない。レンタルにしたわけであるが、電話やＦＡＸだけのやりとりで発注し、当日はじめて顔を合わせて用意してもらうということになった。交通渋滞にでもひっかかって、器具、材料が到着しないことになれば、学会は開けない。そうかと言って安全を見て前日から用意するとすれば、料金がはね上がる。覚悟をきめて、その日の設営に踏み切ったのだが何事も起こらず、順調に進行したのは有り難かった。こんな綱わたりのようなことをしていいのかどうか、金をかけても万全の策を講じるべきかどうか、いまでもときどき頭に浮んできて悩ませる。

○お世話になりました

前回世話人の町田勝之輔先生には何から何までご教示いただきました。とくに印刷所として西村信天堂をご紹介いただき、予稿集を格安に作れたのは幸いでした。実行委員として、岡田孝さん、高山千代蔵さん、中野英彦さんにご活躍いただきました。構造活性相関世話人の植田育男先生にはご迷惑のかけっぱなしでした。アルバイトにお願いした姫工大の学生諸君もよく働いてくれました。情報化学部会の役員の先生方、事務局の方にはいろいろお世話になりました。厚く御礼申し上げます。また発表者、参加者各位に御礼申し上げます。

座長による報告

8Ｉ01～8Ｉ02

8Ｉ01　DNET/MS システムによる酸性度の類推（関学大情報センター）岡田孝、河合俊一

分子構造から化学的諸性質を推定するため弁別ネットに基ずく類推システムDNET/MS を開発し、１６０ほどの有機オキシ酸の酸性度を求めた。直接法と平行四辺形法の結果を比較したところ前者では推定pKa 誤差が0.6 のところで累積率が50%にたいして、後者では0.2 のところで70%、0.4 で90%と大変良い結果を示した。著者等は更に後者の方法において誤差が0.4 以上になるケースについて個別に詳細な検討を加えその原因を明らかにし平行四辺形法が極めて精度の高い方法であることを示した。この方法にたいして平行四辺形のとりかたが一義的でなく幾つかの可能性がある場合、むしろそのようなケースが多いとも考えられるが、どのように対処し、またどの程度の精度が期待できるかについて、参会者の方からの質問もありいささか不安もあったが、筆者の単なる取り越し苦労で終われば幸いである。

8Ｉ02　官能基を中心とした構造縮約表現にもとずく共通構造特徴の自動認識（豊橋技科大）助川正之、高橋由雅、佐々木慎一

化合物群に含まれる共通構造特徴を一続きのものとして探索する方法とはことなり、構造活性相関を論ずる上では相互に離れた複数の部分構造特徴の探索が重要になる。演者らはそのような観点から、官能基や特定の原子団のトポロジカルな位置関係を考慮した共通構造特徴認識のためのシステムを検討し作成した。システムは構造情報の縮約表現と共通構造特徴の自動認識の二つの部分からなり、５種類の抗ヒスタミン剤に適用した結果、２個の芳香族環と一個の窒素を抽出しそれらの間のトポロジカルな位置関係をCPU TIME 23.3 秒(ECLIPSE MV/6000) で明らかにすることが出来た。ただし、官能基としてヘテロ原子と芳香族環は指定し、芳香族環は全て等価、パス長の許容度は１などの条件を出している。

（群馬大工　佐藤満雄）

8Ｉ03〜8Ｉ04

8Ｉ03　高次対称カゴ型炭化水素構造の分子設計

I_h点群に属する分子構造から、キラルなＴ点群に属する分子を見いだす方法についての報告である。実際には、Dodecahedraneから TetrachiraneのＰ，Ｍ体を導出している。ファジイな対称要素を認識できれば、分子設計・反応設計においてより適用範囲が広がるのではないかと感じた。

8Ｉ04　ゼオライト系三次元フレームワーク上でのSi，Al分配－最近接Al対排除条件下での可能な分配の系統的誘導

ゼオライト系結晶において、Al原子の分配位置を網羅的に数え上げる方法についての報告である。隣接したAl原子対を排除するための簡明なアルゴリズムが提案された。今後並進対称性の適用可否等を含めて、実験結果との対照により、ゼオライト詳細構造の解明への発展が期待される。

（関学情報センター　岡田孝）

8Ｉ05〜8Ｉ06

8Ｉ05　「分析化学」誌のキイワード・キイワードフレーズの変遷状況とＣＡＳｅａｒｃｈのキイワードフレーズとの比較（北里大薬・電通大）木下俊夫・平賀やよい・岡村里恵・今野恵○山崎　昶・梶川博司

大変労力のいる、貴重な比較調査である。この種の研究を行う人が増えて、もっと盛んにならないものかと思う。そうでないと研究者の成果がこのキイワードやキイワードフレーズによって検索されるのだという自覚が促され、高揚されることの乏しい状況が我が国において続くであろう。その結果不適切なキイワードやキイワードフレーズによって価値ある研究も正確に評価される機会を逃すことも有りうることを憂う。

8Ｉ06　有機化合物のＩＵＰＡＣの命名法支援システムの開発（豊橋技科大）○阿部英次・高橋佐江・佐々木慎一

豊橋グループならではの大変有り難いシステムである。今回は鎖上構造化合物の命名に限ったといえ、正直言って、ずいぶんと早くこのように高い精度までに開発を進められたのに敬服する。130 種の官能基の優先順位化、鎖の命名のためのルール化は簡明直截である。また此処でのコンセプトは脂環状化合物に適用可能とみられるので、次回の発表が期待される。

（群馬大教育　飯塚　健）

８Ｉ０７～８Ｉ０８

８Ｉ０７：「電気化学数値データベースおよび数値データベースの利用支援システム」（横浜国大工）石田卓也、佐藤寿邦、仁木克己、（名古屋市立大計算センター）磯本征雄
８Ｉ０８：「^{1}H／^{13}C－NMRスペクトルデータベースによる検索同定システムの開発（３）－－データベースの質への依存性の検討」（日立計測）橋本正雄、田中保子、（日立那珂）笹淵　仁
　いづれもデータベースの作成と利用に関する種々の問題が浮き彫りにされるような内容を含む重要な講演であった。８Ｉ０７の発表においては、重要な数値データ集や文献集の中断することない収集とデータベース化に関する諸種の悪条件にも関わらずコンスタントに作成を続けている現況が紹介された。検索プログラムや種々の利用支援システムなどの開発、改善が進行中とのことである。８Ｉ０８の発表では、物性データ諸般に関わるデータの質の問題が提起され、ステロイドを例として、測定機器のブラックボックス化に伴って不可避的に生じる未熟練の分析者・測定者までを対象としたスペクトル帰属上の諸問題の解決案が提示された。

（電気通信大学）　山崎　昶

８Ｉ０９～８Ｉ１０

８Ｉ０９　動く組合せ画像－分子モデリングシステムＫＯＲＩＮ／ＩＲＩＳ（分子研、九工大情報工）伊奈　諭、柏木　浩

演者らが開発した分子モデル表示システムＫＯＲＩＮのグラフィックワークステーション（ＧＷＳ）版についての報告であった。ハードウェアの機能の向上でより使いやすいものになっていることがうかがわれた。この様に機能豊富でかつ美しい分子の表示が出来るシステムが、第１線の研究者の役に立つことは言うまでもないことであろうが、教育の現場、特に初中等教育の現場に於て使われれば化学嫌いの解消に大きな効果があるのではないだろうか。この点を意識されたかどうかは判らないが、会場から Portabilityについてはどうかという質問があり、他のＧＷＳへの移植もそう難しくはないだろうとの答であった。

８Ｉ１０　知的な分子モデリングシステムの構築（日本ＩＢＭ）小出昭夫

化学構造式を線形入力（？）することによって、３次元構造を近似的に組み立てるプログラムMolWorldについての発表であった。演者の主張ではポテンシャルモデル法（ＭＭ法）や部品組立法よりルール方式の方が優れているとのことであったが、その点についての詳しい説明がなされなかったので、会場から「何が新規なのか」という質問があった。このルール方式をとっているということで「知的な・・・」という標題がつけられたものと思われるが、講演を聞いた限りにおいてはこれまでに報告されているいくつかのモデリングシステムとの違いはよく判らなかった。

（豊橋技科大　阿部　英次）

8Ｉ11～8Ｉ12

8Ｉ11　講演中止

8Ｉ12　有機分子の三次元構造の経験的推算法－STERIC/ENCODE

本講演は、通常化学者が用いる示性式に近い形での入力（CHEMO 入力）から、有機化合物の３次元幾何を計算するシステムである STERIC1 と、結合関係表から母環、置換基、官能基を識別し、置換位置と立体化学表示を記述した CHEMO 入力を作成するシステムである ENCODE の更新版（第 5.0 版）に関するものである。

STERIC1 による３次元幾何生成の論理は、分子の局所的な標準的構造の値をもつ標準幾何と、明示的に CHEMO 入力で記述された特殊幾何に加えて、基本的な母環の実測値を格納したデータベースから検索された構造と、そのデータベース中には直接存在しない環構造に対して、変形、合成等の操作によって得られた近似幾何を組み合せて、構造を推算するものである。

講演では、同様の意図のもとに開発された、Wipke らによる AIMB システムとの対比とともに発表された。AIMB は約１万個の化合物を知識ベース化しており、発表されている実例では、本システムより実測構造に近い値を出しているが、類似構造が全く検索されない場合には処理は中断されるとされており、与えられた構造を全て自動的に処理する点が本システムの特徴であるとのことであった。

（姫路工大　中野　英彦）

特別講演Ｉ　企業における情報化学の現状と展望　　住友化学　吉田元二

住友化学における情報化学の適用分野、変遷の歴史、保有しているソフト・ハード、推進体制についてのかなり細部にわたる講演であった。何を作る、どう作る、何が出来たを研究対象に、コンピュータ利用体制をどのように整え、どのようにどの程度の規模で推進しているかを解説された。特に本年になって急速に進歩しているのが印象的であった。住友化学の例は質・量共に国内で最も充実している特別なケースと思われ、全体のレベルがこの水準に達するにはかなりの年月を要すると推定されるものの、各企業内部の実態は殆ど知られていないので大変参考になった。成果についての最新の報告がなかったのは残念であったが、情報化学に携わる企業内研究者の地位向上の為にも立派な成果のあがっていることを期待する。将来は計算機科学部門を独立させ研究所を設立する構想もあるとのことでおおいに声援を送りたい一方、演者自身も指摘されていたように、企業内情報化学者の評価体制作りが急務と感じられた。

（武田薬品工業㈱　神谷　和秀）

9I13－9I15

9I13　有機反応シミュレーション（電気化学総研）折田政寛、増田隆仁、杉本勳、岡本彰夫

半経験的な分子軌道法（AM1）を用いてS_N2反応に対する置換基効果について検討を行った報告である。この報告では従来の有機電子論では説明できない計算結果が得られたとの主張がなされていたが、研究の問題点及び事実との対応をもとにした説明が皆無なため、単に計算をしたという内容に終始したと言える。

9I14　知識ベースシステムによる触媒反応機構の創出システムの開発（愛工大）勝至陽、鬼頭繁治、（名工大）服部忠、村上雄一、（東海大開発技研）米田幸夫

触媒設計支援システム（INCAP）の一般化の一環としてGRACEの開発思想と化学者の経験的知識を知識ベースシステムとして融合した触媒反応機構創出システムの試作に関する報告がなされた。討論ではPrologにより記述された経験的知識をシステムに登録する場合に知識間の矛盾をどう解決するのか、また一般的知識と反応固有の知識の使い分けはどの様に制御されるのかが問題にされた。この点については今後の課題として発表者よりの確認があった。

9I15　直接キー入力した化学反応一式をParse（識別、解読）するプログラムーEXAPLおよびAPL2データ構造による取り扱い（化技研）西川利男

APL言語によりキーボード入力して、化学反応式を解読し、化学熱力学パラメータを算出するプログラムの報告。この内容はこの分野の過去の業績を全く無視したものと言わざるをえない。また研究報告の内容のレベルとしても更に吟味を加えたものにする必要があるのではないだろうか。

今回の私が座長を務めさせて頂いた講演について、個人的見解になるのを恐れず書かせて頂いた。

（豊橋技科大、船津公人）

9Ｉ16～9Ｉ17

横山らは，ぎ酸，酢酸の赤外・ラマンスペクトルのシミュレーション結果を報告した。この際，ｃｈａｒｇｅ　ｆｌｕｘ（構造変化に伴う有効電荷の変動）を用いるのは前回と同様である。実測値との対応はパラメータβによって調整しており，このβ値には統一性がなく，このβ値より算出するｃｈａｒｇｅ　ｆｌｕｘの値に，どの程度の信頼性がおけるのかとの印象を持った．ｃｈａｒｇｅ　ｆｌｕｘの理論値との対比を行い，特に今回示された単量体と二量体で，値が逆転する場合を証明できれば，応用の可能性は広がるのではないかと思われた。今回はスペクトルの半値幅についても，分子力場計算でのＬ行列からのシミュレーションの新たな試みを紹介した。シミュレーションはパラメータχｉを用いて行うが，このχｉの値を，どのように今後生かせるのかに興味が持たれた。

堀越らは，静電ポテンシャル図（ＥＰＭ）の（簡易的）作成方法について報告した。電子対固有のパラメータをもつ解析関数を用い，計算時間の短縮をねらっている。討論では，(1)近似の過程で採用した近似法の妥当性，(2)原子対に結合する原子種，コンフォメーション変化に伴う固有パラメータの一般性（普遍性）について，疑問，議論が活発になされた。著者らがめざす多原子分子でのＥＰＭ簡便作成時に，これらの問題にどう対処するのか，また他の方法との優劣が単に計算時間の短縮で計れないとの印象をもった。

（阪大薬　藤井　敏）

9Ｉ18～9Ｉ19

9Ｉ18　化学相互作用をあらわす軌道対（Paired Interactig Orbitals）の理論に基づく分子間相互作用解析システムの開発（住友化学）勝見広幸、他

異なる基底関数のセットで展開されている関数間の対応関係を調べる方法にCorresponding orbital の方法というのがある。その数学的手法を利用して分子間相互作用を体現している軌道対を求めるのが上記の方法である。ここで開発されたシステムは分子間相互作用を主に荷なっている軌道成分を図形として表現し、分子設計の一つのツールとして役立てようとするものである。

9Ｉ19　ミセル内反応のモンテカルロ・シミュレーション（千葉県立衛生短大）林　誠人

ミセル内の反応は一般の溶液反応に比べ反応が加速されるケースが多いので、そのメカニズムを探るためミセル内の粒子の衝突確立の二次元のシミュレーションを行ったものである。簡単なモデルではあるが、ミセルが円形という境界を持つことにより、一般の場合よりもある程度衝突確立が高くなることが示された。

（九工大情報工　柏木　　浩）

特別講演Ⅱ　構造活性相関と分子設計（京大・農化　藤田稔夫）

併催の第17回構造活性相関シンポジウムとの合同特別講演として、表記の講演が２日目の夕刻に行われた。

薬物分子の疎水性、電子的性質、立体的性質等をパラメータ化し、これらを含む重回帰式を用いて構造活性相関を定量的に記述するHansch—藤田法が演者らにより創始されてから、30年近くが経過した。この先駆的なＱＳＡＲ（定量的構造活性相関）の方法は、医・農薬開発のための分子設計に数量的な情報を与えるものとして、コンピュータの普及とともに全世界に広まり、日常的に使用されている。

ただし、Hansch—藤田法の適用は、通常、一定の骨格構造をもつ系列化合物に限定される。そこで、対象構造を拡げ、実際の新薬開発に有用な戦略指針を提供するものとして、このたび演者らにより薬物の基本骨格構造展開システムＥＭＩＬが開発され、当日その概要が紹介された。これは、生物活性の広い領域にわたって骨格変換に関連した定性的構造活性相関の過去の事例を収集整理し、抽出された情報を知識ベースシステムとして活用するものである。

新薬開発に際し、候補構造の創出と展開にはＥＭＩＬを、そして候補構造の最適化にはHansch—藤田法を使用するという、演者のライフワークとも言うべきempirical な薬物分子設計の方式が実践的なフィロソフィーが短時間に、多少めまぐるしく開陳され、満堂の聴衆に多大の感銘を与えた。

（北里大薬　森口　郁生）

１０Ｉ２０～１０Ｉ２１

１０Ｉ２０，１０Ｉ２１は何れもニューラルネットを用いたタンパク質アミノ酸残基の二次構造クラスの識別あるいは類似化合物クラスの分類に関する報告であった。質疑はニューラルネットの方法論に集中したが、二つの発表に対する筆者の共通の感想として、これらの研究目的がニューラルネットを使うことにあったのか、それともタンパク質の二次構造予測あるいは類似構造分類そのものが目的であるのかが発表からは必ずしも明確でなかったように思われた。

（豊橋技科大）高橋由雅

１０Ｉ２２～１０Ｉ２４

１０Ｉ２２　演者らは匂いセンサシステムの構築に関する研究を進めている。今回の発表は、これまでの研究結果を踏まえて、より広範囲の匂いを認識するためのシステムの構築に関するものである。１６個の半導体ガスセンサを配置するなど測定装置に改良が加えられている。また、被検対象を複数種の匂いクラスに分類するためにパターン認識法が活用されている。香調表現、原香、センサの増強などについて質疑応答があった。

１０Ｉ２３　タンパク質加水分解酵素パパインとオリゴペプチドの複合系についての分子認識機構の研究である。演者らは、ＡＭＢＥＲプログラムを用いて分子動力学シミュレーションを行った。水の連続体近似によるシミュレーションに比べ、水を個別的に評価した場合により妥当な結果が得られた。パーターベーション法による自由エネルギー計算についても言及された。誘電率の設定に関する質問があった。

１２Ｉ２４　演者らが開発を進めている分子設計のためのシステムＡＮＡＬＯＧＳに関する発表である。レセプターマッピングのための方法論として、ニューラルネットワークによるファジィ・パターン認識法が利用されている。１１種類の阻害剤（高活性化合物：７種、中活性化合物：２種、不活性化合物：２種）を用いて、アルドース還元酵素のレセプターマッピングが試みられた。ニューラルネットワークモデルについての質疑応答があった。

（住友化学　高山千代蔵）

１０Ｉ２５～１０Ｉ２６

１０Ｉ２５　核酸高次構造特性パラメーターの動的挙動と表示（阪大薬）藤井　敏、冨田研一

核酸のモデルとしてドデカヌクオチドの２重らせん構造体の動的挙動を分子動力学シミュレーションでしらべた。計算に用いたプログラムＡＭＢＥＲは個々の原子の運動についての情報しか与えないので、大局的な構造的ゆらぎを検討するため、各種ねじれ角、キンクパラメータ、塩基対間の２面角の時間変化を与えるプログラムを作製し、それらの間の相関やＮＯＥ拘束の影響を検討した。ミクロな原子の運動から大域的運動の特性をどのように引出すかが今後の動力学シミュレーションの重要な課題であり今後の発展が期待される。

１０Ｉ２６　パターンマッチを利用した蛋白質１次構造マルチ・マッチング法とその応用（北里大）菰岡仁志・梅山秀明

蛋白質の相同性の判定は高次構造の予測や構造―機能の相関の研究のために重要な手がかりを与える。本研究では多数の一次構造についてのデータを用いて、それらの間での相同性をマッチング表の形で提示したり、各種の統計的解析を行うプログラムを開発した。

（東京農工大工　安川　民男）

10I27〜10I29

10－I－27

分配係数を分子動力学計算と関係づけようとした研究で価値ある試みに思える。この研究では分子のコンフォメーションの決定にＡＭＢＥＲのプログラムを使って水を含めて分子動力学計算を利用している。そのコンフォメーションを使って従来発表されているように重回帰式から分配係数を推測している。第１５回構造活性相関シンポジウム（ｐ２９４）の佐々木、久保寺、松崎、梅山の報告を参考にするとよく理解できる。

10－I－28

分子動力学計算（ＡＭＢＥＲを使用）によって環状化合物のコンフォメーション解析を行って物理的に意味のあるコンフォーメーションを得ようとしている。質問に分子力学的に総当たりでコンフォメーションを求めたのとどう違うかということがあった。この講演は環状化合物の動力学計算をしてみたということであろう。

10－I－29

分子動力学計算（ＡＭＢＥＲを使用）によってキモトリプシンとリガンドの相互作用を計算している。分子動力学計算が信頼できるかについていろいろと試みている点で興味深い。結論としては注意して使わないと間違った結論に到達することもあるということであろう。酵素反応を追求するとあらば遷移状態の構造は避けて通れない問題であるが、この講演ではそれに対する切込みが足りないように思える。

（北里大薬　梅山　秀明）

ポスターセッション報告

９Ｐ０２　線形ギャップ重み関数による多重アライメント（富士通・国際研）田嶋耕治

タンパク質の生理的機能には、その立体構造が深く関わっている。タンパク質の変性・再生が可逆的に起こるからには、立体構造に関する情報はアミノ酸配列の中に含まれていると考えざるを得ない。しかし、現実には、アミノ酸配列から立体構造を非経験的に予測することは極めて困難であり、他の立体構造既知のタンパク質とアミノ酸配列の相同性を調べ、相同性が高ければ構造の類似性も高いと推定するホモロジー法が注目を集めている。

とくに最近、ＤＮＡ塩基配列決定法のめざましい進歩により、種々のタンパク質のアミノ酸配列が続々と公表されている。従って、組織的なホモロジー検索により、これらのアミノ酸配列の特徴や類似性を片っ端から調べ、これに基づいたタンパク質の系統分類と二次構造や立体構造の予測、ひいては機能の予測等が体系的に行われる事が期待される。

このような状況において、相同性の低い配列にも適用でき、しかも一度に多数の配列を短時間に比較できるようなアルゴリズムの開発は緊急の課題であると言えよう。

田嶋が今回発表した多重アライメント（並置）を求めるアルゴリズムは、ギャップが多く散在する相同性の低い配列に適用できるように、Gotoh の線形ギャップペナルティーを用いる手法を取り入れ、ギャップの減少と計算の高速化に効果を上げている。実例として、７本のグロビンと８本の免疫グロブリン配列について、それぞれαらせん領域及びβシート領域が、本アルゴリズムによる多重アライメントで明瞭に示されている。さらに、２６４本のヘモグロビンとミオグロビンの多重アライメントが、ＶＰ２００Ｅを用いて2分２４秒（ＣＰＵタイム）という高速で計算できたことが報告された。

なお、多重アライメントの結果は、配列比較の順序及びアミノ酸類似性の尺度に依存する。田嶋は、配列の順序の選定にはＵＰＧＭＡ法で作成した系統樹を使用し、またアミノ酸類似度にはDayhoff のlog odd 行列（mutationデータ行列、1979)を用いているが、さらによい基準があるかも知れない。

本研究の今後の発展と成果が、大いに注目される。

（北里大薬　森口　郁生）

９Ｐ０３　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（３）^{1}Ｈスペクトルの表示（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

演者らが進めてきているＮＭＲスペクトルデータベースシステムのパーソナルコンピュータ化の一環としての^{1}Ｈスペクトルの表示システムの現状報告であった。各ピークの高さと両側の半値幅を格納するという工夫によって、記憶容量がフルスペクトルを格納する場合の約１０分の１に節約でき、かつ精度よくスペクトルが再現出来たとのことである。^{1}Ｈ－ＮＭＲスペクトルデータベース構築にあたっては、精度と効率のよい検索を可能とする為のスペクトルのコード化法と、表示のためのフルスペクトルの格納法の選択が重要である。特に後者は使用可能なコンピュータ環境によってかなり左右される。パーソナルコンピュータという現在最も共通性が高い環境下で使えるシステムを目指している本研究の実用化が期待される。

豊橋技術科学大学　阿部英次

９Ｐ０４：「農薬安全情報データベースの構築と利用」（国立衛生試験所）関沢　純

数百種にのぼる農薬の安全情報をオフィスコンピュータやパーソナルコンピュータでも利用可能なように作成したが、毒性データなどの設定の根拠などの情報をも添加して、数値だけの一人歩きを防ぐような配慮がなされている。これは数値データをデータベース化する際の重要な点ではないかと思われるが、ここまで配慮がなされている例はまだきわめて少ないようである。不統一な用語や商品名などへの対策も講じられている。ただレコード数が増加して来たときの扱いはかなり大変なように思えた。

（電気通信大学）　山崎　昶

９－Ｐ－０５

ヒト発ガン物質の分子知識データベースを創ることを今のところ構造面を中心に試みている。非常に大事なデータベースであることは確かである。現在作成中で配布用に至っていないということである。本当にスクリーニング用に役立つためにはまだデータ不足のようである。発表者の話だと一人プラスアルファで作成しているので大変な作業のようである。将来が楽しみである。

（北里大薬　梅山　秀明）

９Ｐ０６　ＣＯＮＦＬＥＸ２による中ないし大環式分子の配座発生（北大理）○後藤仁志・大沢映二

分子力学法をフレキシブルな分子に適用する際に多極小点問題に遭遇する。この問題解決に自動配座発生法が種々考案されてきたが、いずれも分子が大きくなると探索しなければならない配座空間が広がってゆき、限られた時間内に安定配座を得ることが不可能になる。この解決にハード的にでなく、ソフト的にということで、ＣＯＮＦＬＥＸ２が開発された。Corner Flapping 法による出発構造　発生法、立体エネルギーと環を構成する二面角の比較による新配座の判定法、ボルツマン分布則に基づく存在確率での初期構造の選択法など、いずれの考案もこのグループならではのもので、プラクチカルで分子力学法に馴染んだものである。この報告を見てクラウンエーテルをはじめとする一連の複素環化合物に適用してみたい衝動に駆られた。

（群馬大教育　飯塚　健）

９Ｐ０７　分子力学計算、基準振動解析および振動スペクトルシミュレーションのための自動化プログラムＲＩＳＥの開発（京大薬）三輪嘉尚、町田勝之輔

分子の振動解析と安定構造を求めるプログラムである。通常の分子力場計算のためのパラメータの他に、赤外やラマンスペクトルを再現するような力場パラメータを利用者が入力でき、より精度の高いパラメータセットを作ることができる点が特徴のように思われる。

（九工大情報工　柏木　浩）

9P08　立体選択的反応とMM2計算値の関係. 1. アルドール型反応によるアセトフェノンからの3－ヒドロキシエステルの不斉合成（山形大・工）工藤嘉弘

アセトフェノンと酢酸エステルとのアルドール型反応による3－ヒドロキシエステル不斉合成反応　phe・C=O・A ＋CH_3・COOCH・Me・A" →phe・A・C*(OH)・CH_2・COOMe

では新たに生成する不斉中心C＊の対称性R，Sが用いる触媒がEt_2NMgBrか、Et_2NLiか、またCH_3・COOCH・Me・A" のエステル基の不斉中心がRかSにより複雑に変化することが実験的に見出されている。

この反応の特異性を理論的に解析しようとすれば金属原子を含む遷移状態のエネルギー・マップを求めるのが必要となるが、現状では実行困難なことから、分子力学計算プログラムMM2を用いて、まず反応中間体のモデルとして1，4-および1，6-ジ（A）シクロオクター1，3，5，7テトラエン（ここでA=t-Bu, Me, CCl_3）の間の平衡を検討し、また1,3,5-トリ（A）シクロヘキサー1,3,5-トリエンの立体配座を検討した。後者については実験データと一致する結果が得られている。金属イオンの影響をみるために酢酸エステルのカルボニル酸素の部分を2,4 6-トリオキサニルエチリデン基に置換したものについて計算を行ない、妥当な結果が得られたと主張している。評者の意見としてはモデル計算では採用したモデルの妥当性の検証を十分慎重に行う必要があると考えるが、その点で問題が多いと感じた。

（東京農工大工　安川　民男）

9P09　有機合成設計支援システム"AIPHOS"における知識ベースシステムの開発

AIPHOSシステム内の反応知識ベースの構成と利用についての報告である。各反応に関する知識が複数の観点からアクセスできるように構成されており、それぞれの知識が反応設計の切断部位認識と評価の2段階で使用される。展示された例においては、2段階への分割の必要性は必ずしも明らかでなかったが、この点に関しては今後システムの拡張を予定されているそうである。

（関学情報センター　岡田孝）

9P10. 有機合成設計システムCASINOの開発（11）キラルシントン認識・モジュールにおける考え方、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・湯田浩太郎・桶高　透・矢幡央子

本発表は、従来より開発の進められている有機合成設計システムCASINOの研究開発の一環として出発化合物の選定に伴うキラルシントンの獲得を支援するモジュール開発を目指したものである。ただし出発化合物として選んだキラルシントン中の不斉要素をそのまま生かすことに主眼が置かれている。

（豊橋技科大　船津　公人）

9P11　タンパク質構造表示プログラムＭＯＤＲＡＳＴ－Ｐの切断図形表示機能の拡張
姫路工大学工、中国南海大　○中野英彦、張金碚、山名一成、三軒齋

パーソナルコンピュータを用いるタンパク質表示プログラムの機能拡張に関する報告である。部分切断、複合表示の面でさらに改良を加えたことにより、ソフトのユニークさが増した。また構造が見易くなったとともにきめの細かい構造情報を得ることも可能になった。筆者自身初めて三次元ディスプレーでタンパク質の構造を見たときの感激を思いおこした。高価な装置を用いずとも、どこの研究室にでもあるパソコンを用いて手軽にタンパク質の構造が見られるのは大変意義のあることと考える。
有効なソフトは誰でも利用したいものであるが、幸い本ソフトはサイエンスハウス社を通じて入手可能とのことである。
（武田薬品工業㈱　神谷　和秀）

９Ｐ１２　３Ｄグラフィックス装置を用いた波動関数の簡易表示プログラムの有機化学への応用

本発表は、ＣＰＫモデルの表面上に、分子軌道法により計算された分子軌道関数、電子密度、静電ポテンシャルなどの値を、カラー表示するプログラムに関するものであり、これまでに発表者らが開発してきた、軌道関数等の等値曲面を表示するプログラムシステムに新たな機能を追加するものである。システムは、計算部分と描画部分に分けられており、計算部分はスーパーコンピュータ（ＳＸ－２Ｎ）で、また描画部分はＮＥＡＣ　Ｓ２０００で実行される。計算部分では、半経験的分子軌道法計算パッケージ（ＭＯＰＡＣ）での分子軌道計算に基づき、図形要素の色相、輝度の計算までを行う。他機種に移植する場合には、描画部分の変更のみでよいとの事であった。
（姫路工大　中野　英彦）

９Ｐ１３　分子内原子の図形表現（中京大教養）秦野　甯世

分子の電子密度関数を用いた解析法の一つであるBader 等のトポロジカル・アトムの方法に基づくさまざまな物理量の図形表現の例としてアミノ酸エステルの金属錯体の分子内原子の平均電子数の計算、原子と原子の境界面の図形表示が報告された。
（豊橋技科大　船津　公人）

９Ｐ１４　分子性結晶構造データから単位胞中に含まれる完全な分子の構造データのみを抽出するためのアルゴリズムが報告された。完全分子と分子断片を識別するための方法としては予め生成した結合データをもとに、単位胞中の任意の粒子から出発し、バックトラック手順に従ったツリー検索により、出発粒子を含む分子の構成粒子の数を調べるものであり、アルゴリズム的に特に新しいものではないが、単位胞中の分子断片の除去による完全分子のみの表示は分子のスタッキングの様子を視覚的にとらえる上で非常に見易く、開発されたプログラムの実用的見地からは興味深いものであった。
（豊橋技科大　髙橋　由雅）

９Ｐ１５

中川らは，蛋白質分子間の１次構造のクラスタリングに，アミノ酸の種類を考慮した新規なスコアを導入する方法を報告した。このスコアを情報量（ｂｉｔ）とし，主にアミノ酸の性質に基づく情報量を対応アミノ酸間で決める。これを元に，分類樹の作成は一般的な方法で，選択，並び替えを行っている。スコアの計算方法に工夫がなされ，スコア値の加成性などが成立していると考えられた。この半定量的なスコア値は，構造類似性，保存性と立体構造，機能との関連付けに有効に使えるのではないかとの印象をもった。適用はよく用いられるチトクローム群についてであり，他の蛋白質群での適用例と，この方法と今までの方法との違いが示されることを期待したい。

９Ｐ１６

唐沢らは，蛋白質の２次構造の予測を，パターン認識法で試みた結果を報告した。１つのアミノ酸と，その前後５つ，合計１１個のアミノ酸の種類について，αへリックスなどの２次構造に組み込まれる確率を判別分析法で行った。全体的な的中率は，他の方法とそれほど差があるとは思えない。むしろ判別分析の中身に，大切な情報があるのではと興味を持った。

（阪大薬　藤井　敏）

９Ｐ１７　デカルト座標から内部座標へのデータ変換プログラムの報告第２報であり、前報では環系を含む場合にも最長鎖基準を優先した環切断規則による樹木構造の生成をもとに、内部座標計算の基本単位となる４原子系の決定を行ったのに対し、今回の方法では予めＳＳＳＲアルゴリズムに従った環解析を含む特徴解析を行い、環系部分・ブリッジ・側鎖部に分割した後、逐次処理を行うことで、これらの構造特徴を意識した系統的な４原子系の内部座標生成を行う工夫がなされた。

（豊橋技科大　髙橋　由雅）

９Ｐ１８　分子設計支援システムＴＵＴＯＵＲＳの開発：構造特徴制約下での構造組み立て
（豊橋技科大）○山本和義・髙橋由雅・佐々木慎一

薬理作用を発現する医薬品の化学構造には官能基対というものが高い比率で見出される。この経験則とのいうべきものを、原子団相互のトポロジカルな距離と認識して結合の数で表わし、構造特徴制約条件とした。これによりＴＯＴＵＯＲＳのサブシステムＦＲＳＥＬ－ＣＡＳＴにおけるフラグメントの組み合わせ作業の過程に、人工知能的効率化（発表者らは一言もそのような表現は用いていないけれども・・・）が計られたとみてよいのではないだろうかと思う。

（群馬大教育　飯塚　健）

９Ｐ１９　　　分子構造の類似性に基づき、一群の化合物をツリー状にクラスタリングするためのシステムＣＬＵＳＭＯＬ２の機能拡張と、有機リン系農薬への適用結果の報告である。発表者らは、ある化合物群について、クラスター内でのサブグループ（例えば薬効の違いによりグループ分けしたもの）の混じり具合を表す指標を定義した。そして、これを用いて、サブグループ間の差異がクラスタリングに反映されるようにした。彼らは、６４種類の有機リン系農薬について解析を行い、部分構造とサブグループ（殺虫、殺菌、除草）の関係について幾つかの仮説を提出した。いずれの活性も示さない化合物を１個のサブグループとして含む系について計算をすれば、結果はどうなるだろうか。興味が持たれる。

９Ｐ２０　　　発表者らのグループで継続して研究が進められている有機化合物の自動構造推定システムＣＨＥＭＩＣＳの、２次元ＮＭＲデータを利用した機能拡張に関する報告である。今回発表された研究の結果、^{13}C－^{13}Cシグナル結合情報に加えて、Ｃ－Ｈ　ＣＯＳＹおよびＨ－Ｈ　ＣＯＳＹデータの処理が可能になった。また、未知化合物の構造中に存在すると考えられる部分構造式およびＮＭＲシグナルの帰属情報の入力も可能となり、解析能力が大いに向上した。本システムの実用化に向けて研究がさらに進展したものと言える。

（住友化学　髙山千代蔵）

第13回情報化学討論会（予告）

日時：1990年11月28日（水）～30日（金）
場所：豊橋ホリディイン

〔交通〕ＪＲ豊橋駅よりタクシー10分程度。公共交通機関の便はあまり良くありません。現在、参加者の為の特別割引きを同ホテルと交渉中ですので、それを御利用頂けると思います。

尚、「構造活性相関シンポジウム」も同じ会場で、同じ日程で行われる予定です。

世話人：佐々木慎一　豊橋技術大学
〒441 豊橋市天伯町字雲雀ケ丘1-1 ☎0532-47-0111

年会プログラム

第59春季年会 化学情報・計算機化学プログラム

日時　1990年4月1日（日）～4日（水）
場所　神奈川大学横浜校舎

Ａ４会場（３号館342 教室）
4月1日（日）〔化学情報・計算機化学〕
〔9:50～10:40〕（座長　中山　堯）
１Ａ４０６　テトラエチリデンシクロブタンの幾何異性の表示法（群馬大教育・ベルン薬学研）○飯塚　健・J. T. Clerc
１Ａ４０７　パーソナルコンピュータによるＸ線結晶構造解析の自動化システムの開発（２）（リコー・東理大工・近畿大理工）○岡田健二・岡田幸子・小山裕三
１Ａ４０８　四結合三次元ネットワークのハミルトングラフ表現法と適用例（群馬大工）佐藤満雄
１Ａ４０９* パーソナルコンピュータによる分子動力学計算システム（北大理）○河村雄行・横川敏雄
〔10:40 ～12:00〕（座長　飯塚　健）
１Ａ４１１* ミニフォーラム　32ビットパソコンの現状と化学における利用（富士通）湯田浩郎・戸田伸男・西田和弘
１Ａ４１５* ミニフォーラム　化学ソフトウェアーの流通の現状と将来（化技研・東大工・北大理）○田辺和俊・平野恒夫・大沢映二
〔13:00 ～13:50〕（座長　岡田　孝）
１Ａ４２５　複合半導体ガスセンサシステムによる混合気体中の複数成分の同時定量（豊橋技科大・新日鉄第一技研）○早川泰弘・金谷重彦・阿部英次・佐々木慎一・小野昭紘
１Ａ４２６　有機化合物の自動構造推定システムＣＨＥＭＩＣＳの開発―Counterpart 推定への２次元ＮＭＲデータの活用―（豊橋技科大）船津公人・○原藤　寛・佐々木慎一
１Ａ４２７　ニューラルネットワークによるスペクトルパターン認識（１）スペクトルの分類（化技研）○田辺和俊・田村禎夫（ファコムハイタック）上坂博亨
１Ａ４２８* 多核種ＮＭＲスペクトルデータベース作成（Ｉ）、コバルト－５９スペクトルデータの標準物質に関する検討（電通大）山崎　昶
〔13:50 ～14:30〕（座長　藤田真作）
１Ａ４３０　中止
１Ａ４３１　有機合成設計システムＣＡＳＩＮＯの開発（12）抽象化した逆合成パターンを用いる逆合成経路探索モジュールの構成ならびに実行検証例（化技研・富士通・東薬大）○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・矢幡史子・原　昭二
１Ａ４３２　立体選択的反応の理解のための計算化学の利用（２）。３―オキシエステルの不斉合成反応へのＭＭ２の援用（山形大工）工藤喜弘

1Ａ４３３　１，２－ジメトキシエタンおよびそのメチル誘導体の分子力学計算（京大薬）○三輪嘉尚・町田勝之輔

〔14:30 ～15:10〕（座長　工藤喜弘）

1Ａ４３４　分子動力学弦による分子性結晶の構造予測システムの開発（東京農工大工）小南忠弘・麓　雅樹○渡辺敏行・宮田清蔵・安川民男

1Ａ４３５　受容サイトにおける分子認識機構（第６報）錯形成自由エネルギーの解析（東京農工大工・化技研）樋口敏幸・麓　雅樹○安川民男・田辺和俊

1Ａ４３６　パターン認識によるタンパク質二次構造の二段階識別：特徴抽出による識別モデルの改良（豊橋技科大）○高橋由雅・唐沢　肇・佐々木慎一

1Ａ４３７　ＰＬＳ法によるチオカーバメート類の殺菌活性と除草活性の定量的構造ー活性相関（豊橋技科大・住友化学）○大迫広征・宮下芳勝・高山千代蔵・佐々木慎一

〔15:10 ～16:10〕（座長　松浦育敏）

1Ａ４３８* ミニフォーラム　化学物質名・化学教育の現状と将来の問題（電通大）山崎　昶

1Ａ４４１* ミニフォーラム　化学・特許情報の現状と残された課題（帝人技術情報）長谷川正好

※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、ミニフォーラム従来１件30分であり、１Ａ４３８と１Ａ４４１は30分ですが、１Ａ４１１と１Ａ４１５は講演者が３人のため例外的に40分となりました。

★日本化学会情報化学部会総会のお知らせ

４月１日（日）16時15分頃から（一般講演終了後）会場にて当部会の総会を開催致します。

国際会議

１９８９環太平洋国際化学会議 (PACIFICHEM '89) 情報化学関係報告

06 INFORMATION TRANSFER （情報伝達化学）
COORDINATOR による報告

筑波大　藤原　　譲

昨年度末クリスマス直前の12月17日（日）から22日（金）までハワイのホノルルで、太平洋に面した26の国および国際組織が参加して、化学の国際会議が開催された。５年前に初めて行われた会議の第２回目のものである。今回は全体の参加者が7,300 名を超し、日本からも3,500 名ぐらいの人が登録していたので、前回に比し大幅に増加したことになる。これは数の上のみでなく、発表内容や、会場の討議などでも密度の高い充実した会議であった。

情報化学、化学情報の関連で全体を見ると、中心となるInformation Transferは化学全体を９つの主題領域に分けた１つとして独立しているので、この分野が化学の中で独自の領域として認知されたことを示しているので、長年この分野に携わって来た者の一人として感慨深いものがあった。

この部門は、９つのシンポジウムと４つのポスターセッションから構成され、193 件の発表が行われた。各シンポジウムの担当オーガナイザーから報告が寄せられているので、内容の詳細はそちらを参照していただくこととして、この領域全体についての印象を述べることにする。

第一は、Information Transferという名称からも伺えるようにして、対象領域を大きく把えており、いわゆる化学情報、計算機化学、情報化学、数理化学、Chemometricsなどの他に、化学工業、経済、経営、などを広く含み、さらに化学教育も４つのシンポジウム、２つのポスターセッションで非常に大きな分野となっていた。さらに分析化学におけるラボラトリーオートメーション、ロボティックス、環境に対するＱＳＡＲやChemometricsなどがあり、裾野の広がりが感じられた。

第二は薬品設計、反応設計や計算化学の実用化が進み、関連の深い応用領域での発表が増加していることである。これは情報化学の手法の有効性の証明であり喜ばしいことであるが、聞きたい発表が重なり、選択に苦慮する程あり、次回のプログラム作成にはこの点の調整を折り込むことが必要と思われる。もっともInformation Transfer内部だけでも連日２ないし３シンポジウムが平行し、さらにポスターセッションが別会場で行われたので、全部を聞くことはいずれにしても既に不可能な段階になっている。

第三に発表者、一般参加者ともに観光ハワイの誘惑にも負けず、出席率が非常に高く、討議にも熱心で、実りの豊かなものであった。これは絶対数が多かった事もあるが、研究の手法が次第に定着して、議論のための共通基盤はできてきた事を示している。

第四は、当初シンポジウムを募集した際、約40の主題が寄せられ、これが最終的に9つに集約されたわけであるが、分野の分類の基準となる中心手法や対象の整理が充分でないことも示している。分野全体としての体系化にはまだ歴史が浅いともいえるが、研究者も多くなり、応用も広がっていることから検討すべき時期と思われる。またこのことに関連してChemometrics、化学教育、化学工業など現在情報化学ではあまり扱われていなかった問題の位置づけも必要と思われる。

第五は会議の運営として、コーヒーブレイクでのコーヒーサービスやシンポジウム別の夜の集まりなどがシンポジウムに任されていたが、その事に関する周知方法や、資金事情の認識などが不十分で、シンポジウム間での不均衡が目についた。会全体では大盛況で剰余金も多かった事から、本部としての対処の仕方の改善を含めて、次回はより充実するとともに、より楽しいものになればと念願している。

いずれにしても、今回の会議の成功は各シンポジウムの自律方式に依るところが大きくそれだけ各シンポジウムの世話人や事務局の方々の負担が大きかった事になるので、この場を借りて感謝の意を表させて頂きます。

ORGANIZERによる報告

06-B SYMPOSIUM ON CHEMISTRY IN THE ELEMENTARY SCIENCE CURRICULUM

環太平洋国際化学会議　シンポジウム 6B 初等理科教育における化学 (Chemistry in the Elementary Science Curriculum) についての報告

東北大学医療技術短期大学部
荻野 和子

この会議では化学教育関係のシンポジウムが４つもたれた。とくに「初等教育における化学」が国際化学会議のなかでとりあげられたのは，若い世代に「化学離れ」の傾向がみられ，米国では初等中等レベルの理科教育の改善が急務とされていることが背景になっている。

シンポジウムは，１２月２１日，２２日の２日間にまたがって開催され，日本５，米国４，ニュージランド２，カナダ，オーストラリア，中国各１の計１４件の講演があった（プログラムは本誌７巻，５号８頁に掲載されている）。

我が国からの発表は，真山恵子氏（仙台二中）二酸化炭素についての半定量的実験教材，池尾和子氏（奈良教育大）教育器材の開発，菊池義広氏（東仙台中）イオン交換体を使ったイオン概念についての実験教材，綿抜邦彦氏（東大教養）中学校の新学習指導要領について，荻野和子（東北大医療短大）初等化学教育におけるいくつかの実験　であった。これらの講演に聴衆は熱心に聞き入り，大きな反響があった。新しい実験教材についての発表は，いづれもＪ．Ｃｈｅｍ．Ｅｄｕｃ．誌の編集者から投稿を要請されている。

外国の発表は，すべて大学等の研究者によるものであった。いずれの発表でも強調されたのは，生徒自身の体験，実験の重要性，生徒の日常経験との関係づけの大切さであり，小中学生やその両親，地域での化学についての普及啓蒙活動についてのものを含め，さま

ざまな実践についてのものが多かった。J.B. Endacott 氏(Swinburne Inst. Tech.,オーストラリア)は"Family Science Project, Australia", "Swinburne Science Show" などのプロジェクトについて全参加者に150ページほどの大きな冊子を配った。M.Sarquis (Miami Univ.,米)の"Toys, Partners, and Fun — The Keys to Successful Chemistry in the Elementary School" をはじめ，実験実演をまじえた発表が多数あり，化学の楽しさ，面白さを次世代をになう子供達に知らせようという熱意のあふれたシンポジウムであった。

中国の陳祖福氏 (State Education Commission) は "Chemical Education in the Elementary Science Curriculum"と題した講演で，中国の小学校理科教育中の化学について述べた。小学校の理科（自然）は現在３年生からであるが，１年生から始めるよう改革がはかられており，時間数も増加される方向であるとのことであった。

このシンポジウムを通して各国の初等理科における化学教育の理念や経験を交換したことは，各国の今後の化学教育に寄与するであろう。

06－C SYMPOSIUM ON COMPUTERS IN CHEMICAL EDUCATION

(埼玉大理) 下沢　隆

このセッションのOrganizerは，J.W.Moore（米国），E.V.Blackburn(カナダ)，X.Xin(中国)および筆者であった．

プログラムは，火曜日が口頭発表，水曜日はポスター発表に当てられた．米国，カナダ，中国，日本の他，濠州からも発表があり，内容のあるシンポジュームであった．

口頭発表とポスター発表を国別にすると，下表のようである．

	米国	カナダ	中国	濠州	日本	計
口頭発表	5	3	3	1	2	1 4
ポスター	5		1		7	1 3

わが国からの参加者は次の通りである（五十音順，敬称略：共同発表者を除く）．

尾崎成子（一橋大学），黒石佳伸（埼玉大学），木原　寛（兵庫教育大学），笹村泰昭（苫小牧高専），下沢　隆（埼玉大学），寺谷蔵介（東京学芸大学），時田澄夫（埼玉大学），矢野敬幸（一橋大学），吉田俊久（埼玉大学），渡部正利（工学院大学）．

口頭発表の中で，S.Smith と L.Jones (Urbana IL) は，TEACHING CHEMISTRY WITH THE INTERACTIVE VIDEODISK と題して，ディスプレイーにレーザーディスクの画面を用いる方法を発表した．IBM/PCから入力された信号が，通常はGCで現れるが，必要に応じてレーザーディスクの画面に切り替わるシステムで，市販品の展示の場でも宣伝されていた．

また，J.W.Moore (Univ.Wisconsin-Madison) は，INTERNATIONAL ACTIVITIES OF PROJECT SERAPHIM の講演を行った．SERAPHIMは，米国化学会の化学教育部会の下部組織で，ＮＳＦの援助を受けて化学教育に用いられているマイコンソフトの収集を行ったり，それを評価してカタログを出版し，安価にディスクをコピーして，会員に配布すること，また，

SERAPHIM自身でソフトを開発する等，マイコン利用ではユニークな活動をしている．このプロジェクトは最近ではヨーロッパに支部を置き，欧・米で開発されたソフトを相互に交換することを始めた．ヨーロッパのチャンネルはフランスのニース大学である．

この講演の後，わが国もSERAPHIMの支部を置きたい旨提案し，「化学ＰＣ研究会」がその任に当たる協定を結んだ．今年６月を目度に正式な契約を取り交わすことになっている．

上表に見るように，わが国からの発表はポスターに重点を置いた．日本電気社のご好意で，我々の通常使用しているパソコンを借用し，人力で搬入して，ポスターセッションで使用した．外国人は初めて日本製のパソコンに接したわけで，我々の開発したソフトの本物を目の当たりに見せることが出来た．パソコンソフトを紹介するときに，やはり本物で見せなければならない．これは，８月にカナダのWaterloo大学で開催された10-ICCE（国際化学教育会議）でも同様であったが，これまでＶＴＲやＯＨＰで幾ら特性を説明しても納得しなかったことを思うと，今年の会議の意義は大きかったと思う．

米国では，ＣＡＩの開発の時代は終わり，実施の評価の時代である．また，新しいハードの開発が始まっている．米国化学会で開発されたレーザーディスクを用いるＣＡＩソフトも購入してきた．わが国の化学教育が米国並に活性化されるのはやはりまだ時間がかかりそうである．

06-D SYMPOSIUM ON EXPERT SYSTEMS IN CHEMISTRY

世話人代理　髙橋由雅（豊橋技科大）

０６－Ｄ　本セッションは "Symposium on Expert Systems in Chemistry" の名のもとに招待講演を中心に１９件の口頭発表が組まれ（内１件は講演中止）、会議第２日目ＡＭ８：００から終日それぞれの発表が行われた。会議初日はオープニングセッションのみであったことから、当日は実質的には初日とも言える状況の中で早朝８：００からの開催にもかかわらず立見も出るほど（４０席程度の狭い会場ではあったが）の盛況ぶりであった。

内容的には本セッションが当初 "Expert Systems in Spectral Interpretation"で論文募集を行ったこともあり、構造推定並びにスペクトルデータベース関係の発表（９件）が目立った。（発表１８件中９件）、他に有機合成・反応設計３件、分子設計・分子モデリング３件、タンパク関係２件、その他１件。構造推定ではアリゾナ州立大のＭｕｎｋ教授のグループがＣＡＳＥに引き続いて開発を進めているシステムＳＥＳＡＭＩの現状として、原子中心フラグメントの設定と２次元ＮＭＲデータも含めたスペクトルデータからの部分構造推定及びこれにもとづく構造組立ての一連の処理についての考え方がレビューされた。また、上海有機化学研究所のＺｈｅｎｇ教授からは同研究所で進めるＣＩＳＯＣプロジェクト（有機化学のための総合化学情報システムの開発プロジェクトで化合物情報管理から構造一物性／活性相関解析の構造推定に至るまで広範な研究支援を目的としたシステム開発を目指している）で進めている構造推定システムＣＩＳＯＣ－ＳＥの報告があった。このシステムはＩＲ，ＭＳ，Ｃ－１３ＮＭＲの３つのスペクトルデータベースと化合物ファイルと背景にした構造同定および推定部分構造にもとづく構造組立方式の併用システムを目指し、前者はすでに30000～80000件以上のデータベースを整備済とのことであるが後者についての完成度は必ずしも明確ではなかった。また、Ｗｏｏｄｒｕｆｆ教授からは赤外スペクトルデータ解析システムＰＡＩＲＳの改良について報告があり、知識そのもの以上

に、新たな実験事実等にもとづく知識（ルール）の増強や優先性の変更等に対処し得るような知的処理や管理が重要であることが強調された。

また、ミュンヘン工科大のＧａｓｔｅｉｇｅｒ教授（今回はＡＣＳの会員として参加）は機内でのブリーフケースの紛失のアクシデントもあり、急きょ前夜作成した手書き資料をもとに、合成設計・反応予測における知識ソースとしての反応事例データの知識ベース化もさることながら、そこから集約される知識の汲み出しとモデル化の重要性を説いた。

この他、今回の米国側の世話人であるＨｅｌｌｅｒ教授の共同研究者Ｄｒ．Ｐｅｎｋａから、Ｃ－１３ＮＭＲ，Ｈ－ＮＭＲ，ＩＲ，ＭＳの各スペクトルデータベースをもとにした新たな知識獲得の試みが報告された。また、ＵＣのＷｉｌｋｉｎｓ教授のＬＡを含めた構造同定・推定のためのＩＲ（ＡＴＲ），ＭＳの自動サンプル調整（螺旋回転台を利用した試料の凍結調整の自動化を含めたロボティクスとも言えるもの）と同時測定、検索処理の自動化の試みやＢｅｉｌｓｔｅｉｎの研究者からの化合物の構造式にもとづく自動命名システム（現行システムでの正当率は２０～２５％程度であり、さらに改良中。引き続き名称→構造式の自動化も検討とのこと）の報告があり、これらについては実用面からの地道な努力に敬服させられた。

以上、紙面の都合もありここでは諸外国からの参加者のトピックスを中心に本シンポジウムの既略を報告した。

06-E SYMPOSIUM ON CHEMICAL BUSINESS RESEARCH AND DEVELOPENMT IN THE PACIFIC BASIN

『環太平洋化学産業の経営戦略シンポジウム（０６Ｅ）』に参加して

㈱東レ経営研究所専務取締役
工学博士　依田直也

いよいよ90年代の幕を開けた世界経済は、東西陣営の緊張緩和と東欧の社会変革の潮流に乗り、新たな発展に向けて動き出した。われわれを取り巻く戦後の社会経済の枠組みは、ここにきて急激に揺らぎはじめ、世界は新しい経済秩序建設の時代に入ったかにみえる。21世紀に向けてそのタイミングに合わせて、化学産業の経営戦略と国際化の課題を討議する目的で、昨年12月17日～22日に第２回環太平洋国際化学会議が時宜を得てハワイで開催され、『化学産業の経営戦略シンポジウム』のオーガナイザーとして出席する機会をえた。1984年の第１回国際シンポジウムの座長を務められたアメリカ化学会のK．クレーバー博士が今回も座長を務められた。これにカナダ化学会のシモンズ代表と日本化学会から依田が副座長として参画した。

化学産業においても国際化が急速に進み、世紀末を迎えるにあたって、西側も欧州共同体の単一市場形成をめざして、1992年への準備が怠りなく進められている。ここで重要な視点は、市場万能主義と計画経済の中間の安定点を西と東が求めて歩み寄ることであろう。自由と計画性をどのように調和し、そこに公権力をどう位置づけるか、この重要課題に答えるために、人類全体の歴史から必要な知恵を借りねばならない。

そこでこのシンポジウムを振り返ってみると、80年代までは良い製品をすぐれた技術でできるだけ多く作ればよい時代であった。だが、21世紀は地球環境問題と人類の福祉、平和の時代であるという印象を深くした。この意味で、今年はその21世紀の助走が始まる年といえよう。

そこでまず、グローバルな環境問題と炭酸ガス増大による地球温室効果の課題をもう一度、資源、新代替エネルギー、廃棄物処理など、総合的に広い視野でとらえなおす必要があろう。本シンポジウムの3つのセッションでは、第1セッション3講演（座長、依田）、第2セッション4講演（座長、クレーバー博士）、第3セッション4講演（座長、香港化学会ウォン博士）が12月19、20日の2日間にわたっておこなわれた。ことに、グローバルな環境問題と化学産業の技術革新と新素材の市場予測の新しい試みについて、各講演に引き続き活発に討論がすすめられたのが印象的であった。

日本代表として、前日本化学会会長、東レ伊藤会長（21世紀に向けて化学産業のグローバリゼーションと経営戦略）、住友電工中原副社長（ケミトトニクスと情報産業のR＆D経営戦略とグローバリゼーション）、通産省鈴木技術総括審議官（日本の産業技術政策と国家研究開発プロジェクト）、および依田（日本の材料産業の技術革新と産学官共同研究体制について）の4件の講演が行われた。ことに環太平洋新技術シンポジウムの基調講演として東レ伊藤会長が第1日目の冒頭で講演があり、J. R. ノレル座長およびアメリカ化学会企業アソシエーツの会員はじめ多数の参加者があり好評であった。米国未来学研究所A.G.クーク氏は1990年代の化学市場の革新技術のインパクトについて、革新技術の確認、解析、さらに将来予測モデルの報告が行われた。この研究は、企業の長期経営計画の策定上重要である。
P.R. ラントス氏（米、Targetグループ、）はR＆Dプロジェクトのポートフォリオを技術プッシュ指向からマーケットー（プル）指向戦略に変革すべきことを強調した。企業化開発研究と市場調査の相関性の検討と研究開発のグローバリゼーションについて現状解析の報告があった。また米政府国際開発局のH. A. レシール氏は、発展途上国のモロッコ、シリア、インドネシア、マレーシア、スリランカ、コロンビア、ボリビア、パナマ、ルワンダ、ウガンダ諸国の市場調査の紹介があった。これらのデータは今後の予測と経営戦略への展開例について研究されている。

第3セッションは、香港、中国の代表から東南アジア、香港、中国の化学産業の実状について産業政策と技術開発、人材育成、資本投資の問題点の報告と討論が行われた。カナダのアカディア大学F.C.マニング教授はカナダの化学技術の産学共同研究について、報告が行われた。現代の大学、民間企業共同研究の利害得失について説明があり、大学は研究資金の援助、企業は最先端技術と人材育成のメリットが十分あることがカナダで実証されているとの報告があった。
今後バイオテクノロジーについて、産学共同のプロジェクトの実施が行われるという。わが国のタンパク工学研究所について、東レ伊藤会長の基調講演の内容はこの点に関しても、貴重な運営実績として注目された。

また、招待講演者として、セイコー電子工業原社長の特別講演があり、「セイコー電子の科学分析機器の開発と実用化」について、研究、商品イメージ決定、開発、市場開発、生産、販売のプロセスについて、実例の紹介があった。QC試験機器の開発については、市場ニーズの先取りと研究開発の重要性が強調され、注目を集めた。

化学産業の技術トランスファーと地球環境問題が90年代の環太平洋市場において、極めて重要な課題であることが一環して主張されてきている。ことにわが国化学者3500名の参加のもとに、日本からは1,700 件の発表があり、全体(4500 件）の40% を占めている。今回の化学産業経営シンポジウムでも、16件の中で40% が日本からの招待講演であったが、環太平洋市場において、わが国とNIES，ASEAN諸国、ならびに中国との新しい経営戦略が極めて重要であり、人物交流と情報交流、技術移転の重要性がますます増加するであろう。

この意味で、今回の環太平洋国際化学会議は時宜を得ており、21世紀への有意義な「新化学へのターニングポイント」となったことは確かである。

0 6 - F SYMPOSIUM ON INTERNATIONAL DEVELOPMENTS IN CHEMICAL EDUCATION

(埼玉大理) 下沢　隆

このセッションのOrganizerは, M. Gardner(米国), P.J.Fensham(濠州)および筆者であった.

プログラムは, 全て口頭発表で, 水曜日の午前・午後に開催された. しかし. 筆者は6Cのセッションと重複したため, 全講演を聞くことが出来なかった. ここにプログラムを採録して置く.

Peter J. Fensham (Monash Univ.,Clayton,Victoria): NEW DIRECTIONS FOR CHEMICAL EDUCATRION IN AUSTRALIA. 濠州における中等レベルの化学教育の改善案の説明. 身の回りにある題材から化学に興味をもたせようとしている.

M.Gardner(Lawrence Hall of Science, Univ.California, Berkeley): INTERNATIONAL DEVELOPMENTS IN CHEMICAL EDUCATION; THE AMERICAN PERSPECTIVE. 環太平洋諸国間での「化学教育に関する情報交換」の必要性と, 最近の米国の化学教育研究の紹介. 教員の資質の向上への努力も紹介された. ここでも身の回りにある題材を活用することが強調された.

John T. Shimozawa (埼玉大学):THE REVISED EDITION OF THE COURSE OF STUDY FOR JAPANESE HIGH SCHOOL-Science Course-. 今回改正された高等学校理科の学習指導要領の説明. 特に「化学IA」と「総合理科」の内容をその導入の背景から解説した.

N.Chaikum(Mahidol Univ, Thailand): DEVELOPMENTS IN CHEMICAL EDUCATION IN THAILAND. 化学の専門家の養成を意図したカリキュラム開発の解説.

L.H.L.Chia(National Univ. Singapole): CHEMIAL EDUCATION IN SINGAPORE. 現状は英国の16プラスの模倣である. これを独自のものにしたいと考えている.

A.M.J.Javallana(Ateneo de Manila University): CHEMICAL EDUCATION IN PHILIPPINES.

H.Kass(Univ. Alberta): APPROACHES TO CURRICULUM CHANGE IN CANADIAN SECONDERY SCHOOL CHEMISTRY. 技術の進歩, 環境問題, 社会と化学との接点等を中等教育に入れた試みの紹介. 教員養成の必要性も指摘された.

この他に, 中国やマレイシアからも発表があるはずであったが, 不参加であった.

このシンポジュームの目的は, M.Gardnerが提案したように, 環太平洋諸国の化学教育の情報交換であった. わが国の立場は誠に微妙である. アジアの諸国は日本に期待している. 一方で, わが国固有の困難もあって, 例えば, 日本化学会がアジア諸国に何の援助もできないでいるのが実情である. しかし, 米国は伝統的に開発途上国への援助をする. 米国は, 日本にその肩代りを暗黙裡に要求している節がある.

そろそろわが国も，開発途上国援助の障害になっている事項を整理し，積極的な解決策を講じないと，世界の孤児になってしまうように感じられてならない．例えば，現在のように金銭や現物のようなハードの供与ではなく，文化・人物のようなソフトの輸出を試みる時がやってきているのではなかろうか．

06－G SYMPOSIUM ON NEW IDEAS IN CHEMICAL EDUCATION

（大阪大学名誉教授）山田祥一郎

シンポジウムは12月18日（月）午前9時から、午前と午後にわたって、Sheraton Waikikiホテルの Kohala Room で開催された。また、その日の夕方（5時～7時）にはポスター・セッションが行われた。シンポジウムに先立って、その前日17日（日）の午後5時から6時半まで、レセプションが催され、発表者や関心のある人々が集まり、顔合わせを兼ねて懇談し、あるいは旧交を温めて、一ときを過ごした。

シンポジウムで取り扱われた内容は、高校、大学、一般市民のための化学教育に関するもので広い範囲にわたっており、ビデオ、スライド、OHPを利用して、講演14件（米国9、日本4、中国1）が発表された。ポスター発表は2件（ともに日本）であった。日本からは小出、林、古橋、山田が講演を、桂、丸山らがポスター発表を行った。以下に、主要な内容を紹介する。

化学教育において実験が重要な役割を果たすことはよく知られているが、このシンポジウムでも演示実験や生徒（学生）実験についてのさまざまな新しい創意や考案が、ビデオ放映や実験の実施をも交えて報告され、出席者の注目を集めた。これらはすべて日本からの報告であり、この方面における先生方の努力と熱意のほどがうかがわれる。

高校生に実際に化学を教える場合には、学問的な厳密さを犠牲にすることも必要になるであろう。しかし、高校の化学教育において学問的厳密性と教育的配慮をどの程度調和させるべきであろうか。この点について、いくつかの具体的な例をあげて論議され、問題提起された。また、演劇、音楽、ジャーナリズムなどを主専攻とする学生に一般化学を学習させるに当たって、学生の自主性をできるだけ尊重し、専門を生かしたカリキュラムによって実施した興味深い経験が報告された。

ビデオテープやコンピュータを化学教育に利用するいろいろの新しい試みや新しい作品が紹介された。この方面の開発については、教官と専門技術者の間の緊密な連絡と協議が不可欠と思われるが、アメリカではとくに活発に進められているようである。アメリカではまた、小、中、高校の科学教育の見直しが熱心に行われているが、National Science Foundation の支援を受けて1988年と89年の夏に行われた高校化学教官の研修計画について報告された。これは、将来、中心的役割を担う教官を選んで特別の研修プログラムを計画し、受講した教官はそれぞれの地域にもどって核となって活動すると言うものである。

北米と南米にわたる地域で化学教育関係のニュースレター"Pan-American Newsletter in Chemical Education" を刊行する計画が進行中であるが、現在までの経過が報告され、その問題点について説明された。

シンポジウム会場は小さい部屋であったが、いつもほぼ満席の状態で、講演者と出席者の間で活発な、そして率直な意見が交換され、終始なごやかな、まとまりの良いシンポジウムであった。

06－H SYMPOSIUM ON PROGRESS IN MATHEMATICAL MODELLING IN CHEMISTRY

（お茶大理）細矢　治夫

標記のような一風変わった名前のシンポジウムを開くのは少々冒険だと思ったが、一か八かでエイッと名乗りをあげてしまったのが87年の４月。当初は３つ位のセッションでもかなりしんどいと覚悟をしていた。そこで、以前からMathematical Chemistryの分野で一緒にワイワイやっていたアメリカのRandicとカナダのMezey に助けを頼んだところ、両名とも大賛成をしてくれた。しかし、Mathematical Modellingと大上段に振りかぶるほど広い範囲にわたる講演者の目当てはその時は持っていなかった。それでもとにかく舟は港を離れた。

自分としては物理化学の部門に入るつもりでいたところ、アメリカの相棒がＡＣＳのＰＨＹＳとはどうしても折合いが悪くていやだとごねるので、藤原　譲氏のＩＮＦＯ(Information Transfer)のお世話になることとした。その中にだんだんと専門の近いところでの計画の情報が入り出したので、内野正弘氏にアドバイスを受けながらこちらの案をかためて行った。

最終的には、ＩＮＦＯの方には、われらの０６－Ｈの他に、大沢映二氏の０６－ＪのAdvances in Computational Chemistry が、ＰＨＹＳに野村浩康氏のDynamic and Structural Aspects of Liquids and Solutions （０９－Ｂ）と、大野公男氏のQuantum Chemistry: Rethinking Conventional Chemical Concenpts in the Light of Modern Theoretical Results（０９－Ｅ）が入って、この４つのシンポジウムが適当にからみ合いながら進行することになったのであるが、何人かの有力な招待講演予定者が、先にツバをつけられた方に抜かれてしまい、少々慌てたこともあった。しかし、大沢氏は、御自分の０６－Ｊの方はオーガナイザーに徹して、こちらのセッションでの講演を引き受けて下さり大変有り難かった。

それに比べて私自身の方は、０６－Ｈと０９－Ｅの両方に顔を出すというあつかましさ。そういうダブリが日・米・加で１人ずついたので、Indiana 大のDavidsonと連絡をとり、少なくともプログラム上はうまく行った。実際には後で述べるようなおかしなトラブルが出てしまったのだが。なおＰＡＣＩＦＩＣＨＥＭの準備のための通信に、国際ＦＡＸとＢＩＴＮＥＴが大変役に立った。お茶大では89年の春からＢＩＴＮＥＴが使えるようになっている。

そうは言っても、36人の招待講演者を人選し、５つのセッションに割りふるためには、メールのやりとりだけではなかなかうまく行かない。幸い88年夏にアリゾナ州立大に客員教授で呼ばれて行ったときに、向こうの相棒に合って一回目の調整を行い、同年９月末にロサンゼルスのＡＣＳの年会、更には89年３月テキサスのガルベストンの数理化学の国際会議で最終的な詰めをやることができたので、ここまではまことに順調であった。

ところがＡＣＳの方でプログラムを確定した89年の夏を過ぎてから頭の痛くなる手紙が次々と入ってきた。招待されたのに、これこれの事情で行けなくなったというのが少なくとも３人。旅費が足りないので来れないかもしれないという脅し。大沢氏と田辺和俊氏の御世話で日本化学プログラム機構（ＪＣＰＥ）から戴いた補助金や、何枚かの割り当てで来た参加登録料免除のクーポン券が欲しいというせびり。その中には米国の大企業の研究所に籍を置く有名人も入っているのは驚きだった。一方日本の会社もケチだった。

このような事情でハワイに着くまでは実に暗～い気持ちだった。しかし来るべき人は皆そろっていた。金をせびった男も、既に手紙で一発張ったのが効いたのかニコニコ顔。４人の

"didn't show up"組は全てプログラムの最初か最後に割当てられた者だったという幸運。会場は適当に狭かったためか、予想以上の満員という盛況。討論も活発。CASH BAR形式の夜のフリートーキングの会もどうやら成功。参加者一同かなり満足し、感謝してくれたのでやっと苦労のしがいがあったと思っている。

ただ一つのトラブルとはこうだ。０９－ＥのDavidsonは、ＩＢＭとＧＥからかなりの金をせしめたらしい。招待講演者と同伴を含め60人近くを貸切バスでルアウパーティに招待してくれただけでなく、会期中その会場だけコーヒーサービスした。たまたま私の０６－Ｈの隣りの部屋だったので、われらの仲間がそのいわれを知らずに毎度の休憩時間に御相伴にあづかり、挙句の果てには、スポンサーの会場でまだ講演が続いている部屋の脇の廊下でワイワイガヤガヤ、かなりのひんしゅくを買ってしまった。責任者の私は、DavidsonにＪＣＰＥからの補助金の中から＿百ドルを送って詫びた。

学問的内容の薄いレポートなので、ここに５つのセッション名を紹介する。Algebra and Enumeration, Geometry, Characterization, Modelling in Chemistry, Modelling in Biochemistry。この他にポスターセッションがあり、私の研究室からの留学生高頓多がStudent poster awardをもらって感激。

最後に、プログラム作成上色々のわがままを受け入れてくれた組織委員会の皆々様、特に日化の井樋田さんに感謝します。

０６－Ｊ SYMPOSIUM ON ADVANCES IN COMPUTATIONAL CHEMISTRY

（北大理）大澤映二

本シンポジウムはPACIFICHEM'89の初日12月18日（月）にシェラトンワイキキホテル２階の展示場奥でポスターセッションが、また終わりの二日間同じくシェラトンワイキキホテル2階のKona roomで口頭発表が行われた。ポスターは8件、口頭発表は19件で、いずれも発表者と参会者の熱意に支えられて盛会裡に終了する事ができた。この場をお借りして、参加者の皆さんおよび裏方を勤めてくれたコオーガナイザーのK. N. Houk (UCLA), M. N. Paddon-Row (University of New South Wales, Australia), J. D. Goddard (University of Guelph, Canada)の3教授に厚く御礼申し上げる。また、日本化学プログラム交換機構及びMerck, Sharp & Dohme社からは貴重な財政援助を頂いたことも申し添えたい。

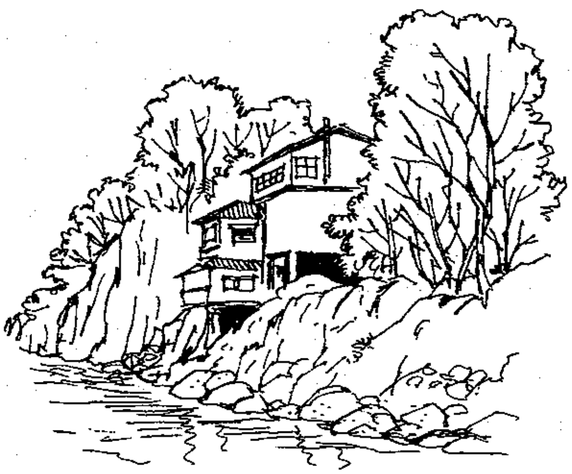
平野恒夫先生（東大工）のご提案に従って、私としては始めてこのような大きな学会でお世話役を勤めさせて頂いたが、一年以上も前から準備を重ね、数々の失敗をプログラム責任者の大滝仁志（分子研）、藤原譲（筑波大）両先生に直して頂きながら、やっと開催にこぎつけたというのが正直なところで、無事に終わってほっとしている。

振り返ってみると、今回の会議全体に言える事だが、出席率がかなり良かった。最終日は流石に帰国する人が多くて出席人数は大幅に減ったが、木曜日まではKona roomはほぼ満席を続けていた。とくにわれわれのシンポジウムの看板の一つであっ

たPople教授の特別講演などは早朝8時というスケジュールにも拘らず超満員となった。5年前の環太平洋会議では日本側は物見遊山、アメリカ側は航空会社のストライキの為に帰りの切符を買うための行列に並んでいて、肝心の会場は数人しかいないところが続出したが、これに比べると今回は順調に経過した。これならば次回も是非このシンポジウムを行おうと、終了後のオーガナイザー反省会で意見が一致した。

われわれのシンポジウム、つまり応用化学理論計算を主題にした討論会は環太平洋化学会議としては始めてである。10年前にはコンピュータ支援創薬(CADD)シンポジウムが行われ、このときは二日間にわたって甚だ盛況であったが、日本側からの発表が皆無であった事を覚えている。今回はCADDシンポジウムは行われなかったが、対象を拡大して本シンポジウムに発展したと解釈すべきであろう。今回の日本側の質の高い発表を聞いていて今昔の感に堪えなかった。

次回の為に気のついた点を書き留めておく。（1）休憩時間を設ける事。2時間講演、15分休憩が適当であろう。（2）懇親会を行う事が望ましい。昼食会、ビュッフェパーティー等、費用さえ工面すればACSとホテル側で準備してくれる。これを実現するには事前の募金が必要である。（3）ポスターと口頭発表の日程が離れないように努力する事。（4）シンポジウムの内容を適当な雑誌(J. Comput. Chem., Struct. Chem., Comp. Chem.等)に特集号として印刷する事が望ましい。



将来展望

「２１世紀の情報化学の重要テーマと実現時期」
アンケート調査結果報告

編集委員会

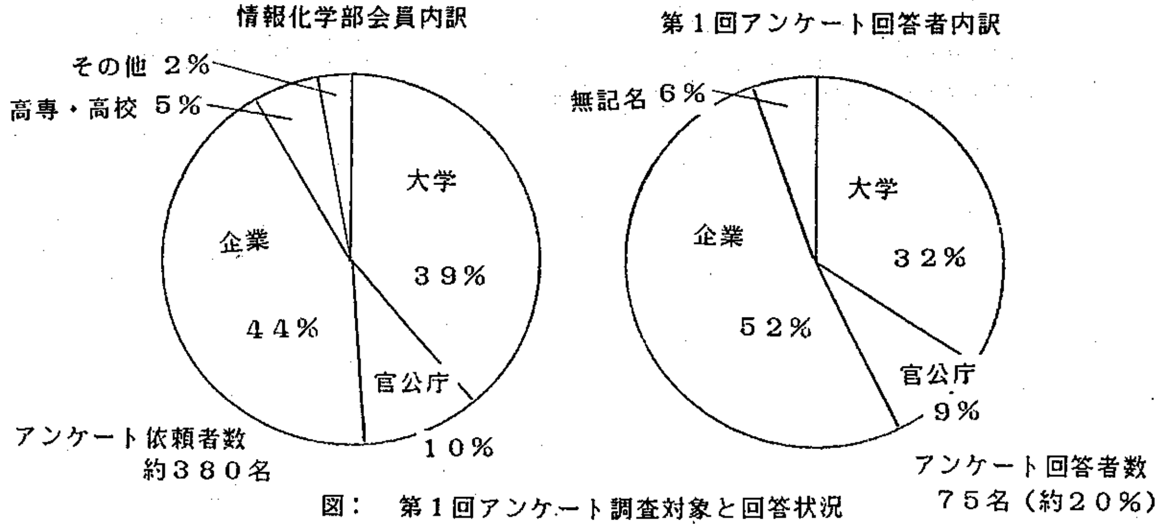
1990年の声を聞き、いよいよ２０世紀最後の10年間に入りました。２１世紀を間近にしたこの時期に、「化学に関する情報、特にコンピュータによる情報処理の化学への応用分野」についてその将来像を探る目的で、昨年10月，11月に実施したデルファイ方式のアンケート調査の結果を報告いたします。

デルファイ法は、最初のアンケートで多数の方々から現在および近未来の重要テーマを掲げて頂き、２回目のアンケートでそれらのテーマの重要度と実現時期を予測して頂く、未来予測の一方法です。一般に、過去には無かった未踏の目標を予測する手法と言われており、専門家のいろいろな意見が集まり、専門家同士の互いの意見交換の参考にもなると言われております。

第１回のテーマ提案のアンケート調査には、７５名（図参照）の方々から総数２８８件（表１参照）のテーマをご提案頂きました。これらの中から、共通性の高いもの、および化学と関係の深いと思われるものを選択させて頂き、第２回目のアンケート調査の対象テーマといたしました。

下図に示したようにテーマ提案をしていただいた方々は、部会員の所属内訳の比率にほぼ一致していますが、やや企業に所属している方々からの回答が多かった結果を示しており、企業側の情報化学分野への関心度の高さを示しています。

一方、表１からも分かるように、テーマの内容を化学の分野別に分類しますとかなり偏りが見られ、提案件数の少ない分野は一部は類似の分野に統合させていただきましたが、２回目のアンケート対象にならなかった分野も出来てしまいました。分野の分類設定にも再考の余地があったかと反省いたしております。



図：　第１回アンケート調査対象と回答状況

表１：　第１回アンケートによる分野別提案テーマ数

分　野	ﾃｰﾏ数	分　野	ﾃｰﾏ数
1　物理化学	２２	11　配位化合物	０
2　分析化学	２５	12　触媒化学	８
3　地球・環境化学	１０	13　半導体・ｴﾚｸﾄﾛﾆｸｽ	７
4　生物化学	２３	14　金属・合金	０
5　医農薬品	２５	15　セラミックス	１
6　有機化学	３３	16　資源・ｴﾈﾙｷﾞｰ	５
7　高分子化学	１８	17　化学教育	１３
8　分子集合体	８	18　ＬＡ・ＦＡ化	１２
9　複合材料	１	19　化学ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ	３２
10　無機化学	１	20　ｺﾝﾋﾟｭｰﾀ・情報通信	３９
		21　その他	５
		総計	２８８

第２回の重要度・実現時期のアンケート調査には１４４件の回答を寄せて頂き関心の高まったことを感じました。ご協力下さいました会員の皆様には御礼申しあげます。回答の中には、情報化学の将来に関して貴重なご意見を添えて頂いた方やテーマの守備範囲へのご意見など多数頂きましたが紙面の都合上、ご紹介は省略させていただきます。

なお、アンケート用紙に数カ所の誤植があり、（例：No.1302　”個人”を”他人”と誤植など）ここにお詫び申しあげます。

アンケート結果（表２参照）は、重要度を１４４件の総回答数の中で回答者が重要テーマと認めた数（いわゆる投票数）で表し、実現時期は投票者の予測した時期の年次分布の両側のそれぞれ１／４をカット、即ち投票者の半分の人の意見による平均年で表してあります。極端に悲観的または楽観的な予測を省いたデータと言えます。

本来であれば重要度を％で表し、実現時期を５角形のグラフで表すところですが、時間の都合上、今回の報告では表２の形にいたしました。次号にて各分野毎に専門家の感想・展望を加えて視覚化を企画しております。

表２：第２回アンケート結果

１．物理化学

整理No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性件/144件	実現時期デルファイ年
0101	分子間相互作用のシミュレーションがリアルタイムでできるようになる。	2000	68	2003
0102	非経験的計算により有機分子の構造や物性が正確に予測できるようになる。	2000	84	2006
0103	分子科学計算、データベース等とレーザ分光、Ｘ線解析等の実験装置がＡＩにより組みあわされた分子特性解析装置が実用化される。	2000	54	2002
0104	１秒間の高分子のダイナミクスが、古典近似の範囲で計算できるようになる。	2010	29	2009
0105	溶液中の色素のUV吸収スペクトルが、高精度で予測できるようになる。	2010	29	2005
0106	物理化学法則体系知識ベースが実用化される。	2010	37	2008
0107	溶液、固相中を問わず、非経験的反応実験のコンピュータシミュレーションが可能となる。	2020	74	2018
0108	純物質の物性値にもとづく混合物の熱物性の工学的推算法が確立される。	2020	31	2013

２．分析化学

整理No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性件/144件	実現時期デルファイ年
0201	試料調整から結果までのデータベース化と意志決定支援を行なう全自動化学ルーチン分析複合システムが稼働する。	2000	32	2001
0202	物質の構造からスペクトルの予測ができるようになる。発光分析、UV、可視、IR、MS、NMR 等	2000	67	2001
0203	有機化合物の構造とスペクトル解析に分子軌道法などの振動解析が組合せられた総合システムが完成する。	2000	51	2001
0204	NMR でタン白の高次構造の解明が、100 アミノ酸程度のものなら容易にできるようになる。	2005	42	2003
0205	有機薬品や無機薬品の完全自動分析装置が開発される。	2020	26	2013

0206	化学実験支援エキスパートシステム、実用的LA機器とそのインターフェイスにより、分析、有機化学の実験現場の完全無人化、遠隔化が実現する。	2000	37	2005
0207	物理化学分析におけるスペクトルデータのデータ・ポイントが統一される。	1995	19	1997
0208	異種スペクトルデータ間に共通ファンクション（部分構造や官能基の分類など）を持つデータベースが構築される。	2000	24	2000
0209	代表的なスペクトルデータの集成完備により化合物の同定が自動化される。	2000	53	2001
0210	種等の物質毎の実際的な分析法のデータベースを作り、分析者同志の通信を可能とし、より正確な分析と分析データの有効利用ができる。	2000	18	2000
0211	重要な物性データ、スペクトルデータが、すべて標準化された形式で、測定者からデータデポジットセンターに送られ、集積される。	2020	54	2014

3．地球・環境化学

整理 No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性 #/144#	実現時期 デルファイ年
0301	炭酸ガスの環境に与える影響がシミュレーションなどでほぼ明らかになる。	1995	41	1997
0302	地球全体としての環境のコントロールをめざし、全地球的な観測網の確立とデータの供給、同時に各地域（例えば１河川）についても同様のデータの累積と利用網が完成させる。	1995～2000	39	2002
0303	温室効果がシミュレーションされ、地球温暖化対策技術が完成される。	2000	43	2004
0304	分子構造式からの環境化学的諸性質（生物濃縮性、土壌汚染性等）の予測が可能となる。	2010	35	2010
0305	物質合成段階で、環境への影響などがコンピュータで評価されるようになる。	2010	31	2010
0306	簡易モニタリングシステムの普及により企業、施設単位の環境浄化が進む。	2010	19	2002
0307	各国のCO_2排出量をリアルタイムに測定し、年間目標達成をコントロールするようになる。	2020	22	2016
0308	地球レベルのコンピュータ・ネットワークにより海底、オゾン層、酸性雨、などの各種データが、リアルタイムに収集され、分析・予測が行なわれるようになる。	2100	44	2038

4．生物化学

整理No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性件/144件	実現時期デルファイ年
0401	脳内伝達物質間の関係が明らかにされる。	1995	45	2001
0402	タンパク質の3次構造が1次構造より計算予測される様になる。	1995	52	2000
0403	タンパク質の結晶構造解析が短時間で可能になる。	2010	46	2006
0404	代謝モデルのコンピュータシミュレーターが完成される（経口毒性の人体実験の代用装置）。	2010	38	2015
0405	マクロファージの機能や抗原抗体反応機構が解明され、生体内の反応がシミュレーションできるようになる。	2010	31	2015
0406	人のDNA の完全決定と、そのデータベース化に成功する	2020	56	2020
0407	タンパク質高次構造予測技術が確立される。	2000	32	2002
0408	DNA の高次構造からその生体機能を予測する技術が確立される。	2010	37	2016
0409	数値計算と人工知能との組み合わせで、蛋白の4次構造がコンピュータで予測可能となる。	1995	28	2001

5．医農薬品

整理No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性件/144件	実現時期デルファイ年
0501	細胞分化誘導の作用機構がコンピュータシステム（分子力学、分子軌道法、分子動力学等）により解明される。	1995	19	2004
0502	たいていの薬物分子がab initio MOで計算できるようになる。	1995	41	1999
0503	薬物分子と受容体の相互作用を、ホログラフィを用いた三次元グラフィックスで見ることができるようになる。	1995	33	1996
0504	レセプターの構造と膜との相互作用が解明される。	2000	39	2001
0505	レセプターの構造が判明し、それを基にドラッグデザインが日常的に実施される。	?	32	2017
0506	医薬品の設計のためのエキスパートシステムができる。	2010	31	2007
0507	知識ベース・パターン認識・量子化学計算の結合による薬物の生体内代謝予測システムが実用化される。	2020	32	2017
0508	蛋白（酵素）の一次構造から最適な薬物が（分子科学計算やデータベース、人工知能システムで）設計できるようになっている。	2020	34	2021
0509	化学構造式より医・農薬としての効能や毒性を推定できるようになる。	2020	53	2017

6．有機化学

整理No.	テーマ	提案者の予測年	重要性 件/144件	実現時期 デルファイ年
0601	化学反応のデータベースの利用により、有機合成実験の合理化・効率化が可能になる。	１９９５	５６	１９９６
0602	合成したい目的化合物とその原料化合物の構造式を指定すれば文献データベースから合成経路が選び出される。	１９９５	５５	１９９６
0603	有機合成設計と反応予測システムが、融合し実用化される。	２０００	４７	２００１
0604	有機合成知識の体系化により、コンピュータで最適経路の設計ができる。	２０００	６５	２００１
0605	コンピュータによる合成ルートをもとに化合物合成の工程が自動化される。	２００５	３４	２００９
0606	合成経路や最適条件は自動的に決定され、新化合物を研究者が自由に造れるようになる。	２０２０	３５	２０２３
0607	非線形現象のシミュレーション法が確立され、有機非線形材料の設計が可能になっている。	１９９５	３０	１９９９
0608	希望する物理・化学的性質を指定するとそれに合う候補構造式が出力される。	２０００	５６	２００６
0609	分子動力学で行なわれている分子状態の時間変化による計算が分子軌道法でも可能になり、共鳴現象や光反応などのシミュレーションがフェムト秒オーダーで実現する	２０００	２４	２００５
0610	分子量300 程度の通常の有機分子についてのab initio 計算は、ワークステーションなどで１時間程度で実行できるようになる。	２０００	５３	２０００
0611	分子構造を入力すると物性や安定性を推測し、毒性なども判定するシステムができる。	２０２０	４３	２０１７

7．高分子化学

整理No.	テーマ	提案者の予測年	重要性 件/144件	実現時期 デルファイ年
0701	高分子の物性データベースが整備され、求める機能を発現する高分子設計支援システムが実用化する。	１９９５	４８	１９９８
0702	有機高分子の三次元構造のモデル化が出来、架橋構造や網目構造などの立体安定化エネルギーや表面エネルギーのグラフィックスが出来る。	１９９７	２６	１９９９
0703	ポリマー物性が分子論的アプローチにより予測できる様になる。	１９９８	４３	２００１
0704	高分子アロイのコンピュータ設計が可能になる。	２０００	１８	２００２

0705	エキスパートシステムによる、高分子化合物の構造特性推定システムが普及する。	2001	27	2001
0706	モルフォロジーを数量的に取り扱う理論が飛躍的に進歩する。	2020	11	2014
0707	高分子固体物性（弾性率・強度など）が分子構造から予測できる様になる。	2020	28	2013

8．分子集合体

整理No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性 件/144件	実現時期 デルファイ年
0801	分子軌道法による分子間相互作用の計算が可能となり、溶媒和を考慮した（電荷移動錯体、会合体、ミセル、LB膜などの）計算ができる。	2000	56	2004
0802	巨大分子系や分子集合体の系に分子軌道計算と分子力場計算の総合システム（Quantum Dynamics）が実用化される。）	2000	42	2006
0803	有機結晶および有機分子集合体の構造を非経験的に予測できるようになる。	2010	43	2009
0804	分子集合体の設計指針が確立され、コンピュータプログラム化される。	2010	18	2011
0805	指定した機能を持つ化合物および複数の機能を組み合わせた材料の設計がコンピュータを利用して行われる。	2010	37	2014

12．触媒化学

整理No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性 件/144件	実現時期 デルファイ年
1201	触媒データベースの完成により性能予測技術が確立される。	1995	36	1998
1202	不均一系触媒が解析され、予測できるようになる。	2020	22	2018
1203	触媒反応や電極反応等の表面反応が、設計できるようになる。	2020	30	2018
1204	酵素反応、触媒反応などの分野で、リアルタイム・シミュレーションが行われるようになる。	2020	29	2017

13．半導体・エレクトロニクス

整理No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性 件/144件	実現時期 デルファイ年
1301	書替え可能光メモリーの実用化が行なわれる。	1990	38	1991
1302	画像データを含め個人の全健康、病歴、臓器ドナーなどの記録が1枚のICカードに収納され一般に使用される。	1995	34	1996
1303	分子素子、バイオ素子が開発され、それを用いた計算機が製作される。	2010～2020	46	2020

17．化学教育

整理No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性 件/144件	実現時期 デルファイ年
1701	化学教育のCAI が発達する。	2000	25	1998
1702	ニューメディアを利用した、視覚による教育が可能になる。	2005	34	2000
1703	情報処理実習が化学関連学部・学科で必須科目となる。	1995	48	1995
1704	コンピュータの過度の使用で実験への理解が観念的になったことへの反省で本当に実験するというカリキュラムに戻る。	1995	33	1997

18．LA・FA化

整理No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性 件/144件	実現時期 デルファイ年
1801	化学実験の単位操作化がすすみ、ビーカーやシュレンクなどが姿を消し、実験をプログラムでできるようになる	1995	15	2000
1802	実験装置のインターフェイスが統一され、かつ1台のコンピュータで全ての装置を制御できるようになる。	1995	26	1998
1803	実時間反応シミュレーションによる反応制御ができるようになる。	2000	21	2000
1804	人工知能をもった計測機器があたりまえになる。	2000	35	2002
1805	汎用化学実験ロボットが開発される。	2020	34	2016

19. 化学データベース

整理No.	テーマ	提案者の予測年	重要性 #/144#	実現時期デルファイ年
1901	物質の熱物性、相平衡、溶解性などの基礎的データベースがポケットコンピュータレベルで構築される。	1995	21	1997
1902	化学構造式の手書きスケッチをデータベースへ入力するシステムが実用化される。	1995	32	1995
1903	ファクトデータベースの構築手段が自動化される。	1995	20	1997
1904	化学雑誌はほとんど電子メディアに変わり、常にオンラインで入手できる。	1995	52	1999
1905	文献データベースの中から化学知識を引き出す検索インターフェイスの改善がほぼ完了する。	1995	39	1997
1906	食品中に含まれる天然成分の安全性に関するデータベースが完成する。	1995	16	1997
1907	各種の化学データが統一的に管理でき、一元化されたデータベースとして公開・利用できる。	2000	53	2001
1908	複合材料を含む、物質のマクロ構造データベースが実現する。	2000	18	2003
1909	コンピュータによる化学物質表現法の標準化が整う。	2000	38	2001
1910	コンピュータに入力された論文から、重要な文章、キーワード、物質名が自動的に抽出され、標準形式でデータベースに収められるる。	2000	40	1999
1911	各種の物性データベースの国際的相互利用について、世界共通のルールが確立される。	2000	37	2000
1912	AI機能をもった材料設計とデータベースをもった合成設計の総合システムが完成し、材料開発の自動化が可能になる。	2010	22	2013
1913	CAS 文献全体に相当する内容の知識ベース化とnavigation（検索操作）Systemが完成する。	2100	24	2035

20．コンピュータ・情報通信

整理No.	テ　ー　マ	提案者の予測年	重要性件/144件	実現時期デルファイ年
2001	論文、特許などのコンピュータ支援翻訳システムが実用化される。	１９９５	５８	１９９７
2002	海外や官民の研究機関がネットワーク化され、情報伝達、画像情報を含むデータなどの共用が行われるようになる。	２０００	３８	２０００
2003	現在のスーパーコンピュータの能力＋３次元グラフィック機能をもつパソコンが普及する。	２００１	６５	２００３
2004	論文誌のオンライン投稿やオンライン出版が普及する。	２０００	６１	１９９９
2005	革新的な計算システム／アルゴリズムの発見／開発が行われ、化学における数値計算法が刷新される。	２０００	３０	２００５
2006	ヒトの知能とほぼ同等のエキスパートシステムが完成する。	２０１０	３６	２０２７
2007	多数のニューラルネットワークを集積したニュータイプの計算機が開発される。	1995～2000	３３	２００２

関連行事

パソコンによるコンピュータケミストリー入門講習会

一実用プログラムをNEC PC9801RA2で実習一

共催　日本化学会情報化学部会，日本化学プログラム交換機構，CBI研究会，先端科学技術・情報教育センター

日時　2月19日(月)(第1回目)より7月23日(月)まで6回
10時30分～17時15分

会場　パソコンステーション上野(東京都台東区上野7-1
JR上野駅浅草口，電話(03)847-2270)

参加申込締切　定員(40名)になり次第

第1回目　(2月19日)　分子力学(京大工)今城文雄

第2回目　(3月26日)　分子動力学(北大理)河村雄行

第3回目　(4月21日)　量子化学入門(埼玉大工)時田澄男

第4回目　(5月21日)　経験的MO法(兵庫教育大)木原　寛

第5回目　(6月25日)　半経験的MO法(長岡技科大)内田　希

第6回目　(7月23日)　非経験的MO法(分子研)北浦和夫

参加費(テキスト，フロッピーディスクを含む)　主催団体会員165,000円，協賛団体会員270,000円，大学・官公庁220,000円，その他285,000円。学生会員2,000円(1回)。

参加申込方法　所定の申込用紙を下記へ請求下さい。

申込先　101 東京都千代田区神田淡路町1-3-2 廣屋ビル9階　先端科学技術・情報教育センター　担当　岡　すみれ（電話(03)255-8735，FAX(03)254-8040）

Schleyer博士及びStewart博士による
計算化学講演会

主催　日本化学プログラム交換機構（JCPE）

共催　日本化学会情報化学部会，CBI研究会

場　所　東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷7-3-1，地下鉄本郷3丁目又は根津下車徒歩10分，電話(03)812-2111，内線2334）

Paul von Schleyer博士講演会（3月26日(月)）

14時 ゴーシュ効果に関するab initio計算（東大工）平野恒夫

15時 計算化学の最近の進歩（Erlangen大学）P.von Schleyer

James J. P. Stewart博士講演会（4月13日(金)）

14時 配座空間探索について（北大理）大沢映二

15時 半経験的分子軌道プログラムパッケージMOPACの現状と展望（J.Seiler研究所）J.J.P.Stewart

参加費　無料

Schleyer博士（西独Erlangen大学有機化学研究所教授）は計算化学生みの親の一人で余りにも有名です。最近ドイツ化学会からフィッシャーメダルを、またアメリカ化学会からも物理有機化学賞を受けました。Stewart博士（米国J.Seiler研究所主任研究員）はテキサス大学のDewar教授と共にMOPACを開発、最近では著書「MOPAC」を出版し、MNDOの改良版PM3を発表するなど活躍しています。JCPEでは両博士の来日を機会に上記のような講演会を企画しました。多数の方の参加を歓迎します。

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（電話(0298)54-4522）

第4回化学PCソフトウェア研究討論会を終えて

11月10日（金）と11日（土）の二日間にわたり，第４回化学ＰＣソフトウェア研究討論会（化学ＰＣ研究会主催，埜村守実行委員長）が，福井工業高等専門学校の視聴覚ホールにおいて開催された。参加人員は約170名であり，特別講演１件のほか，一般発表36件があり，ソフトのデモンストレーション＆ポスターの発表が，それぞれのセッションで活発に行われた。一般発表の進め方は，前回同様参加者一堂に会して約１時間の口頭発表（五分間スピーチ）のあと，１時間半のデモンストレーション＆ポスター・セッションをとった。デモ会場にはパソコン20台を設備し，各所にポスター掲示用のパネル板を設置した。参加者は化学ソフトのデモンストレーションを十分に堪能し，マンツーマン討論に花を咲かせていたようである。本討論会では，無償利用ソフトにおいて化学ソフトウェア研究に貢献した者から２名を表彰した。学術賞には分子グラフィックスで中野英彦氏が，技術賞では，分子体積・表面積で長尾輝夫氏が受賞した。

討論会の開催は，本会主催の催しであっても第１回目から事業独立採算制を採っている。そのような事情もあって開催・実行委員会のご苦労は計り知れないものがあった。埜村守実行委員長を始め，佐々木与志実委員，佐藤信孝委員，および榊原三樹男委員にはたいへんお世話になり感謝している。今回使用したパソコンは，後援していただいた日本電気からの借用によるもので，この寛大な協力にたいへん感謝している。特に，日本電気の本橋正美嬢の献身的な助力には深謝している。そして，苛酷な運転をしたにも拘らず，１台もトラブルことなく，化学ソフトのデモンストレーションとマンツーマン討論ができた。関係者には，重ねて感謝申し上げたい。

会社からの協賛は，今回展示は３社で，広告６社であった。学会の共催は，日本化学会，日本化学会情報化学部会，日本分析化学会中部支部，日本科学教育学会，日本教育工学会，化学工学会，日本農芸化学会，日本薬学会近畿支部，ＣＡＩ学会，日本ポーラログラフ学会である。関係各位に対して深謝している。後援は，日本電気㈱と福井県教育委員会であった。

第１日目の一般発表後に，特別講演が行われた。それは，「メモリボードの変遷と周辺ボードによりシステム化」と題して細野昭雄先生（㈱Ｉ・Ｏデータ機器 代表取締役）によって行われた。先生によって開発されたメモリボードの変遷すなわち日本におけるＲＡＭボードの歴史を話され，討論に花を添えた。特別講演の後，当会場内食堂にて懇親会が行なわれた。参加人員は56名であった。第２日目の一般発表後に，先に記述した無償利用ソフトにおける表彰式と受賞講演２件が行われた。

今回の討論会のプログラムは締切日を守ったため，共催の学会等への会誌発表ができた。参加しなかった方で本討論会での発表に興味を持たれた方は，発表要旨集の残部が多少ありますので，本会事務局あて葉書でご注文ください。　有料（送料込みで1250円，後払い）で配布します。

このようなデモンストレーション中心の研究討論会を開いてほしいという要請が多く，本研究討論会は学界の中で定着した感がある。次年度（1990年秋）は，関東のお茶の水女子大学（世話人：藤枝修子先生，実行委員長：細矢治夫先生）で第５回研究討論会を開催する予定である。

（事務局　吉村　忠与志）

コンピューターケミストリーシステム一覧

(平成元年11月現在)

※この表は平成元年11月10日（金）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	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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ス、理論計算までの統合型分子設計支援システム	ACOS－4系	6,500万円	85年12月	
BIOCES	〃	日本電気、住友化学工業、キッセイ薬品工業など	未知たん白質のモデリングと、ACACSと連動した薬物－受容体の相関研究が可能	〃	2,000万円	86年10月	
BIOCES(E)	〃	〃	薬物－受容体理論にもとづくたん白工学と医農薬設計のコンピューター支援システム。EWS4800シリーズと3次元グラフィックス端末(PS390)をイーサネット接続し、安価なシステムを構築可能	EWS4800シリーズ＋PS390(E&S社)	1,600万円(ソフトのみ)	89年2月	
micro-RESEARCHER	〃	日本電気	実験データの管理、加工、技術から研究レポート作成まで一貫処理する	EWS4800シリーズ PC－9801シリーズ N5200シリーズ	150万円 35万円 35万円	86年9月 86年7月 85年4月	約700本
ANCHOR	富士通	富士通、呉羽化学工業	理論化学計算をベースにした分子設計支援システム	FACOMVP,M.Aシリーズ，Sファミリ	800万～	86年6月	
MACCSII	〃	米モレキュラーデザイン	分子情報データベースシステム		2,900万円 2,500万円～	89年10月 83年11月	
REACCS	〃	〃	反応情報データベースシステム		1,600万円～	85年5月	
ADAPT	〃	〃	構造活性相関QSAR	〃	840万円～	86年7月	
CHEMTERM/MM-MO	〃	富士通	ANCHORの機能をパソコンに凝縮した分子設計支援システムの入門ソフト	FMR－60、70	30万円	89年11月	
G'term/FM	〃	富士通ビーエスシー	パソコンをANCHOR、MACCSなどの端末として利用するエミュレーションソフト	FMR-30,50,60,70	25万円	89年10月	
MOLBESS-F	富士通、富士ファコム制御	富士通、富士ファコム制御	分子生物学実験支援システム、DNA情報の解析や遺伝子組換実験のシミュレーション	FMR-60,70	180万円	89年11月	
MODELMATE	日立製作所	日立製作所、クラレ	汎用型分子設計支援システム。高度なデータベースを利用してあらゆる材料設計に対応。低価格EWS版との組み合わせなど独自性に富むシステムの構築も可能	HITAC Sシリーズ M－640以上のMシリーズ2050G、2050/32ワークステーション	約2,000万円～(ホスト型)、800万円(EWS型)	89年6月	10システム
MolWorld	日本アイ・ビー・エム	日本アイ・ビー・エム	3次元分子構造作成プログラム。化学式などの入力で立体構造を自動生成し、ディスプレー上で分子モデルの操作・加工できる	PS/55シリーズ	8万円	87年11月	
MDSS	〃	〃	分子の立体構造を中心とした化合物情報を効率よく生成・解析・管理する分子設計支援システム	IBM3090,308X,438X,9370シリーズ	2,780万円	85年11月	
MOL-GRAPH	ダイキン工業	ダイキン工業	低分子、素材、合成高分子、生体高分子解析にパッケージ化したシステムを提供。エントリーから総合的な解析までニーズ別に選択可能	COMTEC4Dシリーズ、IRIS-4D/GTシリーズ、VAXシリーズ、FACOM、IBM、HITACの汎用コンピューター	700万円～	87年7月	
INTERMOL	分子	分子	分子軌道法、分子力場法および分子動力学法を背景としたエンジニアリングワークステーションを用いた分子設計支援システム。酵素阻害剤、プロテイン、非線形物質などの設計に最適。対話型3次元グラフィックスによるソリッドモデリングのリアルタイム操作を実現	SUN－3、SUN－4、YHP9000シリーズ、DG、PRIME、VAX	600万－2,000万円	87年7月	
CHEM－X	理経	英ケミカルデザイン	有機低分子から生体高分子、ポリマー等まで対応出来る汎用型分子設計支援システム。扱い可能な原子、分子、ボンドの数に制限がなく、各種エネルギー計算と表示機能に優れる	VAXシリーズ、PS300、MAC	1,100万円～	86年3月	
BIOGRAF	〃	米バイオデザイン	生体高分子を主とし、分子動力学計算による分子設計支援システム。たん白の一部や核酸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非常に便利	VAXシリーズ、SUN－3,4、ALLIANT FXシリーズ、IRIS 4D/GT	750万円～	86年2月	
POLYGRAF	〃	〃	ポリマー、アモルファス、結晶性物質等の合成高分子設計支援システム。分子動力学計算及び計算結果のアニメーション解析も可能	〃	750万円～		
CONCORD	〃	米エバンス&サザランド	スマイル表記法で記述された化学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で、精度も高い	VAXシリーズ	400万円～	88年4月	
ALCHEMY	〃	米トリポス	パソコン用分子設計支援システム	IBM－PC/AT	20万円～	88年	

MACCS−II	シーティーシー・ラボラトリーシステムズ	米モレキュラーデザイン	統合化合物情報管理システム	ホスト…VAXおよびIBM ディスプレー…テクトロニクス、PC−9801	2,200万円～ソフト価格で大幅に異なる	85年7月	
REACCS	〃	〃	反応情報データベース管理システム				
CHEMLAB−II	〃	〃	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				
ADAPT	〃	〃	構造活性解析システム。自動的に三次元配座計算。パターン認識によるQSAR				
CHEMBASE	〃	〃	パソコン用化合物及び反応情報データ管理システム	IBM PC及び互換機	100万円	88年10月	
CHEMTEXT	〃	〃	パソコン用化学研究用ワープロソフト	〃	40万円	〃	
CHEMTALK	〃	〃	パソコン用MACCS、REACCSなどの端末エミュレーション	〃	27万円	〃	
IGSUITE	〃	米インテリジェネティック	遺伝子情報解析システム。ワークステーションはミニコンベースの高機能が特徴	VAXシリーズ、SUNシリーズ	約1,200万円～(ソフト価格)	85年1月	
RS/1	〃	米BBN	研究実験データの管理、解析システム	〃		86年4月	
CHARMM	〃	米ポリジェン	分子動力学法を用いたたん白用分子設計支援システム	IRISシリーズ、クレイ、ステラ、コンベックス	2,600万円～(ハード含むシステム価格)	87年3月	
X-PLOR	〃	〃	結晶構造解析支援システム	〃		88年2月	
QUANTA	〃	〃	三次元表示グラフィックソフト	IRISシリーズ、ステラシリーズ		87年3月	
BIOGRAF	クボタコンピュータ	米バイオデザイン	低分子、たん白、DNA、炭水化物、脂質について専用ビルダーを持つ表示&解析一体型の分子設計システム。グラフィックスーパーコンピューターTITANとの組み合わせで、計算&表示のリアルタイムなシミュレーション環境を提供する。その他各種データベース、QCPEプログラムへのインターフェイスを完備	TITAN	3,000万円(ハード含む)	88年9月	
POLYGRAF	〃	〃	ポリマー専用ビルダー(アモルファス、スターバースト、ブロック状ポリマー等)を備えた表示&解析一体型の分子設計システム。その他周期境界条件を用いた解析、一定圧力下での運動シミュレーションが可能			89年4月	
XTALGRAF	〃	〃	超電導・ゼオライト触媒の取り扱い			89年7月	
MolSkop	日本電子	日本電子	2次元NMRデータをもとに、ディスタンスジオメトリーにより、たん白質の立体構造を理論的に解析する。分子構造のグラフィック表示までソフトウエアを統合。NMR装置との接続で、すべてを一貫処理できる	TITAN	6,000万～8,000万円(システム)	90年4月	
SYBYL	三井物産	米トリポス		VAXシリーズ、IRIS4D/GTシリーズ、Sun−4、コンベックス、クレイなど	各 約750万円(2ユーザー限定)より		
Basicモジュール			基本的な分子モデリング、データベース、エネルギー計算等			88年5月	14システム
Advanced Computation モジュール			立体配座解析、量子力学計算、分子動力学計算等			〃	11システム
Biopolymerモジュール			たん白質、核酸等の生体高分子操作			〃	9システム
QSARモジュール			定量的構造活性相関操作			89年2月	3システム
Polymerモジュール			合成ポリマー専用モデリング操作			〃	1システム
NITRO	〃	〃	パソコンをSYBYLの3次元グラフィックス端末として使う通信ソフト	IBM PC/AT、PS2、マッキントッシュII	30万円	88年5月	20システム
ALCHEMYII	〃	〃	パソコン用分子設計支援システム	〃	30万円	88年10月	約50システム
CONCORD	〃	〃	変更スマイル表記法を利用した簡易三次元分子組立システム	VAXシリーズ、IRIS4D/GTシリーズ、Sun−4	約300万円(SYBYLユーザー)、約420万円(非SYBYLユーザー)	88年2月	1システム

DISCOVER	三菱商事、菱化システム	米バイオシム	分子エネルギー極小化、ダイナミックス手法を用いた分子設計シミュレーションプログラム。コンソーシアムで力場パラメータを吟味	IRIS、VAX、CRAY、CONVEX、ALLIANT、IBM	1,600万~2,300万円（INSIGHTとセット）	87年9月	
Delphi	〃	〃	生体高分子の内部及び周辺外部の静電ポテンシャルの計算プログラム。分子・溶媒のイオン強度、誘電率を考慮した計算が可能	IRIS、VAX、CONVEX、CRAY	未定	89年4月	
Dmol	〃	〃	局所密度汎関数法によるab−initio分子軌道法プログラム。50から100原子程度までの分子の諸性質を計算によって得られる	CRAY、IRIS、SUN、VAX	1,000万~2,000万円	89年3月	
INSIGHT	〃	〃	生体高分子から一般有機分子を対象とする分子設計用3次元グラフィックスプログラム。分子の構築、表示、解析のための機能を提供	IRIS、VAX	1,600万~2,300万円（DISCOVERとセット）	87年9月	
SYNLIB	長瀬産業	米ディストリービューテッド・ケミカルグラフィックス	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。60,000件の反応を収録	VAXシリーズ	1,400万円	87年	約10システム
CHEMICS	〃	電子科学テクノシステム	NMR、IR等のデータや研究者の知識を入力することにより、化合物の化学構造を推定するシステム	VAXシリーズ、IBM PS/55(OS/2)SUN等		89年	
SPARTAN	センチュリリサーチセンター	カリフォルニア大学アーバイン校、イリノイ州立大学	非経験的分子軌道法GAUSSIAN85のグレードアップ版。化学者が手元で活用できるよう、対話型のデータ入力環境と計算結果のグラフィック表示機能を備えた。マッキントッシュ版は現在プリ処理のみ対応	マッキントッシュ IRIS−4D	30万円 250万円	90年1月 90年1月	
TEO/CHEMICAL	日本データゼネラル、長瀬産業	豊橋技術科学大学	リードゼ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	950万円~(ハード含む)	88年4月	
P/COMPOSITE	サイバネットシステム	米PDAエンジニアリング	三次元複合材の材料と構造の詳細な定義、温度依存性を持つ複合材構造特性の線形、非線形解析、各層ごとの破壊評価を行う有限要素法プログラム	APOLLO、CRAY、VAX IBM、SUN等	360万円~(年間ライセンス料)	87年	
SAVVY/FT−IR	日軽情報システム	米エクスカリバー・テクノロジー	ニューラルネットを応用し、赤外線スペクトルのデータベースから未知試料の類似スペクトルを高速に検索する。スピードは10,000件データから約10秒	VAX/VMSシリーズ	約500万円	88年8月	
MOL-GRAPH	旭テクノコンピュータ	ダイキン工業	低分子、素材、合成高分子、生体高分子解析にパッケージ化したシステムを提供。エントリーから総合的解析までニーズ別に選択可能	アサヒステラ GS1000/2000	700万円	89年10月	
SPARTAN	〃	カリフォルニア大学アーバイン校、イリノイ州立大学	非経験的分子軌道法GAUSSIAN85のグレードアップ版。化学者が手元で活用できるよう、対話型のデータ入力環境と計算結果のグラフィック表示機能を備えた	〃 その他ベクトルコンピューター	300万円	89年末	
PESST	ノヴァ	ノヴァ	たん白質の一次構造を解析することにより、立体構造を知るための手掛かりを様々な情報として提供する。独自アルゴリズムで予測精度が高く、大規模シミュレーションにはスーパーコンも利用可能	アライアントFXシリーズ ソニーNEWS	98万8千~350万円	89年12月	
FRODO	住商電子システム	カリフォルニア大学サンディエゴ校	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	87年	
MMS	〃	〃	汎用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	87年	

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
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から、三次元の分子モデルを作成する	ホスト各機種＋自社製グラフィックディスプレーI、Mシリーズ	60万円	83年	
サイエンスグラフ	ソフトサイエンス	日産化学工業	化学構造式をはじめ、様々な作図ができるグラフィックエディター。マウスをサポート。データフォーマットを公開	PC−9801シリーズ他	7万5千円	85年2月	1,500本
オルガノグラフ	〃	東京薬科大学　小杉義幸	化学反応式を作図するソフト。専門家が特別にデザインしたフォントをもち、高品位の反応式をプリンター出力できる	〃	3万5千円	86年8月	150本
^{13}C-NMR化学シフトカリキュレーター	〃	東京大学　吉田弘	^{13}C−NMRの化学シフトを計算する。入力方式が簡単で使い易い	〃	3万5千円	87年3月	60本
MGP98/EX	〃	北里大学　広野修一	座標入力により、分子構造を3次元表示し、分子表面の静電ポテンシャル分布もカラー表示。EWS用はPDBファイルが読み込める	PC−9801シリーズ他 EWS4800、HP9000、NEWS	9万8千円 未定	86年7月	110本
MGP98/DG	〃	北里大学　広野修一	MGP98/DGは、MM2の出力ファイルから、MGP98/EX用の入力ファイルを作成	PC−9801シリーズ	3万3千円	88年12月	20本
結晶パッキング表示プログラム	〃	ポーランド科学アカデミー	結晶構造における原子のパッキングの状態を単位細胞内の任意の切断面で観察。結晶構造の記述に必要な最小限のデータと原子半径を入力し、切断面を定義する	PC−9801シリーズ他	4万5千円	85年10月	110本
パソコン統計解析	〃	筑波大学　加藤克己 慈恵医大　蘇　俊彦	医学・生物学・化学・薬学などの分野で多用されるプログラム16本を収録	〃	5万円	85年3月	320本
化学マイコン入門	〃	岡山大学　田中善正	統計処理から元素含有率算定、重量分析、吸光光度定量などの応用プログラム28本	〃	5万円	84年12月	100本
薬物速度論入門	〃	京都大学　山岡清、谷川原祐介	薬物濃度の時間変化と体内動態をプロットプログラム、非線型最小二乗、モーメント解析法などに分けて、27本のプログラムで説明	〃	5万円	85年10月	140本
薬物体内動態解析法	〃	京都大学　山岡　清	検量線の定量、反復投与時間のシミュレーション、体内動態パラメーターの推定、薬物の特性分類などプログラム32本収録	〃	7万円	84年4月	280本
MOLDA&GRIMM Ver5.1/5.1J	サイエンスハウス	東京大学　吉田弘ほか	パソコン用分子設計支援システム。1985年以来の高い実績。ディスプレー上で簡単に分子式を組み立て、MM2とのリンクも可能。FMR版も発売	PC−9801シリーズ	5万2千円(Ver5.1)、5万8千円(Ver5.1J)	89年2月	200本
3D-Molmaster	〃	山形大学 阿部昭吉	化学者が使い慣れたZマトリックス座標系を用いて入力。原子数の多い分子向きの分子設計支援システム。MM2とのリンク可能	〃	7万8千円	89年8月	
MODRAST−E	〃	姫路工業大学 中野英彦	上記2種の分子設計支援システムをもとに、高精細な分子グラフィックスを行う。上位システム並みのスペースフィル図表示可能。3次元ソリッドモデラー	〃	5万8千円	87年8月	75本
MODRAST−P	〃	〃	PDBの3次元データを読み込み、たん白質をグラフィック表示する。ソリッドモデラーなので、たん白質を任意断面で切断できる。多彩な表示機能をもつ。PDBを収録した専用データファイル(別売)が提供される	〃	7万8千円	87年11月	20本
PC版MM2	〃	東京大学 吉村伸	パソコン用MM2計算プログラム。MOLDA&GRIMMおよび3D−Molmasterから利用できる	〃	2万8千円(民間)、9千8百円(公共)	86年6月	90本
MOLDA−S	〃	東京大学　吉田弘、サイエンスハウス	簡易版の分子モデリングソフト。高校、高専向け教育用ソフトとして最適	〃	1万8千円	89年6月	
MM2PPキット	東レシステムセンター	東レシステムセンター	大沢映二北大助教授開発のプログラムをベースに、共役π電子系を含む分子も扱えるよう機能を拡張した	PC−9801、FMR、PS/55、IBM、FACOMメインフレーム、VAX	6万円〜 25万円〜 50万円〜	88年7月	
3D−MOL	〃	〃	パソコン用の3次元分子モデリングシステム、MM2PPキット、パソコンMOPAC、他の理論計算プログラムとの組み合わせで、パソコンで本格的な分子設計が可能	PC−9801シリーズ	19万円	88年7月	
パソコンMOPAC	〃	〃	半経験的分子軌道計算プログラムとして世界的に有名なMOPAC(V3.1)を、パソコンに移植したプログラム	PC−9801、FMR、PS/55	9万円	88年10月	
パソコンMOPAC/386	〃	〃	32ビット機対応のパソコンMOPACで現行品に比べ扱える分子数が65へと倍増、処理速度は4倍増	PC-9801 (32ビット機)	19万円	89年11月	

MM2KIT	帝人システムテクノロジー	帝人システムテクノロジー	PC版MM2インターフェース。分子の三次元構造を作成してMM2の入力ファイルに自動変換。パラメータ欠落チェックあり。単独でスペースフィル描画までサポート	PC-9801シリーズ	12万円	86年8月	400本
PC版MM2	〃	原著者 N. L. ALLINGER PC9801移植者 大沢映二	エネルギー極小化過程のアニメーション表示あり。極小化途中の結果をファイルに保管することが可能	〃	3万6千円	88年4月	100本
PPPKIT(機能材料設計支援システム)	〃	帝人システムテクノロジー	PPPMO法インターフェース。構造作成が他ソフトに比較して特に容易。結合距離、結合角の正確な設定が可能。吸収スペクトル、電子密度、分子分極率等を表示。機能材料向け	〃	15万円	89年7月	100本
MATERIA	〃	〃	EWS用の分子設計支援システム。容易な3次元モデリング、MM、MOインターフェース及びエネルギー図、分子軌道図、スペクトル図等豊富な機能を低価格で実現	NEWS YHP9000 SUN	400万円	88年11月	10本
PREMAT/POSTMAT	くいんと	くいんと	複合材などの等価なDマトリックスを算出し、ポスト処理として細部の状態を見ることができる	スーパーコン、汎用機、ミニコン、EWS	400万円～	89年6月	
LABSWARE	フジシステムリソース	ハンガリー・コンピュードラッグ	パソコン上で稼働するCCSソフトウエアシリーズ。有機・無機化学、定量ドラッグデザインなど9分野約56本のソフトで構成される	J-3100シリーズ	78万円	85年4月	
METABOLEXPERT	〃	〃	最新の人工知能技術により特定の化合物がどの様に代謝されるかを予測する。化合物の構造式を入力するのみで代謝物質のリストを出力する	〃 IBM XT/AT、AX	350万円	89年10月	
Pro-logP	〃	〃	最新の人工知能技術により化合物のlogP値-1オクタノール/水系における分配係数の対数-を計算する。医薬品/農薬などの開発、環境汚染の研究に最適	〃	21万円	89年4月	
DRUGIDEA	〃	〃	定量的に行われる分子構造の変換過程を分析するため様々なステップを実行する。ステップにはデータ入力、変換・修正、1変換・多変数統計分析まで含む	〃	20万円	89年4月	
MOLIDEA	〃	〃	分子モデルの作成・表示、分子力学及び量子化学に係わる各種計算などを行う事ができる	〃	24万7千円	89年4月	
MEDUSA	〃	〃	医薬品等の化学品の薬理学的および薬物動態論的挙動を測定及び評価する研究者を支援することができる	〃	20万円		
GDPS98Mini GDPS98 GDPS98pro	日興通信 〃 〃	東京大学 磯景二郎 〃 〃	パソコンを使用して、低分子有機化合物からたん白質・核酸までの立体構造を自由に表示する分子グラフィックソフトウエア。プロテインデータバンク(PDB)の登録座標データ、または同形式のデータをもとに、種々の表示方式で分子の全体、部分、骨格、側鎖、α炭素の流れを自在に彩色、あらゆる方向から観察できる	PC-9801シリーズ 〃 〃	5万8千円 17万円 35万円	89年4月 86年5月 87年11月	
MOL	ミタスタジオ		三次元分子構造表示ソフト	PC-9801シリーズ	5万円		
化学ライブラリー1～13	IBC	IBC		PC-9801シリーズ	1万円		
BIOCHEM	大久保マイコン	大久保マイコン	生化学用ソフト	PC-9801シリーズ	12万8千円		
サーチマック	データマック	データマック	化学情報ファイリングシステム	PC-9801シリーズ	9万8千円		
GENETYX遺伝情報処理ソフトウエア	ソフトウエア開発	ソフトウエア開発	パソコンで核酸配列データ、たん白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、ペプチド・たん白質構造解析	PC-9801シリーズ	38万円	83年1月	1000本
GENETYX-CD	〃	〃	光ディスク装置データベース。核酸、たん白質データベースの利用。		42万円(ハード含む)		約600台
GENETYX-VOICE	〃	〃	核酸、たん白質読み合わせソフト。核酸配列、A・T・G・Cの音声出力。		45万円(ハード含む)		
GENETYX-IN	〃	〃	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像パターンを自動的に核酸塩基情報として入力		48万円(ハード含む)		

GENETYX-PLOT	〃	〃	遺伝情報図形処理。DNA、アミノ酸配列解析で必要なKbp単位の結果を一紙面に出力		30万円(ハード含む)		
GENETYX-ATSQ	〃	〃	DNAシーケンサーや核酸配列入力装置で決定したDNAフラグメントの自動結合・編集が可能		28万円(ハード含む)		
DNASIS	宝酒造、日製産業	日立ソフトウェアエンジニアリング	パソコン用遺伝子入力解析システム。国内はもとより海外でトップクラスの実績	日立B－16EXシリーズ、NEC PC－9801シリーズ、IBM PC/AT、PS2シリーズ	160万円	84年10月	国内450本 海外550本
DNAEDIT	〃	〃	DNAシーケンスデータの編集。簡易な入力方式とデータ確認方法(特許出願中)		10万円		
DNAS	〃	〃	DNAシーケンスデータの解析。カラーグラフィックス表示を用いた豊富な解析ソフト		50万円		
CONNECT	〃	〃	DNAシーケンスデータの連結。ショットガン法によるフラグメントの自動連結を実現		25万円		
REMAP	〃	〃	切断点地図の作成。二重切断法により制限酵素地図を自動作成		25万円		
AMIEDIT	〃	〃	たん白質シーケンスデータの編集。簡易な入力方式とデータ確認方法(特許出願中)		5万円		
PROTES	〃	〃	たん白質シーケンスデータの解析。2次構造の予測など豊富な解析ソフトウエア		45万円		
BIOGRAPH	〃	〃	解析結果の編集。解析結果をマウス1つで自由自在に編集しXYプロッターにカラー出力		18万円	88年8月	
DBREF50	〃	〃	遺伝子データベース検索システム。遺伝子データベースをCD－ROMに格納し、専用アルゴリズムの採用で高速検索を容易に実現	〃	49万5千円	85年10月	国内200台 海外300台
DNASCAN	〃	〃	DNAシーケンスフィルム自動認識装置。フィルムをスキャナー上に置くだけで、自動的に塩基配列の読み取りを実現(特許出願中)	〃	490万円	87年9月	国内10台
PAPERBANK	日立ソフトウェアエンジニアリング、日製産業	〃	文献および実験データ収納検索システム。大量なデータを光ディスクに格納し、目的のデータを簡単に取り出し複写も可能	専用ハードウエア (1)A4入出力タイプ (2)A3入出力タイプ	460万円 647万円	88年1月	25台
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。ホモロジー検索が豊富。7年の実績	PC-9801シリーズ	52万円	82年	約200セット
GRASE	〃	〃	DNA結合編集プログラム。MBショットガン法などのフラグメントを自動結合	〃	25万円	84年	
PRINAS	〃	〃	ペプチド・たん白質一次構造解析ソフトおよびアミノ酸配列データベース	ソフト一式＋データベース	70万円	84年12月	
EKAS	〃	〃	酵素反応解析ソフト。Km、Vmax、Kiなどを決定するためのプロット解析	PC-9801シリーズ	10万円	86年6月	
GEMS	〃	〃	フィジカルマップ作成プログラム。ダブルダイジェスチョン法による計算	〃	8万円	86年1月	
BIODIS	〃	〃	生体高分子の立体表示プログラム。たん白質などの三次元グラフィックス表示	〃	10万円	86年3月	
GENAR	〃	〃	核酸配列入力システム。デジタイザー利用。ライトパネル、音声確認	ソフト一式＋デジタイザー	(A)41万5,500円(B)65万円	84年12月	
GEFRAS	〃	〃	フラグメントサイズ決定プログラム。デジタイザー利用	〃	(A)27万5,500円(B)51万円	86年3月	
MicroGenie	ベックマン	米ベックマン	パソコン用総合遺伝子たん白質情報解析システム。核酸・たん白質のシーケンスに関するデータバンク、またはデータの様々な管理・解析が一つのソフトで可能	IBM PC/AT、PS2、NEC PC－9801シリーズ	78万円	78年7月	

海外動向

化学構造情報フォーマット標準化案について

化学技術研究所　　田辺　和俊

本誌の前号に阿部氏が書かれたように、昨年10月、西ベルリンにおいてスペクトルデータベースに関する日独2国のワークショップが開催された。その際、ミュンヘン工科大学の Gasteiger 教授から、表記のような内容に関する提案があった。その内容は多くの方の関心を呼ぶと思われるので、ここに同教授の許可を得たものを掲載する。

A Standard Exchange Format for Chemical Structure Information

J. Gasteiger
Institute of Organic Chemistry
Technical University of Munich
D-8046 Garching, West Germany

The exchange of information of spectral data in computer readable form is becoming of great importance. To facilitate this process a standard format for spectral data has to be defined.

The Joing Committee on Atomic and Molecular Physical Data (JCAMP) has specified a standard format for IR-data. This format has been published:

JCAMP-DX: A Standard Format for Exchange of Infrared Spectra in Computer Readable Form.
R. S. McDonald, P. A. Wilks, JR.,
Applied Spectroscopy 42, 151-62 (1988).

The essential features of this format are
- the data files are coded in ASCII-format
- the information is split into logical blocks
- each block of information is identified by a keyword.

Various committees are working on definig JCAMP-formats for other spectral data like NMR and MS data.

Spectral data cannot be passed around without proper identification of the compound they refer to. Such an idenfitication should go beyond just giving the name, it should represent the structure of the compound. Only then, searches for classes of compounds, substructures like ring systems or functional groups, etc. can be made. This is a prerequiste for the use of spectral data in structure elucidation.

A committee has been formed, consisting of B. M. P. Hendricks, Duphar B. V., P. Hoever, Bayer AG, C. Jochum, Beilstein Institute, H. Somberg, Brucker GmbH, and J. Gasteiger, TU Munich, to define a standard format for the exchange of structure information within the framework of the JCAMP-format. The result of this work has been submitted for publication under the title:

"JCAMP-CS" A Standard Exchange Format for Chemical Structure Information in Computer Readable Form.
J. Gsteiger, B. M. P. Hendricks, P. Hoever, C. Jochum, H. Somberg, to Applied Spectrocopy.

The following gives a brief outline of the structure and main features of this format. The full manuscript can be obtained from the author to whom correspondence should be addressed (J. G.).

3. GENERAL PRINCIPLES

JCAMP-CS adopts the same conventions and label names as JCAMP-DX. For example, labels like ##DATE=, ##CAS REGISTRY NO= and ##NAMES= can be associated to a structure by including them in the JCAMP-CS block. The CORE of a JCAMP-CS file comprises (see table 1) the following set of obligatory labeled data records (LDR): ##JCAMP-CS=, ##ATOMLIST=, always preceded by ##MOLFORM= and always followed by ##BONDLIST= except if the species does not contain bonds (e.g. ionic compounds or pure elements) and, if applicable, ##CHARGE=. The information on the structure of a chemical species has to be ended by the LDR ##END=. This LDR has to stand after the CORE and SHELL information. The (optional) SHELL of a JCAMP-CS file (see table 1) immediately follows the CORE and comprises LDR's which code items like stereochemical information, or coordinates for either graphical representation and/or modelling techniques. Although optional, these LDR's should not be omitted by the encoding software if the internal representation contains this information. The ##BLOCK-ID= preferably proceeds ##MOLFORM=.

$$CORE of JCAMP-CS

1.	##TITLE=	$$4.1
2.	##JCAMP-CS=	$$4.2
3.	##MOLFORM=	$$4.3
4.	##ATOMLIST=	$$4.4
5.	##BONDLIST=	$$4.5
6.	##CHARGE=	$$4.6
7.	##END=	$$4.7

$$SHELL of JCAMP-CS

8.	##RADICAL=	$$5.1
9.	##STEREOCENTER=	$$5.2
10.	##STEREOPAIR=	$$5.3
11.	##STEREOMOLECULE=	$$5.4
12.	##MAX–RASTER=	$$5.5
13.	##XY–RASTER=	$$5.6
14.	##MAX–XYZ=	$$5.7
15.	##XYZ–FACTOR=	$$5.8
16.	##XYZ=	$$5.9
17.	##BLOCK–ID=	$$5.10

Table 1. Overview of the labeled data records (LDR) of a JCAMP-CS file. The LDR's should be coded in the sequence given in this table, except that ##END= is always the last record, also when SHELL information is given.

4. JCAMP-CS CORE-LABELS

4.1 ##TITLE= (TEXT).

conforming to the JCAMP-DX format

4.2 ##JCAMP-CS= (STRING).

analogous to ##JCAMP-DX=

4.3 ##MOLFORM= (STRING).

conforming to JCAMP-DX. In JCAMP-CS this record is obligatory and used for error checking.

4.4 ##ATOMLIST= (STRING).

AN_1 AS_1 NH_1

. . .

. . .

AN_i AS_i NH_i

The ATOMLIST contains an arbitrary number (AN) for the atoms of a molecule followed by the atomic symbol (AS), (including isotope specification, if desired) and the number of those hydrogen atoms (NH) attached to that atom that have not been coded explicitly.

AN: user assigned atom number: contiguous ascending numbering starting with one.

AS: atomic symbol including isotope description conforming to the ##MOLFORM= conventions.

NH: total number of hydrogen atoms directly bonded to the atom specified by AN and AS.

4.5 ##BONDLIST= (STRING).

$$
\begin{array}{lll}
AN1_1 & AN2_1 & BT_1 \\
\cdot & \cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot \\
AN1_i & AN2_i & BT_i
\end{array}
$$

The ##BONDLIST= defines all bonds of a molecule by coding all bonded pairs of atoms AN1 and AN2.

The bondlist contains one bond per line, the order of the fields is fixed and the fields are separated by (a) blank (s).

AN1: number of the first atom of a bond

AN2: number of the atom connected to AN1. Preferred coding: AN1 ascending, AN2 ascending and larger than AN1.
BT: bond type: S, for single bonds; D, for double bonds; T, for triple bonds; A, any other additional type of bond, e.g. coordinative bond, hydrogen bridge bond, electron deficient bond.

4.6 ##CHARGE= (ASCII FREE FORMAT NUMERIC = AFFN).

$$
\begin{array}{lllll}
CH_1 & AN1_1 & AN2_1 & \ldots & ANI_1 \\
\cdot & \cdot & \cdot & & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & & \cdot \\
CH_i & AN1_1 & AN2_i & \ldots & ANI_i
\end{array}
$$

The formal charges on the atoms of a molecule are given in this list. For each charge value (CH) the atom where the charge is located is specified through AN. For delocalized systems all centers of charge localization should be indicated.

CH: (delocalized) formal charge

AN: user assigned atom number (as in ATOMLIST)

4.7 ##END=

Conforming to JCAMP-DX

5. JCAMP-CS SHELL-LABELS

5.1 ##RADICAL= (AFFN).

$$\begin{array}{llll} UE_1 & AN1_1 & AN2_1 & \ldots\ ANI_1 \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ . & . & . & . \\ UE_i & AN1_i & AN2_i & \ldots\ ANI_i \end{array}$$

The number of unpaired electrons on the atoms of a molecule can be given in this LDR. For each value of unpaired electrons (UE) the atoms where it is located is specified by AN. For delocalized systems all atom centers for spin localization can be indicated.

UE: number of unpaired electrons
AN: atomlist describing the extent of delocalization

5.2 ##STEREOCENTER= (STRING).

$$\begin{array}{lll} AN_1 & SD_1 & SG_1 \\ . & . & . \\ . & . & . \\ AN_i & SD_i & SG_i \end{array}$$

Here, stereochemical information on the configuration of stereocenters (chiral atoms and centers of higher coordination numbers) can be given.

AN: number of the atom for which stereochemical information is given
SD: stereodescriptor.
P,M = priority based on user defined atom numbers, AN

SG: Stereogroup. This field assigns to all centers with a known relative configuration the same alphabetic code:

0 (zero)	=	SD is absolute stereodescriptor
Uppercase	=	SD is relative stereodescriptor for a pure isomer but its absolute stereochemistry is unknown
Lowercase	=	SD is relative stereodescriptor for a racemic compound.

5.3 ##STEREOPAIR= (STRING).

$AN1_1$ $AN2_1$ SD_1 SG_1

. . . .

. . . .

$AN1_i$ $AN2$ SD_i SG_i

Information on the stereochemistry at pairs of atoms can be given in this list. The two atoms of the pair may be directly bonded to each other (as in double bonds or single bonds between double bonds). However, the two atoms may also be separated by more than one bond. Then, these two atoms define an axis for giving stereochemical information (e.g. a chirality axis).

SD: stereodescriptor.

P, M	=	priority based on AN
0 (zero)	=	one isomer but configuration is not known.

SG: Stereogroup. This field assigns to all centers with a known relative configuration the same alphabetic code:

0 (zero)	=	SD is absolute stereodescriptor
Uppercase	=	SD is relative stereodescriptor for a pure isomer but its absolute stereochemistry is unknown
Lowercase	=	SD is relative stereodescriptor for a racemic compound.

5.4 ##STEREOMOLECULE= (STRING).

YES

If this information is given the stereochemistry of the molecule cannot be specified through descriptors in ##STEREOCENTER= and ##STEREOPAIR=. For example, this may be the case with helical structures. In this situation the stereochemistry of the molecule has to be deduced from the three-dimensional coordinates of the atoms in the molecule (cf. ##XYZ=).

5.5 ##MAXRASTER= (AFFN).

This value gives the maximum of the absolute value of the X or Y coördinates which are used for graphical representation of the structure. This label is obligatory if the ##XY–RASTER= label is included and is necessary to prevent numeric overflow when reading the raster coordinates.

5.6 ##XYRASTER= (AFFN).

$$
\begin{array}{cccc}
AN_1 & X_1 & Y_1 & Z_1 \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
AN_i & X_i & Y_i & Z_i
\end{array}
$$

This list contains the coordinates for graphical representation of the structure as integer values. A right-handed coordinate system has to be used with equal scaling factors in x and y direction.

5.7 ##MAXXYZ= (AFFN).

This value gives the maximum of the absolute value of either the X, Y, or Z coordinates of the atoms listed in the LDR ##XYZ=. If ##XYZ= is used this label is obligatory to prevent numeric overflow during data read in.

5.8 ##XYZFACTOR= (AFFN).

This value gives a multiplication factor used to scale the integer atom-coordinates into the original Angstroem units. This field is obligatory if the LDR ##XYZ= is used.

5.9 ##XYZ= (AFFN).

$$
\begin{array}{cccc}
AN_1 & X_1 & Y_1 & Z_1 \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
AN_i & X_i & Y_i & Z_i
\end{array}
$$

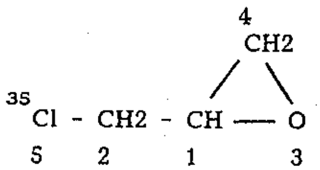
The values in this list are physically meaningful X, Y, and Z atom-coordinates scaled in a way that they are represented by integers. Multiplication with the XYZ–FACTOR will rescale them to genuine units of length. A right-handed coordinate system has to be used. For each atom one line containing AN, an X, Y and Z coordinate separated by at least one blank has to be given in ascending order of the atom-numbers (as specified in ##ATOMLIST=).

5.10 ##BLOCKID= (AFFN).

A positive integer has to be given to assign a number to this JCAMP-CS block which is unique inside the current JCAMP-transfer file.

6. EXAMPLES

6.1




```
##TITLE= isotopically enriched epichlorohydrine
$$a pure enantiomer of unknown configuration
##JCAMP-CS=3.6
##DATE= 88/6/14
##CAS NAME= 1-chloro-2,3-epoxypropane
##CAS REGISTRY NO= 13403-37-7
##MOLFORM= C3 H5 ^35Cl O
##ATOMLIST=
$$next line for human readability of the atomlist
$$   AN AS NH
       1  C  1
       2  C  2
       3  O
       4  C  2
     5 ^35Cl
##BONDLIST=
```

```
$$ AN1 AN1 BT
   1   2   S
   1   3   S
   1   4   S
   2   5   S
   3   4   S
##STEREOCENTER=
$$ AN  SD  SG
   1   P   A
$$ P: arbitrarily assigned
##MAX-RASTER= 64
## XY-RASTER=
$$ next line for readability of coordinate list
$$ AN  X   Y
   1   7   1
   2   4   1
   3   11  1
   4   9   3
   5   1   1
##END=
```

MEETINGS

26-28 February 1990.
San Diego Supercomputer Institute Workshop on Molecular Dynamics Codes.
San Diego, CA.
Contact Dr. Kim Baldridge, P. O. Box 85608, SDSC, San Diego, CA 92138-5608 (619-534-5149 ; BITNET: baldridge%SDS.SDSCNET@SDSC).

5-8 March 1990.
41st Pittsburgh Conference.
New York, NY.
Contact: Linda Briggs, c/o Pittsburgh Conference Office, 300 Penn Center Plaza, Suite 332, Pittsburgh, PA 15235 (412-825-3220; FAX: 412-825-3224)

26-30 March 1990.
2nd Biennial Workshop on Molecular Mechanics & Molecular Dynamics.
Tallahassee, FL.
Contact: Pat Meredith, Conference Coordinator, Supercomputer Computations Research Institute, Dirac Library, Florida State University, Tallahassee, FL 32306-4052 (904-644-1010; FAX: 904-644-8281; BITNET: meredith@fsu).

27-29 March 1990.
Supercomputing Japan '90
場所: 豊島区東池袋サンシャインコンベンションセンター東京
連絡先: Supercomputing Japan '90事務局 〒108 港区三田1-2-22 東洋ビル3F (TEL 03-769-3050)

8-13 April 1990.
American Crystallographic Association Annual Meeting.
New Orleans, LA.
Contact: Cheryl Klein, Department of Chemistry, Xavier University, 7325 Palmetto Street, New Orleans, LA 70125 (504-486-7411; BITNET: CLKCM@UNO).

17-27 April 1990.
NATO Advanced Study Institute: Applications of Charge-Density Research to Chemistry and Drug Design.
Sant Felui de Guixals, Costa Brava, Spain.
Contact: Prof. G. A. Jeffrey, Dept. of Crystallography, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260 (FAX: 412-624-1882).

22-27 April 1990.
199th ACS National Meeting.
Boston, MA.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

7-9 May 1990.
21st European Congress on Computer Applications in the Chemical Industry.
Den Haag, THE NETHERLANDS.
Contact: Dr. J. M. van der Kamp, KIVI, 23 Prinsessegracht, 2500 GK Den Haag, THE NETHERLANDS.

22-23 May 1990.
Fourth Molecular Modelling Workshop.
Darmastadt, WEST GERMANY
Contact: Prof.-Dr. Brickmann, Dept. of Physical Chemistry, TH-Darmstadt, Petersenstrasse 20, D 6100 Darmstadt, WEST GERMANY.

3-7 June 1990.
26th Annual Meeting of the Drug Information Association.
San Francisco, CA.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002, (215-628-2288; FAX: 215-641-12299).

1-6 July 1990.
9th Annual International Conference on the Molecular Graphics Society.
Uppsala, SWEDEN.
Contact: Dr. B. Bywater, Molecular Biophysics Dept., Pharmacia AB, S-75182 Uppsala, SWEDEN.

8-14 July 1990.
World Association of Theoretical Organic Chemists.
Toronto, Ontario, CANADA.
Contact: WATOC Congress 1990, c/o Department of Chemistry, University of Toronto, Toronto, Ontario, CANADA M5S 1A1.

15-21 July 1990.
The Frontiers of Theoretical Chemistry.
Halifax, Nova Scotia, CANADA.
Contact: Prof. R. J. Boyd, Dept. of Chemistry, Dalhousie University, Halifax, N. S. B3H 4J3 CANADA (902-424-8883; FAX: 902-424-2319; BITNET: BOYD@DALAC).

19-28 July 1990.
IUPAC 15th General Assembly and International Congress.
Bordeaux, FRANCE.
Contact: Prof. M. Hospital, Lab de Christallografie, Université de Bordeaux 1, 351 Cours de la Liberation, 33405 Talence, FRANCE.

23-27 JULY 1990.
Expanding Frontiers in Polypeptide and Peotein Structural Research.
Whistler, British Columbia, CANADA.
Contact: Dr. V. Renugopalakrishnan Harvard Medical School, Department of Orthopedic Surgery, 300 Longwood Avenue, Boston, MA 02115 (617-735-8413).

29 July-3 August.
10th International Biophysics Congress.
Vancouver, CANADA.
Contact: Mr. L. Forget, Congress Manager, 10th International Biophysics Congress, National Research Council Canada, Ottawa, Ontaria, CANADA K1A ORG.

11-15 August 1990.
The Fourth Protein Society Symposium.
San Diego, CA.
Contact: Mark K. Woods, Dept. of Biochemistry, SJ-70, University of Washington, Seattle, WA 98195 (206-526-9936).

26-31 August 1990.
200th ACS National Meeting.
Washington, DC.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

28-31 August 1990.
コンピュータの材料科学・工学への応用　国際会議・展示会(CAMSE '90)
連絡先：CAMSE '90 事務局　〒101 千代田区九段北1-8-10　日刊工業新聞事業局内 (03-222-7162, FAX; 03-221-7137)

16-20 September 1990.
Computational Chemistry 1990.
Oriando, FL.
Contact: Lynn McDaniel, Al Tek International, Inc., 8321 N. Woolsey, Portland, OR 97203 (503-289-7735).

18-22 September 1990.
Conference on Computers in Chemistry.
Wroclaw, POLAND.
Contact: Dr. P. Misiak, "Computers in Chemistry", Institute of Organic and Physical Chemistry 1-4, Wyb. Wyspianskiego 27, 50-370 Wroclaw, POLAND.

15-20 October 1990.
ELMAU 3: Computational Methods in Chemical Design.
Schlo β Elmau, WEST GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Plantz 1, D-4330 Mülheim a.d. Ruhr, WEST GERMANY.(49-208-30-64-88 ; FAX: 49-208-30-46-07).

12-16 November 1990.
SUPERCOMPUTING 1990.
New York, NY.
Contact: Dr. Joanne Martin, IBM, T. J. Watson Research Center, P. O. Box 218, Yorktown Heights, NY 10598 (914-945-3285)

28-29 January 1991.
Sixth Biennial Workshop on Computer-Assited Chemistry.
New Orleans, LA.
Contact Babu Venkataraghavan, Ledene Laboratories, Middletown Rd., Pearl River, NY 10965 (914-732-3406) or Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

14-19 April 1991.

201st ACS National Meeting.
Atlanta, GA.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, D C 20036.(202-872-4396).

13-17 May 1991.
Eleventh Internationhal Meeting of the Molecular Graphics Society.
Chapel Hill, NC.
Contact: Dr. Fred Brooks, Jr., Dept. of Computer Science, University of North Carolina, Chapel Hill, NC 27599 (919-962-1931).

30 May-9 June 1991.
Static, Kinematic and Dynamic Aspects of Crystal and Molecular Structure.
Erice. Trapani, ITALY.
Contact: Prof. L. Riva Di Sanseverino, Diparimento de Scienze Mineralogiche, Piazza Porta San Donato 1, 40126 Bologna, ITALY.

21-26 July 1991.
American Crystallographic Association Annual Meeting.
Toledo, OH.
Contact: Alan Pinkerton, Dept. of Chemistry, Univ. of Toledo, Toledo, OH 43606 (419-537-4568).

25-30 August 1991.
201st ACS National Meeting and 4th Chemical Congress of North America.
New York. NY.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, D C 20036.(202-872-4396).

文献紹介

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1989年第29巻4号(11月) 論文題目、著者、頁
ARTICLES

Resolving Multiple Overlapping Calorimetric Transitions by Use of a Microcomputer: Studies on Erythrocyte Membranes, *Jurij Holinej, Howard Y. Ando, and Julian W. Snow,* p. 233

Search for Concealed Non-Keluléan Benzenoids and Coronoids, *S. J. Cyvin, J. Brunvoll, and B. N. Cyvin,* p. 236

Application of Microcomputer-Based Robust Regression Methods to Nonlinear Data Analysis, *Brett J. Stanley and David B. Marshall,* p. 244

Using CONCORD To Construct a Large Database of Three-Dimensional Coordinates from Connection Tables, *Andrew Rusinko III. Robert P. Sheridan, Ramaswamy Nilakantan, Kevin S. Haraki, Norman Bauman, and R. Venkataraghavan,* p. 251

3DSEARCH: A System for Three-Dimensional Substructure Searching, *Robert P. Sheridan, Ramaswamy Nilakantan, Andrew Rusinko III, Norman Bauman, Kevin S. Haraki, and R. Venkataraghavan,* p. 255

Development and Implementation of Peer Review Plus: A Computer-Based Tracking System for Editorial Offices, *Jeffrey D. Spring, John T. Keys, and Lorrin R. Garson,* p. 261

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

編集後記

1990年。今年も何卒よろしくお願い致します。

情報化学部会の活動は、学会の業務部の職員で各種部会担当の二名の方に支えられていましたが、昨年10月に人事移動がありましたので、遅ればせながらご紹介致します。1987年以来お世話になりました森　啓一さんが編集一部にご栄転され、代わりに編集一部から後輩の保倉光邦さんがいらっしゃいました。では、お二人に一言ずつお願いします。

森「情報化学という専門性からも、今後化学会の中で、より重要な位置を当部会は占めるでしょう。その意味からも、2年半で移動というのは残念ではありますが、これからは「化学と工業」誌で御世話になることがあるかと存じます。その際には宜しくお願い致します。」

保倉「この度情報化学部会のお手伝いをさせて頂くことになりました保倉（ほくら）と申します。御指導のほどお願い致しますとともに、御要望等ございましたら、なんなりとお申し付け下さいますよう重ねてお願い申し上げます。」

ありがとうございました。保倉さん、そしてCICSJ Bull. の編集担当の田辺さん、何卒よろしくお願い致します。

CICSJ Bulletin 編集委員長　石塚　英弘

****

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。

本誌に適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須田町１－９　教信木田ビル６階
社団法人　日本化学会　情報化学部会　事務局
電話 (03) 258-9813

****

日本化学会事務局 仮事務所のお知らせ

日本化学会事務局は新化学会館竣工までの間、下記において業務を行いますのでお知らせ致します。

何かとご不便、ご迷惑をおかけいたすと存じますが、何卒ご協力を賜りますようお願い申し上げます。

記

①仮事務所住所

〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル 6, 7 階

(郵便物は旧住所でも届きます)

②電話番号

東京(03)258-9811 (代表)

総務部：(03)258-9812

業務部：(03)258-9813 (部会事業一般、部会誌編集)

経理部：(03)258-9814

会員部：(03)258-9815 (部会入退会、送本)

編集第一部：(03)258-9816

編集第二部：(03)258-9817

会館建設室：(03)258-9818

常務理事室：(03)258-9819

図書室関係：(03)258-9811

②ファクシミリ番号

(03)258-9810

日本化学会事務局 第2・第4土曜日休業のお知らせ

平成2年3月から毎月の第2・第4土曜日の業務を休ませていただきますので、ご理解、ご了承のほどお願い申し上げます。

ISSN 0913-3747

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 8, Number 2
March 1990

目　　次

部会行事

第１３回情報化学討論会

共催　日本化学会、日本薬学会、日本農芸化学会、日本分析化学会、情報科学技術協会
日時　１９９０年１１月２８日（水）－３０日（金）
会場　ホリデイ・イン豊橋（ホリデイ・インシアター）
〒４４１　豊橋市藤沢町　１４１　ＴＥＬ　０５３２－４８－３１３１
ＦＡＸ　０５３２－４６－６６７２
交通　新幹線豊橋駅西口よりタクシー約１０分
尚、本討論会は第１８回構造活性相関シンポジウムと併催されます。
討論主題　1)データベース及び知識ベース、2)ケモメトリックス、3)化学エキスパートシステム、4)情報化学一般
講演申込締切　８月１０日（金）
１件ごとにＢ５判（縦）の用紙に横書きで次の事項を記入のうえ、下記宛にお送り下さい。a)講演題目、b)発表者と所属（講演者に○印）、c)連絡先、d)討論主題（上記の４主題の１つを記入）、e)ポスター発表の可否（申込件数が多い場合には、ポスター発表に切りかえてくださるようお願いすることがあります）。
講演要旨締切　１０月１５日（月）
講演１件について所定の要旨４枚まで。他に半ページの英文要旨を添付すること。（用紙や記入要領は申し込みを受理したのち送付します）。
懇親会　１１月２９日（木）１８時より、第１８回構造活性相関シンポジウムと合同で開催します。
参加登録費　構造活性相関シンポジウムと共通
予約　５，０００円、　当日　６，０００円
懇親会費　５，０００円
予約申込締切　１０月３１日（水）
予約申込方法　郵便にて、住所・氏名・勤務先をご記入の上、下記宛お送り下さい。尚、懇親会ご出席希望の方は併せてお申し込み下さる様お願いします。
予約申し込みの方は締切日までに下記銀行口座へ所定の金額をお振り込み下さい。振り込み確認後、要旨集引換券及び懇親会入場券をお送り致します。
宿泊について　豊橋駅から会場までの交通の便は必ずしも良くありませんので、ホテル側に学会参加者のための宿泊割引をお願いしてあります。ご利用下さい。宿泊料金は下記の通りです。
料金　一泊朝食付　一人当料金（サービス料・消費税込）

スタンダードツイン	（１室２名使用）	７，０００円
デラックスツイン	（　〃　）	９，０００円
スタンダードシングル	（１室１名使用）	８，０００円
デラックスシングル	（　〃　）	１０，０００円

尚、宿泊の予約は直接ホテルにお申し込み下さい。

申込先　〒４４１　豊橋市天伯町字雲雀ケ丘　１－１
豊橋技術科学大学　情報化学討論会
佐々木慎一
（問い合せ先）０５３２－４７－０１１１　内線　８４９，８５０
銀行口座　住友銀行豊橋支店　普通預金
口座番号　７３１１２８
口座名　ＣＩＣＳ・ＳＡＲ実行委員会

ワークショップ報告

「新しい領域としてのケモメトリックスーその現状と将来展望」

去る平成２年１月２２日（月）午後、お茶の水女子大で開催し、４４名の参加者があった。この中には、佐賀県、香川県、和歌山県などの遠方から来られた方、シルバーエイジの先生方、一部門８名の全員で出席して下さった企業もあった。小出昭夫氏（ＩＢM）と花井荘輔氏（富士フイルム）の座長で、１人当り３０分、７件の話題提供があった。終了後、ご馳走が少なくてやや淋しかったが、懇親会を行い、散会した。情報化学部会の話題としては珍しい分野のためか、非部会員の出席者が多く、入会を希望する人があったことはうれしいことである。以下は各話題提供者による報告である。

ケモメトリックスの全体像と最適値自動選定制御による自動化

（お茶女大）　藤 枝 修 子

パターン認識や、多変量解析などはかなり使われている手法であるが、全部を包含してケモメトリックスとして扱い始めたのは比較的最近である。化学に数学的・統計的方法を取り入れている点は共通であるが、ケモメトリックスの守備範囲は人によって異なり、まだ確定していないのが現状のようである。定義、学会・国際会議、定期刊行物（雑誌）、総説、教科書的単行本などにつき一応手元の情報をまとめてみた。

後半では、例えば沈殿滴定を知能ロボットで自動化するとき、反応条件により沈殿生成時間などが滴定の過程で異なるので、経験による画一的条件設定を行うと、正確さが損なわれるか、無駄な時間を要することになる。各時点毎に最適値を自動的に選びながら滴定を進める方式を報告した。

X線スペクトルデータ処理の自動化

（科学警察研究所）　斉 藤 直 樹

X線スペクトルデータ処理において、平滑化と分解能向上処理の自動化を行なった。これらデータ処理の最終目的は、実験的には除き得ない歪を数値処理によって除去し、高分解能スペクトクを得ることにある。その際恣意性を排除するために処理はできるだけ自動化することが望まれる。本研究では、平滑化処理においては、滑らかな結果を与えるスプライン関数法を、分解能向上処理においては級数展開法を用いて処理の自動化を行なった。いずれも収束の判定には情報量規準を用い、パラメータは最小自乗法で決定した。情報量規準には、ＡＩＣ、ＢＩＣ、ＭＤＬ等いくつかあるが、スプライン関数による平滑化では、ＡＩＣよりＢＩＣまたはMＤＬの方が、より少ない節点数で最小になり、良好な結果が得られた。級数展開による分解能向上処理では、ＢＩＣまたはMＤＬ最小では十分な分解能が得られず、ＡＩＣ最小の方がより高分解能が達成された。

食品分野におけるケモメトリックスの利用

（野田産研）　相島鐵郎

ケモメトリックスは、数学や統計学を利用してデータから抽出する情報量を最大化したり、機器の操作条件や実験条件を最適化する。複雑な多成分系である食品の工程管理や品質管理は従来、経験と勘に頼り勝ちであったが、ケモメトリックスの導入により、科学的な評価や製造条件の決定が可能となりつつある。パターン認識は、GCやHPLCなどのクロマトグラフィー分析や近赤外分光分析（NIR）等の多変量データから有用な情報を抽出、官能特性と成分群の関係を解明したり、試料を識別・分類する。重回帰分析、判別分析、主成分分析、因子分析、クラスタ分析などのほか近年、PLS (Partial Least Squares) 回帰分析、SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogy) などの新しい解析手法も開発され利用されている。シンプレックス法は、複数因子が相互作用を有する系に最も広く適用されている最適化手法である。フレーバー成分のGCパターン類似率を目的関数とし、精油やジュースの混合割合をシンプレックス法により最適化した。

化学パターン認識

（豊橋技術科学大学）　宮 下 芳 勝

パターン認識の化学への応用のうち、パターン認識の構造－活性相関への応用に焦点をあてて話を進めた。まず、ペリラルチル誘導体の甘味／苦味をその化学構造から分類する問題をとりあげた。次に芳香族炭化水素類の発ガン性のモデル化について述べそのモデルがジーゼルエンジンの排気ガス成分のＰＡＨの発ガン性の予測に役立つことを報告した。パターン認識をおこなう場合、パターン空間のデータ構造が Symmetric と Asymmetric な場合が有って、それぞれのデータ構造に対応した分類方法を選ばなければならないことを述べた。パターン空間のデータ構造が Asymmetric な場合としてサルファメート類の構造－甘味の問題を取り上げ、ＳＩＭＣＡ法の解析結果を使ってどの様に新しい甘味候補化合物を予測するかを述べた。また実際にこの候補化合物を合成してショ糖の３倍の甘味を持つことを確認した。エラスターゼ基質であるトリペプチド類の構造－活性相関についてＰＬＳ法をいかに応用するかを報告した。最後に今後のケモメトリックスの方向と化学パターン認識についての成書の紹介および化学パターン認識プログラム ARTHUR75 の配布についての話で締めくくった。

化学因子分析法で分析化学はどう変わるか？

（兵庫教育大学　自然系）　尾関　徹

分析化学の一つの流れに局所状態分析があり、高集積度化を目指す半導体技術からのニーズもあり、固体表面の局所状態分析は、近年非常な勢いで進んでいる。一方で、溶液内部や溶液と固体との界面などの局所状態分析は、従来から多くの問題を抱えつつ、未だ十分とはいえない。その原因は、溶液の局所状態を記述するために必要な、ｐＨや電位などの熱力学的物理量を測定するためのプルーブの微小化が、ｍｍのオーダーを越えると技術的に難しくなることによる。本報告の提案するところは、原理的に空間分解能のよい光学的方法を、熱力学的な諸量の評価に適用しようというものである。従来、複数の化学種からなる系で測定されるスペクトルは個々の化学種の寄与が重なったものとなり、その分離が容易でないことが多かった。ところが、化学因子分析法などのケモメトリックスがその分離を可能にし、微細局所に存在する化学種の局所濃度の評価を可能にした。現在、定量の空間分解能を数μｍまで上げることに成功している。これは将来、ｐＨや電位の見積りが、同精度の分解能で分光学的に可能になることを意味している。

ケモメトリックスにおける多次元化によるデータ解析

（東海大学　海洋学部）　千賀康弘

多成分からなる混合物試料に対する構成成分の定性・定量分析の一手法として多次元的なパラメータ走査によって得られる多次元行列データを固有値解析する方法がある。この一例として、蛍光物質に対し、励起と発光の両波長を走査する２次元蛍光励起・発光行列（ＥＥＭ）をとりあげ、測定システムの構成、データの特長、および固有値解析による成分スペクトルの推定法について紹介した。システム構成においては、ラインセンサを用いて駆動部を少なくし、サンプル点の位置精度を高めて走査時間の短縮を計る工夫をした。データ解析では先見情報としてスペクトル強度の非負性とスペクトルピークの局在化を考慮したスペクトル分離法を紹介した。このようなパラメータ走査の多次元化は、各パラメータ毎の分解能が低くてもパラメータ間の直交性が高ければ、少ないデータ数でも信頼性の高い分析を実現できる。

ケモメトリックスをこう考える－Ｃｈｅｍｏｌｏｇｉｃを目指して

（通産省工技院化技研）　西 川 利 男

化学の自然を見る見方には古くから定量と定性という二つの側面がある。いずれにせよ、コンピュータ技術にサポートされて、計量化はますます進められるべきであり、Ｃｈｅｍｏｍｅｔｒｉｃｓはそのあらわれであろう。

しかし、とくに強調したいのは定性面における計量化であり、これこそ化学を最も特徴づけるものといえる。例えば、化学構造についていえば、直交デカルト的（Ｃａｒｔｅｓｉａｎ）というよりトリー構造的、ネットワーク構造的であり、あるときはトポロジカルな、またあるときは３次元立体的である。これらをコンピュータの上でどう扱い、表現するかは化学者として大きな関心事である。さらには化学の推論のしかたについてもこのような構造的アプローチが有効であろう。このような一例として遺伝子情報の解読、化学方程式の直接入力認知プログラムをとりあげた。そして、ＦＯＲＴＲＡＮによる数値計算（Ｎｕｍｂｅｒ　Ｃｒｕｎｃｈｉｎｇ）中心から、ＰＲＯＬＯＧ、ＡＰＬなどの記号論理処理へと、つまりＣｈｅｍｏｌｏｇｉｃへの方向こそ、Ｃｈｅｍｏｍｅｔｒｉｃｓの将来への発展として望まれるものと考えている。

化学命名法ワークショップ　第３回

命名の歴史から機械処理まで

日時　平成２年４月２７日（金）
　　　１０時分より１６時まで
場所　日本科学技術情報センター会議室
　　　東京都千代田区永田町 2-5-2
　　　地下鉄丸ノ内線国会議事堂前下車
主催　日本化学会情報化学部会
　　　世話人　飯塚健（群馬大　TEL 0272-32-1611 ）

参加希望者は電話（０３－２５８－９８１３）で
日本化学会情報化学部会にお申し込み下さい

今回の話題とその提供者は次の通りです：
「日本薬局方における化学名の記載について」業平邦利氏（国立衛生試験所）
「無機化合物の命名に関する諸問題」中原勝儼氏（立教大学）

部会記事

平成2年度部会役員

〔部会長〕	藤原　譲	筑波大学電子情報工学系
〔副部会長〕	吉田元二	住友化学工業㈱大阪研究所
	町田勝之輔	京都大学薬学部
〔幹　事〕	荒木啓介	日本科学技術情報センター
	石塚英弘	図書館情報大学図書館情報学部
	板井昭子	東京大学薬学部
	今井　賢	立正大学教養部
	梅山秀明	北里大学薬学部
	大澤映二	北海道大学理学部
	岡田　孝	関西学院大学情報処理研究センター
	柏木　浩	九州工業大学情報工学部
	神谷和秀	武田薬品工業㈱
	鬼頭繁治	愛知工業大学工学部
	工藤喜弘	山形大学工学部
	小出昭夫	日本IBM㈱東京基礎研究所
	佐藤明子	化学情報協会
	西岡孝明	京都大学化学研究所
	橋本正雄	日立計測エンジニアリング㈱
	服部　忠	名古屋大学工学部
	張ケ谷泰二	エーザイ㈱つくば研究所
	平野恒夫	東京大学工学部
	深沢義正	広島大理学部
	藤枝修子	お茶の水女子大学理学部
	藤田真作	富士写真フィルム㈱足柄研究所
	松浦育敏	中外製薬㈱御殿場研究所
	安岡則武	姫路工業大学
	谷中一郎	呉羽化学工業㈱生物医学研
	山崎　昶	電気通信大学
	山崎　徹	三井石油化学工業㈱
	山田明文	長岡技科大学工学部
	四居靖彦	第一製薬㈱中央研究所
〔監　査〕	佐々木慎一	豊橋技術科学大学
	米田幸夫	東海大学開発研究所

関連行事

第18回構造活性相関シンポジウム

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、構造活性相関懇話会
日時 １９９０年１１月２８日（水）－３０日（金）
会場 ホリデイ・イン豊橋（ホリデイ・インシアター）
〒４４１ 豊橋市藤沢町 １４１ ＴＥＬ ０５３２－４８－３１３１
ＦＡＸ ０５３２－４６－６６７２
交通 新幹線豊橋駅西口よりタクシー約１０分
尚、本シンポジウムは第１３回情報化学討論会と併催されます。
討論主題 医薬、農薬などを含む天然、あるいは合成生物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 ８月１０日（金）
１件ごとにＢ５判（縦）の用紙に横書きで次の事項を記入のうえ、下記宛にお送り下さい。a)講演題目、b)発表者と所属（講演者に○印）、c)連絡先、d)講演内容の要約（150-200字程度）。
講演要旨締切 １０月１５日（月）
講演１件について所定の要旨４枚まで。他に半ページの英文要旨を添付すること。（用紙や記入要領は申し込みを受理したのち送付します）。
懇親会 １１月２９日（木）１８時より、第１３回情報化学討論会と合同で開催します。
参加登録費 情報化学討論会と共通
予約 ５，０００円、 当日 ６，０００円
懇親会費 ５，０００円
予約申込締切 １０月３１日（水）
予約申込方法 郵便にて、住所・氏名・勤務先をご記入の上、下記宛お送り下さい。尚、懇親会ご出席希望の方は併せてお申し込み下さる様お願いします。
予約申し込みの方は締切日までに下記銀行口座へ所定の金額をお振り込み下さい。振り込み確認後、要旨集引換券及び懇親会入場券をお送り致します。
宿泊について 豊橋駅から会場までの交通の便は必ずしも良くありませんので、ホテル側に学会参加者のための宿泊割引をお願いしてあります。ご利用下さい。宿泊料金は下記の通りです。
料金 一泊朝食付 一人当料金（サービス料・消費税込）

スタンダードツイン	（１室２名使用）	７，０００円
デラックスツイン	（ 〃 ）	９，０００円
スタンダードシングル	（１室１名使用）	８，０００円
デラックスシングル	（ 〃 ）	１０，０００円

尚、宿泊の予約は直接ホテルにお申し込み下さい。

申込先 〒４４１ 豊橋市天伯町字雲雀ケ丘 １－１
豊橋技術科学大学 構造活性相関会シンポジウム
佐々木慎一
（問い合せ先）０５３２－４７－０１１１ 内線 ８４９，８５０
銀行口座 住友銀行豊橋支店 普通預金
口座番号 ７３１１２８
口座名 ＣＩＣＳ・ＳＡＲ実行委員会

社団法人近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会

パソコンによるコンピュータ化学の実際

近畿化学協会コンピュータ化学部会は，コンピュータ利用と情報に関する産・学・官研究者の研鑽の場として機能し，科学の新しい動向を捉えて，化学および化学工業の発展と周辺産業との技術交流の促進に寄与することを目的として発足したもので，CLOSED制でさまざまなサービスを部会員に対して行っております．

この度，日本化学会，同情報化学部会ならびに関西化学工業協会の共催を得て，下記の通り本部会公開講演会を開催致すことになりましたので，是非ともこの機会に多数ご聴講下さいますようここにご案内申し上げます．

主催　　近畿化学協会コンピュータ化学部会
共催　　日本化学会・日本化学会情報化学部会・関西化学工業協会

日　時：平成２年５月14日（月）
会　場：大阪科学技術センター４階401 号室
（大阪市西区靭本町１－８－４・☎06-443-5321）

〔交　通〕地下鉄四ツ橋線「本町」駅下車，28番出口より北へ
徒歩約５分，うつぼ公園北詰

参加申込締め切り：　５月７日（月），定員（150 名）になり次第．

講演(1)　(13:20 ～14:30)
「分子の３次元構造の組み立て」
東洋紡績株式会社総合研究所　相川　泰氏

講演(2)　(14:35 ～15:45)
「パソコンでできる分子軌道計算」
京都府立大学生活科学部　小林久芳氏

講演(3)　(15:50 ～17:00)
「分子構造のグラフィックス」

姫路工業大学工学部　中野英彦氏

《懇　親　会》　　(於；同センター4階405 号室)
講演会終了後，講師の先生方を囲んで，アフターディスカッションを兼ねた懇親ビヤパーティを開催致します.

【参加費】

近畿化学協会コンピュータ化学部会員	無料
近畿化学協会・関西化学工業協会・日本化学会会員	3,000円
学生	3,000円
非会員	5,000円

＊いずれもテキスト代を含みます．また，コンピュータ化学部会員は当部会登録者またはその代理の方について無料となります.

【懇親会費】
おひとりにつき：2,000 円　(当日会場にてお支払い下さい)

【参加申込み方法】
用箋に"近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会参加申込み"と題記して，①氏　名，②勤務先・職名，③連絡先（〒，電話番号も），④会員資格，⑤懇親会参加の有無を必ず明記のうえ，下記あてにお申込み下さい.
参加費は現金書留または銀行振込（協和銀行京町堀支店普通預金・（社）近畿化学協会　NO.230040 ）でご送金下さい.

【申込み・問い合わせ先】
〒５５０　大阪市西区靭本町１－８－４（大阪科学技術センタービル内）
社団法人近畿化学協会　コンピュータ化学部会
☎06(441)5531，　FAX.06-443-6685

分子設計のための統合システム「ＡＣＡＣＳ」

住友化学工業株式会社

Advanced Computer Aided Chemistry System　（技術システム部）菊園康雄

１．緒言。

研究開発におけるコンピュータ利用は、ここ数年、我が国においても広範囲な広がりを見せておりますが、この背景としては、コンピュータとその利用技術の著しい進歩と共に、開発目標の高度化による、研究手法拡大の必要性が生じたことが挙げられます。

当社では、このような研究環境の変化に対応するため、質・量、両面からの研究開発の効率化を推進することを目的として、コンピュータケミストリ手法に注目し、昭和５８年より日本電気㈱と共同して「ＡＣＡＣＳ」の開発に着手し、２年後に初版を完成させました。　その後も、利用と並行して、研究者の意見を基に、鋭意、システム機能の改良と拡張を行ってまいりました。

本稿では、機能拡張が進みつつある「ＡＣＡＣＳ」最新版の概要について紹介致します。

２．システムの概要。

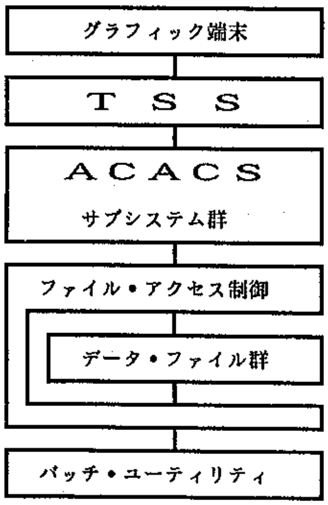
「ACACS」は、化合物情報（化学構造式データ・各種特性データ・スペクトル波形データ）の蓄積・検索から、化合物の立体構造モデルの構築・表示・モデリング、更に、量子化学計算や定量的構造活性相関解析までの巾広い機能を持つ分子設計統合システムであります。

（１）システム構成：

第１図に「ACACS」のシステム構成図を示しました。N5200/07（汎用グラフィック端末）等の端末を用いて、ＴＳＳ(Time Sharing System）配下の会話形式で使用するものです。

「ACACS」は、７種のサブシステム群とバッチ・ユーティリティからなります。　これらの構成を第１表にまとめて示しました。

第２図には、「ACACS」のデータ・フローを示しました。　強調表示されているのがサブシステム、白抜きは、バッチ・ユーティリティを示します。

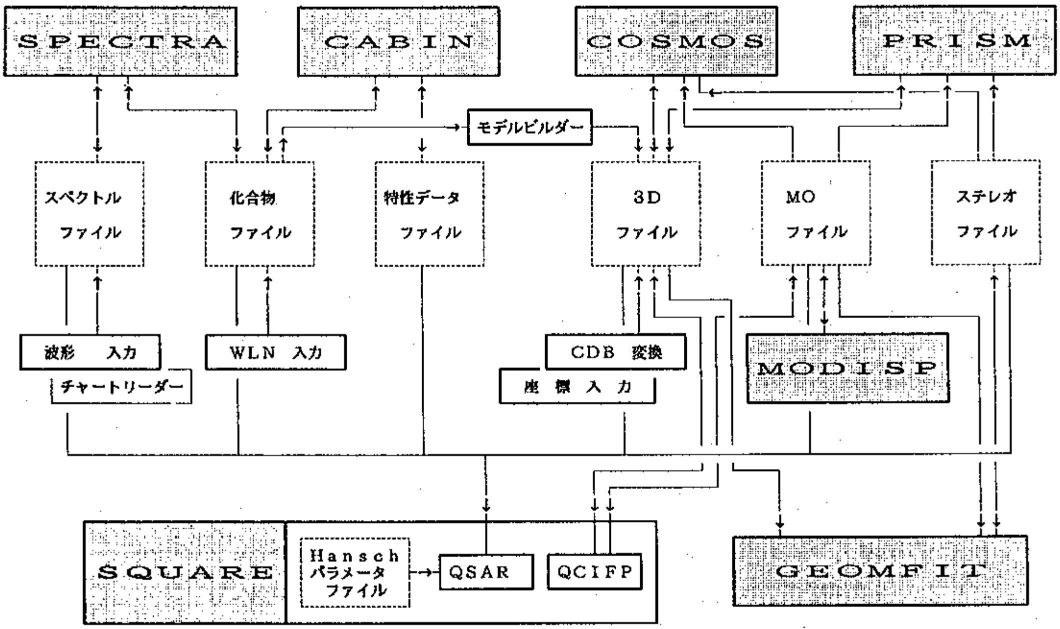


第１図　「ACACS」のシステム構成図

第1表 ACACSシステムの構成

サブシステム名	動作モード、等	グラフィック端末の種類※ N5200 2次元	N6965 2次元	N6975 3次元
① CABIN (化合物・生物活性 情報管理サブシステム)	□蓄積モード □検索モード □データ・モード	◎	◎	−
② SPECTRA (スペクトル情報管理 システム)	□蓄積モード □検索モード	◎	−	−
③ COSMOS (分子モデリング サブシステム)	□基本操作モード　□表示モード □形状比較モード　□バッチ・モード	◎	◎	−
④ PRISM (立体表示サブシステム)	□表示モード □形状比較モード	−	−	◎
⑤ GEOMFIT (GEOMETRY/FITTING サブシステム)	□Geometryモード □Fittingモード	−	−	◎
⑥ MODISP (分子軌道計算結果表示 サブシステム)	□分子軌道計算結果表示 □分子間相関比較表示	◎	−	−
⑦ SQUARE (解析サブシステム)	□定量的構造活性相関解析 (QSAR) □QCインターフェース (QCIFP)	◎	−	−
⑧ UTILITY (バッチ・ ユーティリティ)	□WLN変換□座標入力□モデル・ビルダー □ケンブリッジX線結晶構造DB変換 □スペクトル・データ汎用バッチ蓄積 □スペクトル・チャート・リーダー	◎	−	−

※：N5200/07（2次元汎用端末）、N6965 （2次元高解像度端末）、N6975 （3次元高解像度端末）



第2図 ACACSデータ・フロー

（２）システム機能：

次に、システム機能の概要を紹介致します。

１）化合物・生物活性情報管理サブシステム：「ＣＡＢＩＮ」

「ＣＡＢＩＮ」は、化合物の化学構造式と特性データの蓄積と検索を行うためのデータベース・システムです。　本システムには、３種の動作モード〔蓄積、検索、データ〕があります。

〔蓄積モード〕は、構造式の新規登録または更新を行うものです。　構造式の描画は、グラフィック・ディスプレー上で、画面上の元素記号、結合手、置換基パターン、等を用いマウス操作により行います。　本システムでは、立体化学の取扱いも可能です。　〔検索モード〕は、画面上に描画した化学構造式からの完全一致検索、部分構造検索、さらに、フラグメント検索や特性データ検索を単独または、複合して行うものです。　〔データ・モード〕は、特性データの登録・更新を行います。　データベースは、ＲＩＱＳリレーショナル・データベースを使用しており、高機能な検索が可能となっております。

２）スペクトル情報管理システム：「ＳＰＥＣＴＲＡ」

「ＳＰＥＣＴＲＡ」は、４種類のスペクトル：質量スペクトル(MS)、赤外線吸収スペクトル(IR)、核磁気共鳴スペクトル(H1-NMR)(C13-NMR) に関する、波形データベース・システムです。

本システムには、２種の動作モード〔蓄積、検索〕があります。　〔蓄積モード〕によるデータの登録は、スペクトル測定装置から直接フロッピーディスク（ＦＤ）へ出力、または、専用に開発したチャートリーダーからＦＤへ出力された波形スペクトルを用い汎用端末経由で行います。また、「汎用バッチ蓄積ユーティリティ」を使用すれば、WILEY/NBS MSDB、INKA/ C13NMR DATA BANK、SDBS/IRDB 等の市販のデータベースを本システム用に変換することができます。

〔検索モード〕は、波形検索を行うもので、類似スペクトル検索も可能です。　検索機能としては、４種のスペクトルの組合せによる波形検索だけでなく、波形と構造式や検索キイ（化合物名、分子量、分子式、フラグメント、測定条件、等）を組合わせた複合検索も可能であり、分子構造解析にも有力な手段として利用できます。

３）分子モデリング・サブシステム：「ＣＯＳＭＯＳ」

「ＣＯＳＭＯＳ」は、分子の３次元分子構造を各種分子モデルで、２次元グラフィック・ディスプレー上に表示したり、３次元分子構造の変更、等のモデリングを行うシステムです。

本システムには、４種の動作モード〔基本操作、表示、比較、バッチ〕があります。

各モードの主な処理機能を次に示します。

□基本操作モード　①３次元分子構造情報のファイル（３Ｄファイル）入出力、リスト表示。
　　　　　　　　②分子構造パラメータ（結合距離、結合角、等）の変更・チェック。
　　　　　　　　③表示項目（ノード番号、原子種別、結合種別、水素原子、等）の指定。
　　　　　　　　④分子モデルの表示操作（回転、拡大、Ｚ－クリッピング）。
　　　　　　　　⑤立体配座最適化のための分子力場計算とエネルギー・マップ表示。

□表示モード　①各種モデル表示（スケルトン、ボール＆スティック、空間充填）。
　　　　　　　②各種モデルのステレオ図表示。

□比較モード　①固定配座の２分子の最小二乗フィッティング。
　　　　　　　②固定配座分子への比較分子のねじれ角可変下の最適化フィッティング。

□バッチ・モード　①分子軌道および電子密度の任意切断平面での等高線表示。

４）立体表示サブシステム：「ＰＲＩＳＭ」

「ＰＲＩＳＭ」は、分子の３次元分子構造を、３次元グラフィック・ディスプレー上に各種分子モデルで表示し、分子全体の移動、回転、拡大、Ｚ－クリッピングや、結合軸の回りの部分回転、さらに、２分子の重ね合わせ等を、画面上で実時間処理して操作するためのシステムです。「ＣＯＳＭＯＳ」の表示機能を補完するもので、立体感覚が求められるモデリングに有効です。

５）ＧＥＯＭＥＴＲＹ／ＦＩＴＴＩＮＧサブシステム：「ＧＥＯＭＦＩＴ」

「ＧＥＯＭＦＩＴ」は、３次元グラフィック・ディスプレーの上記実時間処理特性を利用して、分子内、および、種々の方法で重ね合わせた２分子についての分子間の各種立体パラメータの算出を行い、また、その形状比較を行うためのシステムです。　本システムには、２種の動作モード〔GEOMETRY、FITTING 〕があります。〔GEOMETRYモード〕は、与えられた３次元分子構造について任意に幾何学要素（点、直線（法線）、平面）を定義し、各種立体パラメータ値（要素間の距離角度、（指定部分の）表面積・体積、STERIMOLﾊﾟﾗﾒｰﾀ・IWAMURAﾊﾟﾗﾒｰﾀ、等）を計算するものです。〔FITTINGモード〕は、構成原子および任意に定義した幾何学要素を用いて、２分子の重ね合わせ（最小二乗法、重み付け最小二乗法、等）を行い、重ね合わせた状態での幾何形状比較のための立体パラメータ（要素間の距離・角度（ねじれ角）、共通体積）の計算を行うものです。

計算された各種の立体パラメータは、解析サブシステムのＱＳＡＲ、等で引用することができ、分子設計に有効に活用することができます。

６）分子軌道計算結果表示サブシステム：「ＭＯＤＩＳＰ」

「ＭＯＤＩＳＰ」は、分子軌道計算結果である電子状態を分子形状と合わせて視覚的に理解させるための表示システムです。　表示項目と主な機能は次の通りです。

□分子軌道　　　：ローブ表示／等高線表示／かご型表示（スピン軌道識別）
□電荷　　　　　：ﾄﾞｯﾄｻｰﾌｪｽ表示／等高線表示。
□静電ポテンシャル：ﾄﾞｯﾄｻｰﾌｪｽ表示。
□双極子モーメント：ベクトル表示。
□電荷／静電ポテンシャルの分子間相関比較：差電荷、差静電ポテンシャルの表示。

7）解析サブシステム：「ＳＱＵＡＲＥ」

「ＳＱＵＡＲＥ」は、定量的構造活性相関解析（ＱＳＡＲ）と分子力場計算・量子化学計算インターフェース（ＱＣＩＦＰ）からなり、次の解析機能を有しています。

□定量的構造活性相関解析：○Hansch-Fujita 法、○Logistic回帰法、○ALS 法による解析。
○各手法について、約４００種類の置換基を含むパラメータ・ファイルを用いた最適置換基の予測。

□ＱＣＩＦＰ　：○(QCPE261)CNDO/2-3R、○(QCPE344)ICON8、○(QCPE353)MNDO、
○(QCPE523)AMPAC、　○(QCPE581)MOPAC、○(QCPE462)PCILO3 、
○(QCPE395)MM2、の各インターフェース・プログラム。
○分子軌道計算結果ファイル標準リスト出力。

8）バッチ・ユーティリティ：「ＵＴＩＬＩＴＹ」

「ＵＴＩＬＩＴＹ」の主なものは、次の通りです。

□ＷＬＮ変換：ＷＬＮ線形表記コードのＣＡＢＩＮ結合表形式への変換。
□座標入力　：直交座標、Ｚ－マトリックス座標データの３Ｄファイル形式への変換。
□ケンブリッジＸ線結晶構造ＤＢ変換：ＣＡＢＩＮ結合表、および３Ｄファイル形式への変換。
□モデル・ビルダー：化学構造式から環パターンを併用して３次元構造の生成。
□スペクトル・データ汎用バッチ蓄積：ＭＳ、ＮＭＲ（Ｈ１、C13）、ＩＲデータの変換。
□スペクトル・チャート・リーダー　：上記４種類のチャート読み取りとフロッピー出力。

３．運用ハードウェア概要。

本システムは、日本電気の汎用ホストコンピュータ：ＡＣＯＳ－４系上で稼働します。
各サブシステムとユーティリティが、利用できる端末の組合せについては、第１表に示した通りです。　ハードウェア関係の主な規格概要を次に示します。

□ホストコンピュータ………　ＡＣＯＳ－４系（Ｓ－４３０以上）
……　主記憶　　　（６ＭＢ以上）
……　ＯＳ（ＡＣＯＳ－４／ＡＶＰ又はＡＣＯＳ－４／ＭＶＰＸＥ）

□周辺機器　………　磁気ディスク　（固定ディスク２スピンドル以上）
……　磁気テープ　　（１台以上）
……　高速科学演算付加機構

□グラフィック端末　………［２次元］Ｎ５２００／０７（マウス付）［解像度1120× 750］
［２次元］Ｎ６９６５　（タブレット付）［解像度1024×1024］
［３次元］Ｎ６９７５　（タブレット付）［解像度1240×1024］

４．今後の進め方。

はじめに述べました背景から研究開発でのコンピュータ・ケミストリ手法の利用は、今後、益々拡大するものと考えられます。　一つは、一般実験化学者の日常研究業務の中に、もうひとつは専門家（コンピュータ・ケミスト）の高度解析技術を駆使した研究業務の中に、それぞれ波及するものと考えられます。　本システムについては、汎用コンピュータ上で稼働するという特徴を生かして、前者の利用を主眼に置いた解析機能の拡張や操作性の向上を今後も進めて参りたいと考えております。

〔問合先〕〒５４１大阪市中央区北浜４丁目５番３３号
住友化学工業株式会社　技術システム部　菊園康雄

分子設計支援システム“ANCHOR”について

富士通株式会社
第四製造工業システム部

1．富士通の分子設計支援システム

当社の分子設計支援システムの体系を図1に示す。

MACCS／REACCSは、米国のMDL社が開発したデータベースシステムである。MACCSは、分子設計の基本となる、分子情報・物性データ・実験データ・文献データ・試薬に関するデータ等を格納管理する基本となるデータベースシステムである。REACCSは、反応情報を登録／検索するデータベースシステムであり、MDL社より、各種のデータベースが提供されている（表1:MACCS/REACCSのﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ）

ADAPTは、ペンシルベニア大学のJURS教授等によって開発された、パターン認識による構造活性相関研究支援システムであり、MDL社より提供されている。

ANCHORは、呉羽化学工業株式会社と共同で開発した、三次元グラフィックを使用した理論化学計算支援システムである。

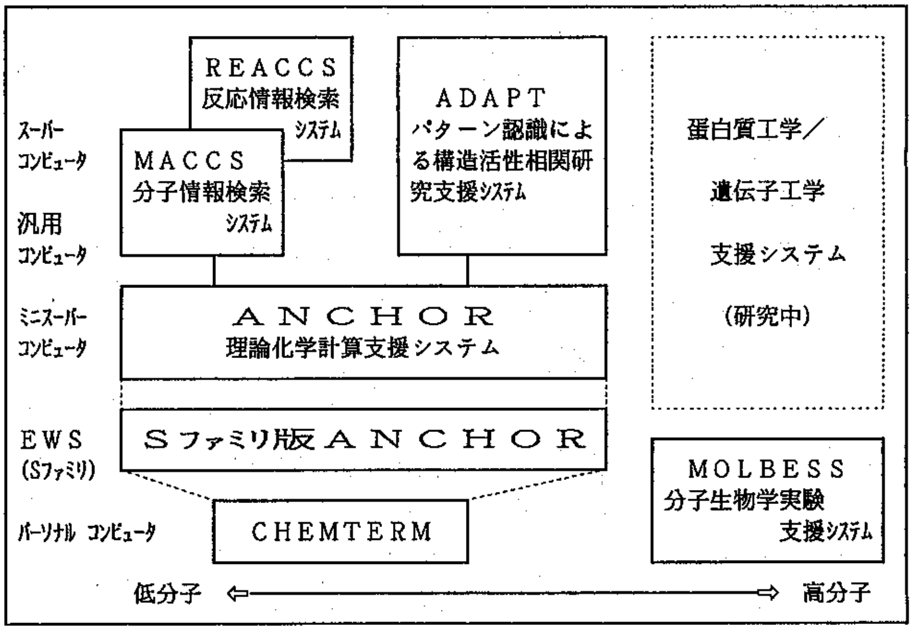


図1　富士通の分子設計支援システムの体系

表1　ＭＡＣＣＳ／ＲＥＡＣＣＳのデータベース

データベース名		開発元	概　　要	
MACCS	ＦＣＤ	ＭＤＬ	Fine Chemical Directory	67000化合物
	MDDR	ＭＤＬ	Maccs Drug Data Report	10000化合物
REACCS	ＴＨ	ＭＤＬ	THEILHEIMER Vol.1-35('46-'80)	46500反応
	ＪＳＭ	ＭＤＬ	Jurnal of Synthetic Methods('80-'88)	32000反応
	ＯＳ	ＭＤＬ	Organic Synthesis Vol.1-64('29-)	5000反応
	ＣＬＦ	ＭＤＬ	Current Literature File('83-)	29000反応
	ＣＣＲ	ＩＳＩ	Current Chemical Directory	30000反応／年
	ＦＣＤ	ＭＤＬ	Fine Chemical Directory	67000化合物
	CHIRAS	ＭＤＬ	ASYMMETRIC SYNTHESIS('75-'88)	10000反応

2．ＡＮＣＨＯＲの特徴

ＡＮＣＨＯＲは、理論化学計算の実用性を重視して開発したシステムであり、以下の特徴がある。

(1) データベース機能

理論化学計算の利用者は、多くの化合物について各種の計算を実行し、その結果を様々な角度から統計処理することにより、研究に必要な情報を取得している。
そのため、ＡＮＣＨＯＲには、計算結果を保存／管理し、検索するためのデータベース機能を用意している。

(2) 計算コストの削減

理論化学計算には、非常に大きな計算機力を必要とする。ＡＮＣＨＯＲは、計算時間を削減するため、計算結果の再利用等利用コストの削減を考慮している。

(3) 実行ストリームの作成

計算する分子の種類、計算の目的、必要な精度、計算時間　等を考慮して、理論化学計算の利用者は、各種の計算プログラムを組み合わせて利用する。
ＡＮＣＨＯＲは、このような一連の流れを実行ストリーム（計算を実行するための手続き）として準備することができる。

(4)　理論化学計算プログラムの修正

理論化学計算プログラムは、ＱＣＰＥから入手することができるが、各プログラムの入出力インタフェースは異なっており、一般の研究者には使いにくい。
ＡＮＣＨＯＲの利用者には、以下の修正情報を提供することにより、使い易いシステムを提供している。

- ・統一したメニューによる実行を可能とするための入力インタフェース
- ・計算結果出力の統一形式化
- ・バグの修正（可能な範囲）及び機能の改良

(5)　三次元グラフィック機能

ＡＮＣＨＯＲで計算した結果は、三次元グラフィックによる視覚情報として見ることも可能である。

3．ＡＮＣＨＯＲの構成と機能

ＡＮＣＨＯＲシステムの構成を図２に示す。

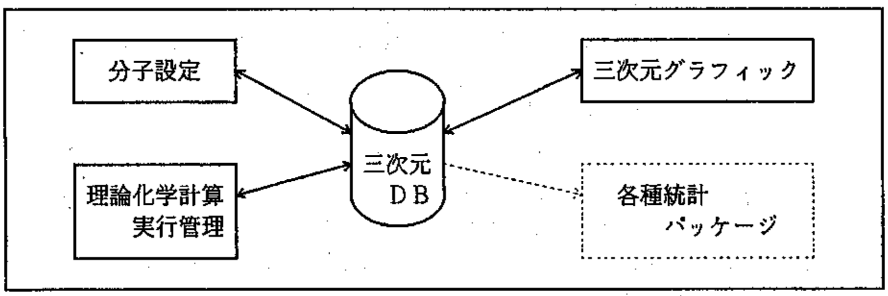


図２　ＡＮＣＨＯＲシステムの構成

(1)　分子設定サブシステム

計算するための分子の構造を組立てるサブシステムである。利用者が想定する任意の形状の分子を、必要な精度で組立てるため、以下の機能から構成されている。

① 分子構造入力
分子の基本となる構造を入力する。
- ・標準分子入力（システムが用意する基本分子）
- ・内部パラメータ入力（Ｚマトリクスを利用者が定義可能）
- ・座標入力（結晶データ、文献値等）

② 分子構造修正
基本構造を修正し、必要な分子構造を組み立てる。
- ・原子、結合、官能基　等の修正

③ 構造の確認
組み立てた分子の構造を計算にかける前に確認する。
- ・分子構造表示による確認
- ・データー値（結合距離、結合角、二面対角　等）の検索／表示

④ 原子種番号の変更
計算プログラムに対応した原子種番号への自動変更

(2) 理論化学計算実行管理

理論化学計算を実行するための環境をメニューから指示する。

・計算プログラムの選択（表2 ANCHORがサポートする理論計算プログラム）
・計算に必要なパラメーター等の設定
・理論化学計算プログラムインタフェースの自動生成
・計算結果の格納指示　　等

(3) データベース及びファイル

計算結果の格納／管理のためのデータベースシステム。

① 三次元ＤＢ

分子の三次元構造及び計算の結果得られる各種の情報が管理される。

② 標準出力インタフェースファイル

計算結果より得られる情報が、識別子とともに統一された形式で管理される。

③ ＭＯファイル

分子軌道法計算の結果得られる各種情報が管理される。

(4) 三次元グラフィックシステム

分子の三次元構造や計算の結果得られる各種の情報をグラフィック表示し、操作することができる。また、分子構造を操作しながら、リアルタイムでエネルギーをモニタリングすることも可能である。

表2　ANCHORがサポートする理論化学計算プログラム（*印のプログラムはS版ANCHORでサポート）

ＭＭ計算	MMI, MMPI, MM2, *MM2PRIME, BIGSTRN2, ECEPP
ＭＯ計算	*EXTHC, CINDO, MINDO/3, *MNDOC, *MOPAC, GEOMO, GEOMORV, GAUSSIAN70, 76, 80
ＭＯ結果計算	*VSS, *PSI77, *ZENPOT
その他	*MOLVOL, MOLAREA

4．ＡＮＣＨＯＲの利用形態（適用例）

理論化学計算システムの利用者は、複数の分子について計算を実行し、その結果をデータベースに格納し、文献や実験等から得られる情報と合わせて、統計的手法を用いて解析し、モデル式等を作成して考察を行う。

そのため、利用者は、ＡＮＣＨＯＲを単体で利用するばかりでは無く、ＭＡＣＣＳ／ＲＥＡＣＣＳ／ＡＤＡＰＴ等と連携して使用するケースが増えている。

図3に、ＡＮＣＨＯＲの適用例を示す。

(1) 薬理活性等の実験データや物性情報等研究に必要な情報は、分子構造とともに、ＭＡＣＣＳのデータベースで管理している。ＭＡＣＣＳの強力な検索機能により、必要な情報は容易に取り出すことができる。

(2) 分子の三次元構造や分子の諸性質は、ＡＮＣＨＯＲで計算され、三次元データベースに保存／管理される。

(3) 解析に必要な種々のデータは、それぞれのデータベースより抽出され、テーブル形式にまとめられる。テーブル中のデータは、統計処理に必要な加工がなされたのち、ＡＤＡＰＴ等の統計処理用ソフトウェアで解析される。

(4) 評価の高い分子を優先的に実験することにより、研究の効率を向上させることができる。分子の合成方法については、ＲＥＡＣＣＳの反応データベースを参照することができる。

このように、実験と計算をサイクリックに行うことにより、効率的に利用することができる。

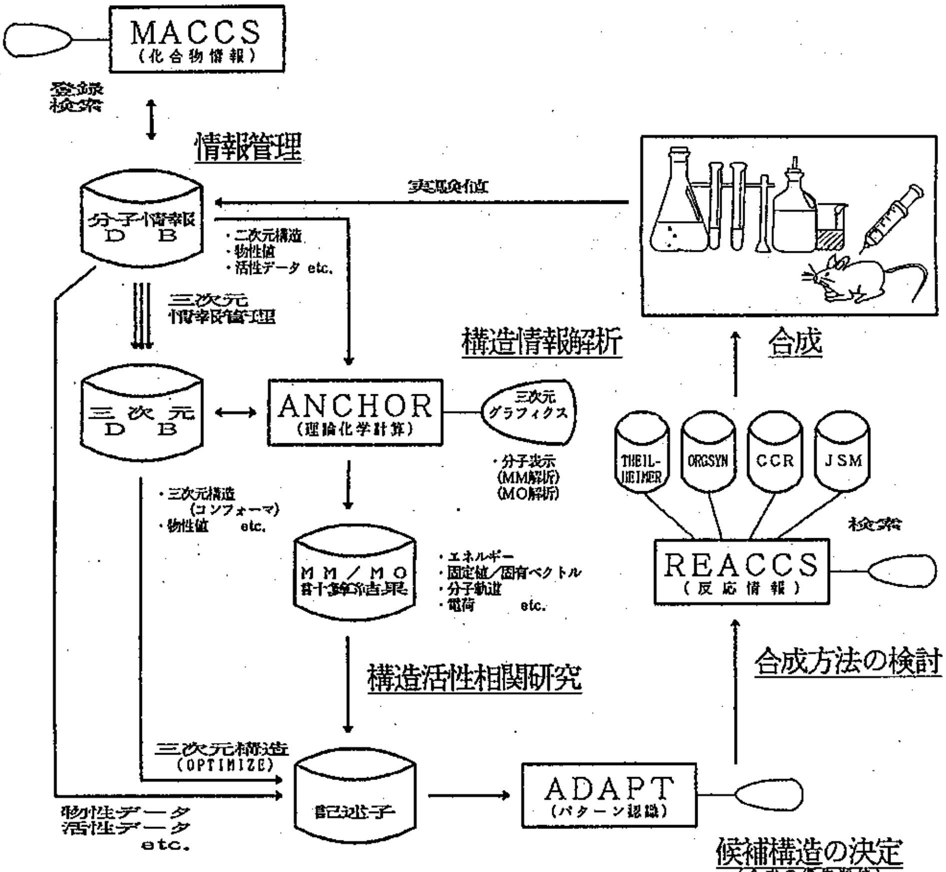


図3　ＡＮＣＨＯＲの適用例

5．おわりに

ＡＮＣＨＯＲは、汎用コンピュータ用に開発したシステムである。近年、エンジニアリング・ワークステーションやパーソナルコンピュータが、安価で高性能になってきており、ある程度の計算であれば、充分実用的に利用できるようになってきた。

表３に、エンジアリング・ワークステーション及びパーソナル・コンピュータの性能事例を示す。

当社は、ＡＮＣＨＯＲをＳファミリへ移植することにより、ＵＮＩＸ環境下で利用できるようにした。

また、ＡＮＣＨＯＲの開発で得た技術をベースにパーソナル・コンピュータで利用できるＣＨＥＭＴＥＲＭ／ＭＭ・ＭＯを開発した。現在のパーソナル・コンピュータの能力では、分子軌道法計算をパーソナル・コンピュータで実行するのはまだ無理があり、ホスト・コンピュータ（汎用機やＳファミリ等）と連携することにより、実用的に使用できることを意図している。パーソナル・コンピュータの性能向上は著しくパーソナル・コンピュータ単体で利用できる日も遠くはないと考えている。低価格システムを提供することにより、大学等の教育機関での普及を期待している。

一方、材料設計分野や、蛋白質等の高分子の分野では、計算速度のより一層の高速化がもとめられている。当社は、オーストラリア国立大学の化学者等と共同で分子軌道法計算プログラム(MOPAC、AMPAC 、GAUSSIAN86/88)や分子動力学プログラム(AMBER) 等をスーパーコンピュータ用にベクトル化する等高速処理ニーズへの対応も合わせて実現している。このように、より身近に／より速く、の２つのニーズを考えながら分子設計支援システムの開発を進めていきたいと考えている。

表３　ＭＭ２、ＭＯＰＡＣ計算（最適化オプション指定）における
ＥＷＳ及びパソコンの性能事例

計算	分子名	原子数	CPU時間（秒） ＦＭＲ７０	CPU時間（秒） Ｓ３３００	
ＭＭ２	ブタジエン	１０	２２	８	ＦＭＲ７０
	シクロヘキサン	１８	３２	１３	：パソコン
	アダマンタン	２８	５０	２１	Ｓ３３００
	セレポート	４３	２９１６	１４２５	：ミニコン

計算	分子名	原子数	CPU時間（秒） Ｓ４／１	CPU時間（秒） Ｍ３８０	
MOPAC	ニコチン	２６	２３３６	４０９	Ｓ４／１
	イミン	１８	３４５	６３	：ＥＷＳ
	ﾌｪﾉｰﾙｲﾐﾝ	２６	１４０４	２５８	Ｍ３８０
	ビタミンB6	２３	９８６	１６６	：汎用ｺﾝﾋﾟｭｰﾀ

※ＣＰＵ時間は、計算のオプション、分子構造初期値により大きく
変化するため、機種間の相対比較と考えていただきたい。

学会報告

「1990年情報学シンポジウム」参加報告

工藤喜弘（山形大学工学部）

表題のシンポジウム（1990年１月17，18日、於：日本学術会議講堂、共同主催：日本学術会議の４委員会、日本化学会、他７学会；後援：２２学協会、団体）は、内容が多様でかつ所用で中座することが多くて全体を理解していないのに、石塚英弘プログラム幹事の勧め上手に逃げ場を失って、その報告をすることになってしまった。印象を伝える努力をして任を果したい。

本 Bulletin［ 7(3), p. 9, May 1989］に掲載された目的、内容の他に”発表のお願い”に次の主旨の文章があった。「プログラム委員会ではたとえば次のような内容の発表を特に勧誘してはどうかの案が出ていることを申し添える：１．ハイパーメディア、マルチメディア、　２．人文社会科学分野への適用研究、　３．地図情報処理」。

初日は特別講演１件、「マルチメディア情報」４件、「生物・医学情報」５件、「情報システムの開発に向けて」５件であった。二日目は特別講演１件、「人文社会系データベース」６件、「環境系データベース」３件、「理工系データベース」３件であった。最後に約40分の総括（坂井利之）が行なわれた。

初日の特別講演（藤原譲”情報学の現状と展望”）では、通信理論やデータベース論を統合する情報学の充実、発展の必要性が強調された。所属する分野が違うからという前置きで用語の意味の確認から質問が始まり、質疑応答が活発になされた（ようであった）。二日目の特別講演（渡辺茂”情報学に期待するもの”）では、今日の情報の概念を構築してきたとする歴史上の人物の思想の現代的意味の検討が行なわれ、参加者は静かに拝聴した。

講演は、専門分野の研究発表から製品の紹介様のものまでいろいろであった。頭蓋骨の図の歴史的変遷を示したり、進化論のミニ討論を展開したり、地球規模でエネルギーの出入りを推計したり、新宿の高層ビル群附近などを空から眺めて行なう分析などを紹介したり、列車はレールの上を走っているのではなく人がきわどく動かしているということを知らしめたり、と目まぐるしく展開する内容を無責任に楽しんでしまった。

データベースの意味表現の講演では、その結論は人間が提起し続けてきた問題で、欲しいのは解答だという指摘があった。題にニューラルネットワークが入る講演はいままで、新しい利器の宣伝、応用の先見性の誇示、正解表示機械作成の報告、問題解析支援機械としての活用、などに分類できたので、今回もその観点から聴いてしまった。

総括では参加者の所属や講演内容の分野の広がりが強調された。まず研究発表者の所属がほとんど重複していない事実が指摘された。それから分野の広がりを示す事例がいくつか引用された。中でも「法律文書（中略）の検索」が工学部で研究されているということで数度言及されたことが、筆者らのものであったので、特に強く印象に残った。

人見知りする筆者にとっては異質の人々に自然に接触できるよい機会であった。100人前後であった参加者の数は現在の２倍程度までは多ければ多いほどこのシンポジウムの価値は増すだろう、などとゆったり掛けながら考えた。　以上

シンポジウム「化学における情報の現状と将来」報告

東海大学開発技術研究所　米田　幸夫

１９９０年1月１９日（金）１０時－１７時にわたって，日本学術会議大会議室（東京都港区六本木）で，シンポジウム「化学における情報の現状と将来」が，日本学術会議化学研究連絡委員会の主催，情報化学部会などの共催で開催されたので，ここに報告したい．　化学研究連絡委員会は学術会議の第４部（理学），第５部（工学），第６部（農学），第７部（医学・薬学）に関係する，広い分野の化学者が委員となり，文字どおり研究を促進するための連絡を行う委員会である．当部会のほか，日本化学研究会・日本農芸化学会・日本薬学会・日本分析化学会・化学工学会・高分子学会・情報知識学会・化学情報協会・日本科学技術情報センターが共催した．　シンポジウム開催の趣旨は，

「化学の全ての分野で，文献検索，事象検索，物性推算，図形処理，分子設計，反応設計などの各領域にわたって，化学に関する情報，特に計算機による情報処理が活用されている．　しかしながら，その利用の基盤となる，知識ベース・システムなどの新しい情報の取扱方の発想，データベースの構築や計算機プログラム・システムの開発は，わが国においては諸外国，特にアメリカにくらべて，著しく遅れていると言わざるを得ない．

特に大学等で化学情報学，情報化学の各基礎的領域での発想の展開・構築・開発・流通を促進することが必要であると考えられるので，小規模なシンポジウムを開催して，これらを促進する方策を討論・検討したい．」　開会の挨拶などに続いて，以下の講演がなされた．（1）千原　秀昭（大阪大学理学部・化学情報協会）「化学における情報の役割」，（2）佐々木　慎一（豊橋技術科学大学副学長）「化学情報の研究促進と教育」，（3）吉田　元二（住友化学工業㈱）「企業における化学情報と大学の研究・教育への要望」，（4）藤原　譲（筑波大学　電子・情報）「化学のデータベースと知識ベースの開発と普及」，（5）野依　良治（名古屋大学理学部）「合成化学研究における諸問題」，（6）梅山　秀明（北里大学薬学部）「薬学における情報の諸問題」，（7）大島　栄次（東京工業大学資源化学研究所）「化学工学における情報の諸問題」，（8）太田　隆久（東京大学農学部）「農芸化学における最近の諸問題」．

引き続いて１時間半にわたって，パネル，「化学における情報システムを発展させるには？」がパネリストに千原，吉田，藤原，野依の各講演者と，田中　信行（東北大学名誉教授・日本事務器（株）），田隅　三生（東京大学理学部）と米田（司会者）を加えて，１００名を越える参加者と共に討論が行われた．

会場は満員の盛況であったが，趣旨からの予想に反して，大学等からの参加者は少数であったのは残念である．　シンポジウムの詳細を紹介する紙面は無いが，部会員には日本化学研究会発行の，予稿・討論・パネルの速記を収録した「報告書」を頒布する．希望者は1，５００円（送料とも）と共に部会事務局まで申し込まれたい．

事務局より：報告書ご希望の方は下記へ、葉書又はＦＡＸにてお知らせ下さい。請求書をつけてお送りします。　101 千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル6F

日本化学会情報化学部会事務局　☎03-258-9813　FAX 03-258-9810

尚、部数に限りがございますので、品切れの時はご容赦下さい。

海外動向

MEETINGS

8-13 April 1990.
American Crystallographic Association Annual Meeting.
New Orleans, LA.
Contact: Cheryl Klein, Department of Chemistry, Xavier University, 7325 Palmetto Street, New Orleans, LA 70125 (504-486-7411; BITNET: CLKCM@UNO).

17-27 April 1990.
NATO Advanced Study Institute: Applications of Charge-Density Research to Chemistry and Drug Design.
Sant Felui de Guixals, Costa Brava, SPAIN.
Contact: Prof. G. A. Jeffrey, Dept. of Crystallography, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260 (FAX: 412-624-1882).

19-20 April 1990.
2nd York Meeting on Generation of 3-D Structures from Distance Information and Annual Meeting of the Molecular Graphics Society.
York. UNITED KINGDOM.
Contact: Dr. R. E. Hubbard, Chemical Department, University of York, Heslington, York YO1 5DD, UNITED KINGDOM.

22-27 April 1990.
199th ACS National Meeting.
Boston, MA.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

7-9 May 1990.
OSC Workshop on Theory and Applications of Density Functional Approaches to Chemistry.
Columbus, OH.
Contact: Jan K. Labanowski, Ohio Supercomputer Center, 1224 Kinnear Rd., Columbus, OH 43212-1154 (614-292-9279; FAX: 614-292-7168; BITNET: JKL@OHSTPY;INTERNET: jkl@osc.edu) or Jan W. Andzelm, Cray Research, 1333 Northland Dr., Mendota Heights, MN 55120-1095 (612-681-3449; FAX: 612-681-3605; INTERNET: jwa@cray.comp).

7-9 May 1990.
21st European Congress on Computer Applications in the Chemical Industry.
Den Haag, THE NETHERLANDS.
Contact: Dr. J. M. van der Kamp, KIVI, 23 Prinsessegracht, 2500 GK Den Haag, THE NETHERLANDS.

21-23 May 1990.
Second Naples Workshop on Bioactive Peptides.
Capri, ITALY.
Contact: Prof. Piero Andrea Temussi, Departimento de Chimica, Via Mezzocannone, 4, 80134 Naples, ITALY.

22-23 May 1990.
Fourth Molecular Modelling Workshop.
Darmstadt, WEST GERMANY
Contact: Prof.Dr. Brickmann, Dept. of Physical Chemistry, TH-Darmstadt, Petersenstrasse 20, D 6100 Darmstadt, WEST GERMANY.

3-7 June 1990.
Second International Meeting on Chemical Structures.
Noordwijkerhout, THE NETHERLANDS.
Contact: Dr. Wendy A. Warr, Manager, Information Services Section, ICI Pharmaceuticals, Mereside, Alderley Park, Macclesfield, Cheshire SK10 4TG, UNITED KINGDOM.

3-7 June 1990.
26th Annual Meeting of the Drug Information Association.
San Francisco, CA.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002, (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

7-9 June 1990.
International Conference on Chirality.
Cancun, MEXICO.
Contact: Mary Jo Richards, Conference Secretary, 341 Schrenk Hall, University of Missouri at Rolla, Rolla, MO 65401 (314-341-4429).

12-13 June 1990.
Computer Modelling of Polymers: Predicting Properties Before Synthesizing.
Atlant. GA.
Contact: The Program Division, Technomic Publishing Co., Inc., 851 New Holland Ave., Box 3535, Lancaster, PA 17604 (717-291-5609; FAX: 717-295-4538).

17-21 June 1990.
International Joit Conference on Neural Networks.
San Diego, CA.
Contact: Nomi Feldman, Meeting Management, 5665 Oberlin Dr., Suite 110, San Diego, CA 92121 (619-453-6222).

25-27 June 1990.
Dynamics and Kinetics of Myoglobin and Hemoglobin.
Bethesda, MD.
Contact: Martin Karplus, Dept. of Chemistry, Harvard University, 12 Oxford St., Cambridge, MA 02138

25-29 June 1990.
1990 QCPE Workshop on Computational Chemistry.
Geneva, SWITZERLAND.
Contact: Quantum Chemistry Program Exchange, Dept. of Chemistry, Room 204, Indiana University, Broomington, IN 47401 (812-855-4784; FAX: 812-855-5678; BITNET: COUNTSR@IUBACS).

1-6 July 1990.
9th Annual International Conference of the Molecular Graphics Society.
Uppsala, SWEDEN.
Contact: Dr. B. Bywater, Molecular Biophysics Dept., Pharmacia AB, S-75182 Uppsala, SWEDEN.

2-5 July 1990.
Architecture and Algorithms in Condensed Phase Simulations.
St. Andrews, SCOTLAND.
Contact: Dr. D. J. Tidesley, Dept. of Chemistry, The University, Southampton S09 5NH, UNITED KINGDOM.

8-13 July 1990.
33rd IUPAC International Symposium on Macromolecules.
Montréal, Québec, CANADA.
Contact: IUPAC Macro 90 Secretariat, Dept. of Chemical Engineering, McGill University, 3480 University St., Montréal, Québec H3A 2A7, CANADA (FAX: 514-398-

6678).

8-14 July 1990.
1990 European Computational Chemistry Workshop.
Oxford, UNITED KINGDOM.
Contact: Anna Morris, Continuing Professional Development Unit, Rewley House, 1 Wellington Square, Oxford OX1 2JA, UNITED KINGDOM.

8-14 July 1990.
World Association of Theoretical Organic Chemists.
Toronto, Ontario, CANADA.
Contact: WATOC Congress 1990, c/o Department of Chemistry, University of Toronto, Toronto, Ontario, CANADA M5S 1A1.

15-21 July 1990.
The Frontiers of Theoretical Chemistry.
Halifax, Nova Scotia, CANADA.
Contact: Prof. R. J. Boyd, Dept. of Chemistry, Dalhousie University, Halifax, N. S. B3H 4J3 CANADA (902-424-8883; FAX: 902-424-2319; BITNET: BOYD@DALAC).

17-21 July 1990.
1990 Gordon Conference on Computational Chemistry.
Plymouth, NH.
Contact: William Jorgensen, Dept. of Chemistry, Purdue University, West Lafayette, IN 47907 (317-494-5260) or John McKelvey, Eastman Kodak Research Laboratories, 66 Eastman Ave., Bldg. 82, Rochester, NY 14650 (716-477-3335).

19-28 July 1990.
IUCr 15th General Assembly and International Congress.
Bordeaux, FRANCE.
Contact: Prof. M. Hospital, Lab de Cristallografie, Université de Bordeaux 1, 351 Cours de la Liberation, 33405 Talence, FRANCE.

23-27 JULY 1990.
Expanding Frontiers in Polypeptide and Peotein Structural Research.
Whistler, British Columbia, CANADA.
Contact: Dr. V. Renugopalakrishnan Harvard Medical School, Department of Orthopedic Surgery, 300 Longwood Avenue, Boston, MA 02115 (617-735-8413).

29 July-3 August 1990.
10th International Biophysics Congress.
Vancouver, CANADA.
Contact: Mr. L. Forget, Congress Manager, 10th International Biophysics Congress, National Research Council Canada, Ottawa, Ontaria, CANADA K1A ORG.

6-10 August 1990.
10th International Congress on Physical Organic Chemistry.
Haifa, ISRAEL.
Contact: Prof. Yitshak Apeloig, Dept. of Chemistry, Technion-Israel Institute of Technolgy, Haifa 32000, ISRAEL.

11-15 August 1990.
The Fourth Protein Society Symposium.
San Diego, CA.
Contact: Mark K. Woods, Dept. of Biochemistry, SJ-70, University of Washington, Seattle, WA 98195 (206-526-9936).

26-31 August 1990.
200th ACS National Meeting.
Washington, DC.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington,

DC 20036.(202-872-4396).

28-31 August 1990.
コンピュータの材料科学・工学への応用　国際会議・展示会(CAMSE '90)
連絡先：CAMSE '90 事務局　〒101 千代田区九段北1-8-10　日刊工業新聞事業局内 (03-222-7162, FAX; 03-221-7137)　詳細は本号国際会議欄参照

2-8 September 1990.
21st European Peptide Symposium.
Platjad'Aro, SPAIN.
Contact: Ms. Fina Armengol, 21st EPS Secretariat, BRP, Pau Claris 138, E-08009 Barcelona, SPAIN.

16-20 September 1990.
Computational Chemistry 1990.
Orlando, FL.
Contact: Lynn McDaniel, Al Tek International, Inc., 8321 N. Woolsey, Portland, OR 97203 (503-289-7735).

18-20 September 1990.
Scientific Computing & Automation Conference and Exhibition.
Philadelphia, PA.
Contact: Elsevier Science Publishers, P. O. Box 330, 1000 AH, Amsterdam, THE NETHERLANDS.

18-22 September 1990.
Conference on Computers in Chemistry.
Wroclaw, POLAND.
Contact: Dr. P. Misiak, "Computers in Chemistry", Institute of Organic and Physical Chemistry 1-4, Wyb. Wyspianskiego 27, 50-370 Wroclaw, POLAND.

15-20 October 1990.
ELMAU 3: Computational Methods in Chemical Design.
Schloβ Elmau, WEST GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a.d. Ruhr, WEST GERMANY.(49-208-30-64-88 ; FAX: 49-208-30-46-07).

1-4 November 1990.
Molecular Modelling in Drug and Protein Design (part of International Conference of IEEE Engineering in Medicine and Biology Society).
Philadelphia, PA.
Contact: Dr. Janardan S. Yadav, Dept. of Information Services and Technologies, University of Medicine and Dentistry of New Jersey, 185 S. Orange Ave., Newark, NJ 07103 (201-456-3657).

12-16 November 1990.
SUPERCOMPUTING 1990.
New York, NY.
Contact: Dr. Joanne Martin, IBM, T. J. Watson Research Center, P. O. Box 218, Yorktown Heights, NY 10598 (914-945-3285)

28-29 January 1991.
Sixth Biennial Workshop on Computer-Assisted Chemistry.
New Orleans, LA.
Contact Babu Venkataraghavan, Lederle Laboratories, Middletown Rd., Pearl River, NY 10965 (914-732-3406) or Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

14-19 April 1991.
201st ACS National Meeting.
Atlanta, GA.

Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

13-17 May 1991.
Eleventh Internationhal Meeting of the Molecular Graphics Society.
Chapel Hill, NC.
Contact: Dr. Fred Brooks, Jr., Dept. of Computer Science, University of North Carolina, Chapel Hill, NC 27599 (919-962-1931).

30 May-9 June 1991.
Static, Kinematic and Dynamic Aspects of Crystal and Molecular Structure.
Erice. Trapani, ITALY.
Contact: Prof. L. Riva Di Sanseverino, Diparimento de Scienze Mineralogiche, Piazza Porta San Donato 1, 40126 Bologna, ITALY.

17-20 June 1991.
27th Annual Meeting of the Drug Information Association.
Washington, DC.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

21-26 July 1991.
American Crystallographic Association Annual Meeting.
Toledo, OH.
Contact: Alan Pinkerton, Dept. of Chemistry, Univ. of Toledo, Toledo, OH 43606 (419-537-4568).

25-30 August 1991.
201st ACS National Meeting and 4th Chemical Congress of North America.
New York. NY.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

18-22 November 1991.
SUPERCOMPUTING 1991.
Albuquerque, NM.
Contact: Raymond L. Elliott, MS B-260. P. O. Box 1663, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545 (505-667-1449).

国際会議

International Conference & Exhibition on Computer Applications to Materials Science and Engineering

コンピュータの材料科学・工学への応用
国際会議・展示会
Computer Aided Innovation of New Materials

会期：1990年8月28日(火)～31日(金)　4日間
会場：サンシャインシティ・コンベンションセンターTOKYO(東京・池袋)
主催：コンピュータの材料科学・工学への応用国際会議組織委員会
〔組織委員長：堂山昌男(東京大学名誉教授)〕
日刊工業新聞社

新素材や先端材料の研究開発にコンピュータの利用が必須条件となっている今日、これらの研究・開発に携わる世界各国の研究者、技術者が一堂に会し、新しい材料設計システムと新材料創製のためのコンピュータ支援システムの構築等をテーマに情報交換を行います。なお、同時に展示会(入場料500円)も開催いたします。

▷**会議規模**：論文発表　約400件（口頭発表・ポスター発表）
参加予定　1,000名（海外200、国内800）
▷**使用言語**：英語

(シンポジウムの内容)

I．計算機支援による材料設計
●セラミックス、ガラス、合金、ポリマー、有機化合物、薬品、蛋白質、生体材料、半導体、複合材料等：
●可能な方法の総合（現象論的相関、物理に基づいた相関、*abinitio*計算等）
●材料設計の実用的観点（信頼性、寿命予測、毒性予測等）

II．材料プロセスの診断、シミュレーション、総合
●化学反応パス、輸送過程、反応速度論、有機反応機構、発光反応、精錬／鈍化、量子デバイス、デバイス／プロセス・シミュレーション、ULSIプロセス・デザイン、凝固／結晶成長、焼結、ニアネットシェイピング、ノベル・プロセス、合成デザイン、射出成形、流れ解析、熱応力解析

III．計算材料科学工学
III－1．材料のための計算物理、化学、力学（構造とその関連性質の理解のために）
●電子、原子、分子、微視的・巨視的見地、格子欠陥等：
●バンド構造、分子軌道法、分子動力学、モンテカルロ・シミュレーション、分子力学、ヘテロ構造、状態図、相安定性等：
●精度、予測（寿命、毒性等）
III－2．手段／基盤構造
●データベース、知識ベース、エキスパートシステム、人工知能、グラフィックス、スーパーコンピュータ等：
●発想支援、データのライフ・サイクル、付加価値生成、データ及び知識の意味論等

▷**参加登録料（プロシーディングス代含む）**
100,000円（企業1事業所の最初の1名）
47,000円（大学、官公立研究所・企業1事業所の2名以降）
21,000円（1日参加費、論文発表者に限る、但しプロシーディングスを含まない）
17,000円（学生、但しプロシーディングスを含まない）

▷**応募論文**
発表希望者は、著者名、所属団体、勤務先住所、電話番号、およびファクシミリがある場合はその番号を記載の上、英文アブストラクトのオリジナルを1部とコピー2部をCAMSE '90事務局宛、1990年4月30日までにお送り下さい。

プロシーディングス用最終原稿（招待論文は6頁まで、寄稿論文は4頁まで・図表、写真も含む）は1990年7月28日までに事務局必着でお願い致します。論文は、未発表、未出版のものに限ります。論文審査に合格された方にはフォーマット・ペーパーをお送り致します。

▷**事務局**
日刊工業新聞社事業局内CAMSE' 90国際会議事務局
〒102 東京都千代田区九段北1－8－10　TEL 03－222－7162　FAX 03－221－7137

The Montreux 1989 International Chemical Informsation Conference & Exhibitionに参加して

豊橋技術科学大学
船津公人

１９８９年9月２６日から２８日の３日間スイス・モントルーで表題に示した国際学会が開催され、筆者も参加し自動構造推定システムＣＨＥＭＩＣＳの最近の研究成果の講演とデモンストレーションを行う機会を得た。参加者数は約３００名、ヨーロッパ全土の情報化学に関係する主要な人々、特に企業からの参加が多かったと主催者は語っていた。開発されたソフトウェアは多かれ少なかれ、現実の問題に対して役に立つものでなければならない。この国際学会の目的はソフトウェア研究・開発を実用という観点から眺めることにあると謳われている。したがって単に口頭による研究発表のみならずそれに対応したデモンストレーションを会期中実施することを半ば当然のこととして義務づけている。この主旨に沿って、会場地階デモンストレーション会場には２５程のブースが設けられ多くの参加者の興味を引くところとなった。ちなみに筆者は主催者側に用意してもらったＶＡＸstation 3500の上でＣＨＥＭＩＣＳの最新版のデモンストレーションを行った。本国際学会のプログラムを別に掲げておいた。今回の主題は、合成設計、分子設計、データベース、構造推定などであるが、特に興味深い点は特許関係の発表に一日を当てている点であろう。さて、デモ会場で受けた印象を少し述べさせてもらう。参加者と説明者、説明者と説明者のいづれの場合でも、相互の立場を認め、競争し、必要な情報交換を非常に活発に行っているように思われた。また各ブースでの説明はそのシステムに極めて習熟した者によって行われており、単なる受け売りの説明では決してない事に感心せざるを得なかった。この学会で私の得た認識の一つは、欧米特に欧州は化学情報関係の独自の圏を築いているようだという事である。この意味で全般的にみて日本は化学関連ソフトウェアの開発では孤児の感を否めまい。世界をうならせる数多くのソフトウェア開発の業績が日本の化学情報の分野からも更に報告される必要があるのではなかろうか。しかも、研究と実用の両面からのアプローチがとられてこそ、化学におけるコンピュータの利用という主題の目的の一つを完結したことになろう。今回の国際学会は運営形式に顕著なように講演とデモンストレーションを対にするという化学情報に関わる者（利用者、開発者を問わず）にとって必要な視点の一つを具体的に提供していたように思う。

なお、学会予稿集は「 The Montreux 1989 International Chemical Informsation Conference Proceedings」と指定する事でSpringer-Verlagより入手可能である。また本学会は明年も同じ時期に行われるとの事であり詳細な情報は運営を担当している Infornortics Ltd (住所：9A High Street, Calne, Wiltshire, SN11 OBS, Great Britain) にお問い合わせ下さい。

THE PROGRAMME

Tuesday 26 September

09.00–10.30 ISSUES IN CHEMICAL INFORMATION MANAGEMENT

Chairman: Harry Collier, Infonortics Ltd.

Eugene Garfield (ISI, USA)
Chemical Information as a commercial marketplace

Jan Michael Czermak (BFT, W.Germany)
A policy for scientific and technical information in chemistry

Jacques-Emile Dubois (ARDIC, France)
Molecular information knowledge: the future of chemical information systems

11.00–12.30 SYNTHESIS PLANNING AND DESIGN OF BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS

Chairman: Nicolas Grandjean, L.E.R.S. Synthélabo

William Milne (NIH/ NCI, USA)
Use of molecular modelling in a drug design laboratory

Herbert Gelernter (SUNY, Stony Brook, USA)
Building a very large knowledge base for organic synthetic chemistry

Gilles Moreau (Roussel-Uclaf, France)
Industrial drug design: realities and prospects

14.30–16.30 APPROACHING THE END USER

Chairman: Kay Pool, Maxwell Online

Angela Haygarth Jackson (Britain)
Introducing and managing end-user systems

Engelbert Zass (ETH, Zürich, Switzerland)
Chemical information education

Heinz Karl Kaindl (Sandoz, Switzerland)
An integrated information system for the bench chemist

Mildred Green (TDS, USA)
Obtaining chemical, environmental and chemical engineering data with Numerica

Wednesday 27 September

09.00–10.45 PATENTS & REGULATIONS

Chairman: Everett Brenner

Elisabeth Thouret-Lemaître (Synthélabo, France)
Information and strategy in patenting

Steven Jellinek (Jellinek, Schwartz, USA)
Information needs for TSCA and FIFRA

Edlyn Simmons (Merrell Dow, USA)
Interpreting a patent claim

Angelo Rolandi (Istituto G. Donegani, Italy)
Patent information and documentation in Italy

11.15–13.00 PATENT INFORMATION RETRIEVAL — 1

Chairman: Pierre Buffet, Télésystèmes-Questel

Stuart Kaback (Exxon Research, USA)
Patent searching ain't what it used to be

Claus Suhr (BASF, W.Germany)
Hypertrophic generic structures in patent claims: an extravagance and a remedy for it

Nancy Lambert (Chevron Research, USA)
Patent statistics searching: practices and pitfalls

Henri Dou, Parina Hassanaly and Luc Quoniam (University of Marseille, France)
Easy mapping classification of patent references with microcomputers

14.30–16.30 PATENT INFORMATION RETRIEVAL — 2

Chairman: Anne Girard, Institut Français du Pétrole

Michael Lynch, Geoffrey Downs, Valerie Gillet and John Holliday (Sheffield University, Britain) and Winfried Dethlefsen (BASF, W.Germany)
Generic chemical structures in patents — an evaluation of the Sheffield University research work

Kathleen Shenton (Derwent, Britain)
Patent retrieval: towards simplicity or complexity?

Catherine Roesch, INPI, France
Design and production of a pharmaceutical patent database: a patent office experience

Annemie Nuyts (European Patent Office, the Netherlands)
Present and Future EPO systems for automation of the search in Directorate General 1: EPOQUE, BACON and CAESAR

Thursday 28 September

09.00–11.30 FACTUAL DATA AND DATABASES

Chairman: Stephen Heller, US Dept of Agriculture

Clemens Jochum, Laszlo Domokos (Beilstein Institute, W.Germany) and Helmut Maier (Softron, W. Germany)
Chemical substructure searching on CD-ROMs

David Lide (NIST, USA)
Numerical databases for chemists: present and future

John Barnard (BCI, Britain)
Standard representations for chemical information

Jean-Pierre Gay, Henri Alardo (Télésystèmes-Questel, France)
Integrating standard database management system functionalities and structure handling capabilities

J. Bérdy and M. Kertész (Institute of Drug Research, and Szenzor Management & Consulting Co., Hungary)
Bioactive natural products database: an aid for natural products identification

13.30–15.30 ADVANCED COMPUTER APPLICATIONS

Chairman: Mervyn Richardson, Chemical Information Group, RSC

Peter Willett (University of Sheffield, Britain)
Processing of chemical structure databases using parallel computer hardware

Robert Ledwith (CAS, USA)
A Chemical Abstracts knowledge base for information retrieval

Richard Feldmann (NIH/ DCRT, USA)
Computer hardware and graphics for the 1990s

Kimito Funatsu and Shin-ichi Sasaki (Toyohashi University, Japan)
Automated structure elucidation system — Chemics

文献紹介

本号迄の紹介文献一覧

CICSJ Bulletin

Vol. 7, No. 3

Quantitative Structure-Activity Relationships
1988 Vol. 7, No. 4

Journal of Chemical Education
1988 Vol.65, No. 12～ 1989 Vol. 66, No. 1

Journal of Computational Chemistry
1989 Vol. 10, No. 2

Journal of Molecular Struorture
1989 No. 194

Vol. 7, No. 4

Tetrahedron Computer Methodology
1989 Vol.1, No.2

Journal of Computational Chemistry
1989 Vol. 10, No.3 ～ No.4

Journal of Molecular Structure
1989 No. 195 ～No. 196

Computers & Chemistry
1989 Vol. 13, .No.3

Journal of Computer-Aided Molecular Design
1989 Vol. 3, No.1～No.2

Journal of Chemical Education
1989 Vol. 66, No. 3

Journal of Molecular Graphics
1989 Vol. 7, No. 1

Journal of Mathematical Chemistry
1989 Vol. 3, No. 1

Vol. 7, No. 5

Journal of Computational Chemistry
1989 Vol. 10, No.5

Journal of Molecular Structure
1989 No. 197

Journal of Mathematical Chemistry
1989 Vol. 3, No. 2

Journal of Chemical Education
1989 Vol. 66, No. 6

Quantitative Structure-Activity Relationships
1988 Vol. 8, No. 1

Vol. 7, No. 6

Journal of Molecular Structure
1987 No. 156 ～1989 No. 192までの抜粋
1989 No. 198

Journal of Computer Methodology
1989 Vol. 1, No.3～1989 Vol. 2, No.1

Journal of Molecular Graphics
1989 Vol.7, No.2

Journal of Chemical Information and Computer Sciences
1989 Vol. 29, No.3

Journal of Chemical Education
1989 Vol. 66, No. 7

Journal of Computational Chemistry
1989 Vol. 10, No.6

Computers & Chemistry
1989 Vol. 13, No.4～1990 Vol. 14, No.1

Quantitative Structure-Activity Relationships
1989 Vol. 8, No. 2

Vol. 8, No. 1

Journal of Chemical Information and Computer Sciences
1989 Vol. 29, No.4

Journal of Chemical Education
1989 Vol. 66, No. 9

本 号

Journal of Computational Chemistry
1989 Vol. 11, No.1

Journal of Molecular Graphics
1989 Vol.7, No.3 ～ No.4

Journal of Chemical Information and Computer Sciences
1990 Vol. 30, No.1

Journal of Mathematical Chemistry
1989 Vol. 3, No. 3 ～ No. 4

Quantitative Structure-Activity Relationships
1989 Vol. 8, No. 3

Journal of Chemical Education
1989 Vol. 66, No. 10

Tetrahedron Computer Methodology
1989 Vol. 2, No. 2

Journal of Computational Chemistry

Volume 11 Number 1 January/February 1990

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1990年第30巻第1号（2月） 論文題目、著者、頁

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1989年第3巻第3号（7月） 論文題目、著者、頁

Review

The recognition of polyhex hydrocarbon radicals, *G. G. Hall and J. R. Dias,* p. 233

Papers

Global sensitivity analysis of nonlinear chemical kinetic equations using Lie Groups: I. Determination of one-parameter groups, *C. E. Wulfman and H. Rabitz,* p. 243

Global sensitivity analysis of nonlinear chemical kinetic equations using Lie groups: II. Some chemical and mathematical properties of the transformation groups, *C. E. Wulfman and H. Rabitz,* p. 261

Notes

On the three-dimensional Wiener number, *B. Bogdanov, S. Nikolic and N. Trinajstic,* p. 299

On the investigation of the low-energy conformatonal space of molecules, *C. Tosi, R. Fusco, L. Caccianotti and V. Parisi,* p. 311

Open problems in mathematical chemistry: Problem 1, *P. G. Mezey,* p. 321

1989年第3巻第4号（12月） 論文題目、著者、頁

Special Paper

C. A. Coulson's work on a contour-integral approach to the London theory of magnetic susceptibility of conjugated molecules, *B. O'Leary and R. B. Mallion,* p. 323

Papers

Factors determining athe direction of the stereoselection process in the gemeralized Frank model, *I. Gutman,* p. 343

Moments and characteristic polynomials of bipartite Hückel Graphs, *Y. Jiang and H. Zhang,* p. 357

Notes

Propagator representation for partial structure character in conjugated systems, *K. Sakurai and K. Kishimoto,* p. 377

Proof of the generalized expressions for the number of perfect matchings of polycube graphs, *H. Narumi and H. Hosoya,* p. 383

Enumeration of Kekulé structures in benzenoid by hydrocarbons: "Flounders", *R. Tosic and S. J. Cyvin,* p. 393

Computing the characteristic polynomial of a tree, *B. Mohar,* p. 403

Open problems in mathematical chemistry: Problem 2, *P. G. Mezey,* p. 407

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

1989年第8巻第3号（9月） 論 文 題 目 、 著 者 、 頁

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

OCTOBER 1989 Vol. 66, No. 10

TETRAHEDRON COMPUTER METHODOLOGY

1989年第2巻第2号 論 文 題 目 、 著 者 、 頁

Contents of Disks 6 to 9

Disk 6: CONTENTS contains all READ.ME files of all disks describing each file in detail; *.ASC, ASCII text files of each paper; VASQUEZ.MSS, TCM ASCII format for paper by Vasquez; *.DOC, ChemText® format for papers by Jun and by Dill.

Disk 7: SELLO1.DOC and SELLO2.DOC, the ChemText format files for the papers by Sello.

Disk 8: RESCHA2 subdirectory: program and data files for the Sello papers. READ.ME, describes the files; RESCHA2.FOR and RESCHA2.VAX is FORTRAN source for IBM PC and VAX®; *.CMN, FORTRAN COMMON INCLUDE files; RESCHA2.EXE, IBM PC executable; GRES1-3.MOL, MDL MolFile© input data files for alanine dipeptide, aminodeoxyribose, and *m*-catechol dianion, resp.; GRES1-3.OUT, output produced from GRES1-3.MOL by RESCHA2.EXE on PC; GRES1-3VAX.OUT, output from VAX execution.

REALDOS subdirectory: READ.ME, INITRD.EXE initialization program and REALDOS.EXE runtime program from paper by Dill (for IBM PC).

HBA subdirectory: program and data for HBA algorithm by Jun; READ.ME, describes the files; HBA.PAS, Turbo Pascal® source code of the algorithm; HBA.COM, executable code for IBM PC; *.HBA, demonstration input text files.

Disk 9: Macintosh® format contains CONTENTS, *.ASC, *.MSS text files of papers.

RESCHA2 folder: program and data for Sello papers: RESCHA2.FOR, RESCHA2.VAX, *.CMN, FORTRAN source for IBM PC and VAX; *.MOL, MDL MolFile input data files, *.OUT, output from IBM PC execution; *VAX.OUT, output from VAX execution.

HBA folder: program and data for Jun's paper on the HBA algorithm; READ.ME describes the files; HBA.PAS, the Turbo Pascal® source for the program; DEMO*.HBA, demonstration input text files.

TCMTE6 2 (2) 75-128 (1989)

新会員勧誘にご協力下さい

職場、家庭を問わず、また日、欧を問わず、みんながワープロを使い、ブック型、ノート型パソコンもかなり普及してきて、いつも電子文房具が視野に入るようになってきた現在、化学者のコンピュータに関する意識も年毎に変わってきていると思います。この背景の中で、化学情報、計算機化学などの情報化学に関心をもっている人、これからは化学の分野でも情報化学が不可欠だと思っている人などが多数にのぼることは、情報化学部会編集委員会が行ったデルファイ方式のアンケートや情報化学部会についての最近の問い合わせにも見られます。

情報化学部会として、研究活動と情報交換の範囲をさらに広げ、内容もより充実させるために、会員増加をはかりたいと願っています。お知合いの方々をぜひお誘い下さい。

問合先：〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル 6階
　　　　（社）日本化学会　情報化学部会　事務局　電話(03)258-9815

ちなみに、平成元年度に次のような活動をしました。

1．第12回情報化学討論会開催（平成元年11月8～10日　豊中市，千里協栄ホール）
2．CICSJ Bull., 7,(1989) No.1～No.6（隔月）特集記事を含め203頁の編集・出版
3．セミナー関係
　第２回情報化学夏期セミナー－情報化学入門－（平成元年8月24～25日　神戸市，YMCA六甲研修センター）
4．研究会・ワークショップ
　1）化学物質名の機械処理に関する研究会　第１回（平成元年10月27日　東京都千代田区，中央大学駿河台記念館）
　2）新しい領域としてのケモメトリックス－その現状と将来展望（平成2年1月22日　東京都文京区，お茶の水女子大学）
　3）化学命名法ワークショップ　第２回　－命名の歴史から機械処理まで－（平成2年1月26日　東京都千代田区，日本科学技術情報センター）
5．日化年会関係
　第５８春季年会　化学情報・計算機化学部門を企画・担当
6．協力関係
　1）1989環太平洋国際化学会議(PACIFICHEM '89)情報化学関係部門への協力
　2）シンポジウム「化学における情報の現状と将来」（平成2年1月19日 東京都港区，日本学術会議）参加協力

（総務担当幹事　藤枝修子（お茶女大））

****

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。

本誌に適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須田町１－９　教信木田ビル６階
社団法人　日 本 化 学 会　情報化学部会　事務局
電話 (03) 258-9813

****

日本化学会事務局 仮事務所のお知らせ

日本化学会事務局は新化学会館竣工までの間、下記において業務を行いますのでお知らせ致します。

何かとご不便、ご迷惑をおかけいたすと存じますが、何卒ご協力を賜りますようお願い申し上げます。

記

①仮事務所住所

〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル 6，7 階
（郵便物は旧住所でも届きます）

②電話番号

東京(03)258-9811（代表）

総務部：(03)258-9812
業務部：(03)258-9813（部会事業一般、部会誌編集）
経理部：(03)258-9814
会員部：(03)258-9815（部会入退会、送本）
編集第一部：(03)258-9816
編集第二部：(03)258-9817
会館建設室：(03)258-9818
常務理事室：(03)258-9819
図書室関係：(03)258-9811

②ファクシミリ番号

(03)258-9810

編集後記

３月４月は人事異動の時期。情報化学部会幹事の交代により、編集委員会でも副委員長の石田嘉明氏(旭硝子)が退任され、後任に四居靖彦氏(第一製薬)が就任された。

一年前、本務多忙や長期にわたった任期、本誌も軌道に乗って順調になったことなどを理由に、委員長の鈴木先生(筑波大)はじめ、内野(東工大)・田辺(化技研)・宮原(三井東圧)各氏が退任された。この危機を救って下さったのは石田さんであった。

本務多忙を理由に委員長を固辞され、任期はあと一年と宣言された石田さんは、新しい企画を次々と立案実行していかれた。まず、文献紹介に J. Mol. Structureを追加し、ＣＣＳ(コンピュータ・ケミストリ・システム)シリーズを創設して執筆者を選定し、さらにデルファイ法アンケートによる「21世紀の情報化学の重要テーマと実現時期」を立案し結果を取りまとめた。そして最後にネットワーク特集の執筆者を推薦された。また、これ以外にも何か困ったことが起きた時は常に適切な意見を述べられるなど、その功績は大きかった。このように何年分もの仕事をされた石田さんに、実質上の委員長の名を贈りたい。

この一年間で、新任の今井委員(学習院大)、小出委員(IBM)も慣れ、特集や他の企画に力を発揮されている。新たに強力メンバー四居氏を迎えて、さらに本誌を充実させていきたい。今後とも会員各位の一層のご協力とご鞭撻をお願いする次第です。

（編集委員長　石塚英弘）

ISSN 0913-3747

CICSJ Bulletin

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

ネットワーク　特集号

日本化学会
情報化学部会
Volume 8, Number 3
May 1990

目　　　次

特集：ネットワーク －ＬＡＮを中心として－

編集委員会からの前書き

最近，ネットワーク，特に構内ネットワーク（ＬＡＮ：Local Area Network）が注目され，あちらこちらで使われるようになってきた．そこで，本誌で特集を組むことになったが，内容をどうするかが問題となった．たとえば，「コンピュータや通信の細かい技術的な話になってしまうと歓迎されない」，「部会員が一番知りたいのは，化学への応用事例であり，実際にどのように役に立つのかということであろう」，「化学会社は，導入検討中か，あるいは導入後さほど時間が経っていない段階である．そのため現時点では，公表して差しつかえないような具体的な事例は未だ少ないのではないか」，「導入検討中やこれから利用する人にとっては，ネットワークとは何かが分かる入門的なものも必要である」等々の議論が編集委員会の中で行われてきた．そして昨年来，検討と関係方面への問い合わせを繰り返した結果，特集の内容は入門的なものとし，化学会社の実施例を中心とする特集は別の機会に譲ることにした．

ネットワークは，コンピュータ資源を有効に共用するために考え出された基盤的な枠組みである．従って，化学に直接役立つのは，枠組みの上で動く化学向きのソフトウェア（化学向きのアプリケーション・プログラム）ということになる．そこで入門的な特集としては，まず枠組みについて解説し，その後で化学への応用のヒントとなる事例を紹介することとした．なお，枠組みの話は化学者にとっては専門外のことになるので，概念的な解説から技術的な解説に順次移るように配慮した．

まず，ネットワークとは何か，なぜ注目されているのか，そして，ネットワーク技術に関する入門的な事柄などを，日本ＩＢＭの佐賀氏に書いていただいた．分かりやすく書かれているので，この方面の知識のない読者にも読みやすいであろう．

次に，ＬＡＮの中で最もよく使われているイーサーネットについて，立場の異なる二人の方に書いていただいた．まず，この分野が専門で導入経験も豊かな長谷部先生（図書館情報大学）に，システム導入者の立場から解説していただいた．そしてシステム提供者の立場からは，『研究所のネットワークシステム基盤』という題で㈱ソリトンシステムズに解説していただいた．イーサーネットとそれに関連する技術のうち化学者にとって必要かつ重要な点は，現状における問題点も含めて，この２つの解説の中に書かれている．

そして，化学への応用のヒントとして，イーサーネットを使った分散型研究開発支援システムの例を日本電気㈱の塩川氏に紹介していただいた．このようなシステムが各社で開発されることによって，ＬＡＮは化学者にとってより身近なものになっていくであろう．

なお，ＬＡＮで使われる用語には，イーサーネットとIEEE規格802.3 のように意味的には同じでも表現が異なるものがある．そこで参考までに，紙面の余白を使って一口解説を試みた．用語の詳しい意味については本特集の解説をご覧いただきたい．

最後に，お忙しい中ご執筆いただいた各位に改めて御礼申し上げます．この特集が情報化学の発展に寄与すれば幸いである．

（文責　石塚英弘）

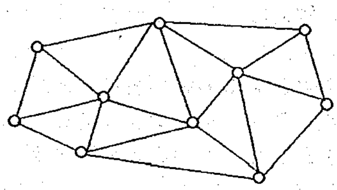
ネットワーク・システム技術

日本アイ・ビー・エム（株）
システム・センター
第二通信システム技術担当
佐賀 啓一郎

１． ネットワークについて

ネットワークという言葉が分野を越えた流行語のように使われています。
人間の関係から企業間まで、ある物と物の関係を表現する際に良く使われます。
ネットワーク、別な言葉で"網"、形で表すと次のようなものです。

ネットワークに含まれる基本の要素は、ノードとリンクです。右の図でノードは"○"、リンクは"－"の部分です。

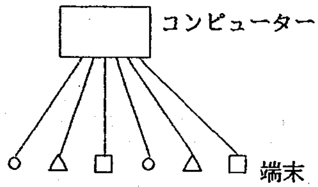


これから情報処理の世界でこのネットワークがどのようになっているか見ていきます。

１．１ オンラインからネットワークへ

情報処理の分野でネットワークが利用されたのは、国内では１９６４年の東京オリンピックが最初になります。その後銀行のオンライン処理を初め多くの分野で活用されるようになりました。１９６０年代から１９７０年代初めのころの情報ネットワークは概ね次の用なものでした。

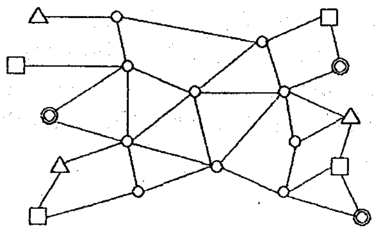
中央にコンピューターを配し、遠隔地の端末との間を通信回線で接続しています。



この時代の情報ネットワークは、"網"というよりは一本釣の釣糸で構成されていました。 その釣糸が切れるとコンピューターの利用は出来なくなります。
またこの時代の、データ処理の形態は中央集中型でデータは全てコンピュータと端末の間を行ったりきたりしていました。

その後オンライン処理が普及し、システムが社会生活の中に浸透するにつれ、一本の釣糸ではシステムを支えがたくなり、最近ではネットワークは文字どうり次のような構造に移り変わってきました。

○、△、□、◎ はコンピューターから分散処理装置、端末までネットワーク上のノードになります。 それらのノード間を文字どうり網目模様に通信回線を張り巡らしています。



このネットワーク構造の主な特長は次の通りです。
・全てのノードが中心
・リンクが切れてもネットワークは切れない強い構造
・特定の型にこだわらない柔軟性
・拡張性、ネットワークとネットワークをつないでもネットワーク
・データのやりとりはネットワーク上のノード間で"ＡＮＹ　ｔｏ　ＡＮＹ"型

１．２　大人と子供の会話から、大人と大人の会話へ

ネットワークの上で行なわれている事を、一言でいうとコミュニケーションと言うことが出来ます。例えばコンピューター上のプログラムと遠隔地の端末との間で情報を交換する事がそうです。端末からデータを入力し、コンピューター上のプログラムでそのデータを処理し、結果を端末の利用者に表示するというのが最も多いコミュニケーションです。

これまでのコミュニケーションのほとんどが、このプログラムと端末という構図の上で行なわれてきました。利用者との間でデータの入出力を行ない、プログラムとデータの交換を行なう端末と、端末上のデータの受渡の制御とデータの処理を行なうプログラムという関係です。ここで行なわれているコミュニケーションは端末が理解出来るデータ形式をプログラムで用意して行なうという方法です。これはは人間のコミュニケーションで考えると、大人（プログラム）が子供（端末）が理解出来る言葉（データ形式）を使い会話すると言えます。子供が何時までも子供でいればこれで構わない訳ですが、最近の技術革新で、端末も子供と同じように成長し今では大人と同じ能力を持つようになって来ますと、何時までも子供が理解出来るヴォキャブラリーだけでコミュニケーションを行なっていたのでは不都合が生じてきます。そこで、大人（プログラム）と大人（プログラム）が会話をする時代になってきました。このことは情報システムで目差しているコミュニケーションは正に大人と大人の会話をコンピューターの上で実現しようとしているとも言えます。

１．３　そしてネットワークは見えなくなる

ネットワークはインフラストラクチュア！、良く目にする言葉です。
インフラストラクチュア、生活共同体の構造基盤。
都市型社会における、交通システム／エネルギー・システムは代表的なものです。
即ち在る共同体で活動する上で、不可欠なもの、在って当たり前のもの、活動する上でその存在を意識せずに利用しているもの、と言えます。
では今のネットワークは
・遠隔地とコミュニケーションは出来るが、応答時間が遅い
・ネットワーク上の必要なノードとコミュニケーションを行ないたいが仲々出来ない
・使いたいときに使えないし、時々中断する
・床の上をケーブルが蜘蛛の巣のようになっており、何が同なっているのか分らない
等、見たくなくても見えてしまう状況です。
逆にネットワークが本当に便利で使いやすくなればなるほど、ネットワークの存在は利用者の視野から消えていきます。ネットワークをインフラストラクチュアとするには、ネットワークを透明にする技術が必要になるわけです。その技術をシステム技術といいます。

２．　ネットワーク・システム技術

　ここでは、ネットワークがインフラストラクチュアと為るための技術、即ちシステム技術について見ていきます。
　ネットワーク・システムを構成する技術は大きく分けて次の３層の技術構造でみると、良く分ります。

ﾈｯﾄﾜｰｸ・ｼｽﾃﾑ技術層

応用技術層	多様なノード間でコミュニケーションを効果的に行なう技術。 情報通信の目的を実現する技術。
システム技術層	応用技術と通信技術の技術革新の融合を行なう技術。 情報通信の目的と手段の相互依存度を無くする技術。
通信技術層	情報を効率的に伝送する技術。デジタル／光通信技術等。 情報通信の手段を提供する技術。

２．１　通信技術層

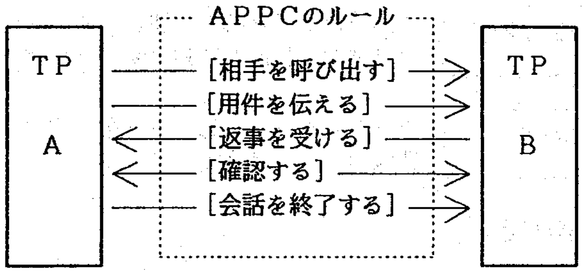
　ネットワーク・システムのベースにあるのが通信技術です。これは元々電信電話の通信技術を利用してきました。ここでは従来のアナログ技術からデジタル技術に大きく変わろうとしています。現在実用化されているデジタル技術ではＩＳＤＮ(Integrated Services Digital Network)により、６４　Ｋｂｐｓから１．５　Ｍｂｐｓまで高速な通信回線を利用出来ます。またビルや工場内で使われるＬＡＮ(Local Area Network)では４　Ｍｂｐｓから、光ファイバーを使ったＦＤＤＩ(Fiber Distributed Data Interface)では１００　Ｍｂｐｓの高速な通信路が使われはじめています。さらに現在のＩＳＤＮの延長に広帯域ＩＳＤＮの実用化をめざして開発が行なわれています。この広帯域ＩＳＤＮでは通信回線は全て光ファイバーになり１５０　Ｍｂｐｓ以上の高速で音声からイメージ／データを多重化して運ぶようになります。さらに通信技術の可能性を考えると、光ファイバーと言うメディアの技術から光の波動性を活用する光通信技術により６０　兆ｂｐｓ(60,000,000,000,000 ﾋﾞｯﾄ/秒)の大容量通信も夢ではありません。
　この様に通信技術はデジタル技術の技術革新により高速／大容量化を実現し、社会生活で流通しているあらゆる情報を伝達する手段を提供していきます。
この技術革新の激しい手段を利用するインターフェースはＣＣＩＴＴ(International Telegraph and Telephone Consultative Committee)やＩＳＯ(International Standard Organization)等の国際的な機関で標準化されています。すなわちこの通信技術層は、通信の基礎技術を国際標準というインターフェースで包んだ層といえます。

２．２　応用技術層

　通信技術の上で実現される応用処理／アプリケーションを支える技術層がこの応用技術層です。応用処理の基本は必要なデータ／情報を集め、必要な処理を行ない利用者に分りやすく結果を提供することです。このなかで必要なデータ／情報を集める／交換する手段として通信技術が必要になるのですが、技術そのものはあくまで手段であり目的が実現出きれば何でも良いわけです。逆に手段が変わっても目的が変わらないかぎり、手段が変わったと言うことに煩わされたくないということは応用処理の本音です。

この応用技術層では応用処理のデータ／情報を集める／交換するという目的を実現するインターフェース／プロトコルを提供します。ここで応用処理に提供されるインターフェースは１．２で述べた"大人と大人の会話"を実現するものであり、手段である通信技術に依存しないものである必要があります。

この応用技術層に対し、ＩＢＭではＬＵ６．２／ＡＰＰＣ(Advanced Program to Program Communication)というインターフェース／プロトコルを考えました。このＬＵ６．２／ＡＰＰＣでは応用処理で通信処理を行なう主体をＴＰ(Transaction Program)というソフトウェアで抽象化し、ＴＰとＴＰの間のコミュニケーションの方式を一定のルールで定めました。このルールをアーキテクチュアという形で普遍化したものがＡＰＰＣインターフェース／プロトコルです。抽象的な説明よりも具体的な例で示すと次の様になります。



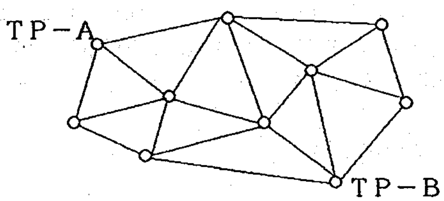
ＬＵ６．２／ＡＰＰＣがアーキテクチュアしたものは特別な事ではありません。上図のように人間同士の会話のルールを情報処理の世界に取り入れただけなのです。ＡＩ(Artificial Inteligence)に対抗する分けでは有りませんが､ネットワークの分野の応用技術層が人間の会話を応用処理の分野に導入しようとしているわけです。ちなみにＬＵ６．２／ＡＰＰＣでは個々のプロトコルをＶｅｒｂと呼んでいます。

２．３　システム技術

通信技術層が通信の技術を国際標準で包み情報通信の手段を提供し、一方の応用技術層は応用処理の情報交換に会話のルールを導入し情報処理の目的を支えているわけですが、ネットワーク構造を構築し"ＡＮＹ　ｔｏ　ＡＮＹ"等の相互接続を可能にする技術がシステム技術層です。別な言葉でいうと、"網／ネットワーク"を作る技術です。

三層構造の真中で、情報通信処理のニーズを支え通信の技術革新に速に対応し、文字どうりの柔軟なネットワーク構造を実現する技術層です。

右図で、ノード間のリンクの部分の技術が通信技術層です。またノード上のＴＰ－Ａ，Ｂ間の会話を実現するのが応用技術層です。



システム技術層ではネットワーク構造を実現し応用処理の会話をサポートします。例えば、

① "相手を呼びだす"：ネットワーク上のＴＰを探しだし、会話が出来る通話状態にする。　ＴＰは会話の相手が誰かだけを知っていればよく、どこにいるか知る必要はない。

② 最適ルート選択：ＴＰ間の会話が行なわれる最適な経路を選択する。

③ 代替経路選択：会話中にリンクが切断されて会話できなくなっても他のリンクを動的に利用する。

④ ネットワークの拡張：ノードの追加、リンクの構成変更をネットワークを停止することなく実現

⑤ 交通整理：縦横無尽に流れる各種のデータ／情報量に対しネットワークの渋滞を発生させず速に交通整理を行なう

⑥ 片側三車線：データの経路は片側三車線、高速レーン／中速レーン／低速レーンと目的別にリンクを論理分割する

等、ネットワークの特長、『強い／切れない／柔らかい／"ＡＮＹ　ｔｏ　ＡＮＹ"』を実現し、ネットワークを情報社会のインフラストラクチュアにする技術がシステム技術層の役割です。

ＩＢＭではこのシステム技術層に対して、ＡＰＰＮ(Advanced Peer to Peer Networking)技術でインフラストラクチュアの実現を目差します。

２．４　第四のネットワーク・システム技術：ネットワーク管理

これまで述べたネットワーク・システム技術はネットワークを構築し、利用する技術でした。ネットワーク・システム技術で忘れてならないシステム技術、それがネットワーク管理技術です。どのような最新技術を駆使したネットワークでも、もしそのネットワークを管理する技術がなければ、最新技術の効果はいかされません。即ち、ネットワーク管理はネットワーク・システムの目的を明確にし、その目的を満たすようにネットワーク・システムを運用管理する技術といえます。ＩＢＭの考えるネットワーク管理はさらに次の目標を掲げてネットワーク管理技術実現を行なっています。

① 利用者に高品質サービスの提供

② ニーズ、技術への速な対応

③ 経済性の追及

ＣＮＭ(Communication Network Management)はＩＢＭが考えるネットワーク管理技術の指針であり、アーキテクチュアです。

３．　情報ネットワークについて

ネットワークという言葉は多種多様な関係を示す際に使われていると言いました。この関係に沿って多くの物が流通している分けですが、そのなかで量的に一番大きいのが情報と言えるかもしれません。その殆どは河を流れる水のように使われることなく終わっているのではないでしょうか。情報ネットワークは何れは人間社会の上にあるあらゆるネットワークに沿って発生する大量の情報を処理し新しい文化を生み出し得る、そんな魔法の道具といったら言い過ぎでしょうか。ＳＮＡ(Systems Network Architecture)は本気でそんなことを考えています。

構内ネットワークとイーサーネット

長谷部 紀元

図書館情報大学

コンピュータ・ネットワークが科学技術の研究の分野でも，コンピュータ技術の進歩に伴って普及してきました．本稿ではコンピュータ技術の進歩と密接な関連のある構内ネットワーク (LAN)，その中で最もよく利用されているイーサネットと，その利用について紹介します．

1. ワークステーションと構内ネットワーク

コンピュータの中でも進歩が著しいのは，スーパーコンピュータと並んで，ワークステーションの分野です．ワークステーションはパソコンに近い小規模・低価格でありながら，計算速度では汎用大型機に匹敵する能力を持っています．ソフトウェアの面でも，パソコン並の使い易さで，大型機を凌ぐ強力な機能を実現しています．並列に進行する独立した仕事の，文字情報と図形情報を複数のウィンドで同時に表示できる，大きなディスプレーがその特徴です．

ワークステーションは，コンピュータを知的作業を伴う全ての分野の仕事に，汎用的に利用することを目的に設計されています．当初はXerox社によってオフィス・オートメーションの分野を対象に開発され，その後科学技術の研究の分野で普及しました．最近は金融業などの事務分野でも急速に広まっています．

ワークステーションはパソコンと同様に個人単位に使用するためのものです．ただパソコンとちがって，組織の中での専門的な仕事に使用することを目的にしています．多数のコンピュータを分散配置して，情報の処理能力を拡大するのですが，情報までも分散してしまっては組織的な仕事が困難になります．それでワークステーション間で情報の交換・共用を容易にする手段が，本質的な重要性を持つことになります．

一方でスーパーコンピュータのように，特殊な用途に適するコンピュータも増えています．また従来汎用大型機と呼ばれてきたものも，データベース・システムなどに専門化する傾向にあります．これらの用途の異なるコンピュータ間で機能を分担するために，情報の転送・共用の手段がやはり重要です．

ここで使用する通信技術には，通信速度がコンピュータの処理速度に対応して高速であること，多様な使用形態に柔軟に実現できること，が必要です．一方接続対象のコンピュータは，建物内あるいは敷地内のように比較的狭い範囲に集中しています．構内ネットワーク (LAN, Local Area Network) と呼ばれる通信手段は，このような条件に適した情報の通信・共用の手段として開発され，普及してきました．

構内ネットワークは利用者からみた場合，銀行オンライン・システムに代表されるような，従来の通信ネットワークの中心であった広域ネットワークと，かなり違った特徴を持っています．際だっているのは，広域ネットワークが特定のコンピュータ間での通信を主な対象としているのに対して，構内ネットワークでは多数のワークステーション全ての間の自由な通信を可能にすることです．両者の特徴をまと

めると下の表1のようになります.

表1. 構内と広域のネットワークの比較

	構内ネットワーク	広域ネットワーク
通信速度	0.1 – 100 Mbps	9.6 – 64 kbps
通信距離	1 – 10,000 m	1 – 10,000 km
利用形態	1000台程度のコンピュータ間で自由に通信	主として1対1の通信
通信線路	同軸ケーブル, 光ファイバー	公衆通信網

(M は 10^6, bps は1秒間の転送ビット数)

2. 構内ネットワークの方式

構内ネットワークは限られた範囲で使用するので, 通信速度の必要に応じた自由な通信線路を利用できます. また通信の制御方式も利用形態に応じた多様なものが考えられています. 通信方式の代表的なものにイーサネット (Ethernet) とトークン・パッシング (token passing) があります.

2.1 イーサネット

イーサネットは Xerox 社などによって 1980 年代の初めに開発されたもので, 単純であって使い易くまとめられた方式です. 構内ネットワークでは, 多数が共用する1本の通信ケーブルを混乱なく使用するために, 各時点で, どのワークステーションが送信する権利を持つかを決定する必要があります. イーサネットでは CSMA/CD (carrier-sense multiple-access with collision detection) と呼ばれる方式で, 各ワークステーションが自発的に送信権の有無を決めます. この方式では送信の開始前と途中に, イーサネットが空いているか, 他のワークステーションからの送信データと衝突 (collision) していないか, を通信ケーブルの状態から調べ, 衝突が起きたら決まった手順で送信権の調整をします. この方式は簡潔に設計されているので, ネットワークの制御装置は簡単なもので済みます. 故障があった場合にも, それがネットワーク全体に波及することはほとんどありません.

しかし衝突の有無の判定の必要上, 通信ケーブルの全長で決まる信号到着遅延時間による無駄があり, ネットワーク規模と通信速度をあまり大きくすることができません. また各ワークステーションからの送信要求データ量がネットワークの通信能力の上限に近づくと, 送信要求の衝突の多発のために, 実効的な通信速度が極端に落ちてしまう不安定さがあります.

イーサネットは現在普及しているワークステーションの処理速度 (10 MIPS 程度) の要求にマッチした通信速度を実現していながら, 安価で使い易くできています. 例えばネットワークの稼働を止めることなしに, 新しいワークステーションを接続することもできます. それでワークステーションのある場所には必ずと言っていいくらい普及しています. 最近ではパソコンやさらには端末を, 従来普通だった無手順方式 (RS-232C) による接続に替えて, イーサネットで接続することも増えています.

表2. 構内ネットワークの方式の比較

	イーサネット	トークン・パッシング
送信権の確立方式	CSMA/CD	トークンの授受
網制御装置と接続作業	簡単, 安価で容易	複雑で高価
障害耐久性	高い	普通
通信速度	10 Mbps	4 – 100 Mbps
通信信頼性	普通	高い
ネットワークの規模	小・中規模	大規模

2.2 トークン・パッシング

トークン・パッシング方式では，送信権を示すトークンをネットワーク上で巡回させることによって送信権を確立します．送信要求を持つワークステーションは，トークンがやってきたときに，それを送信データで置き換えて送出します．受信したワークステーションは元のトークンに戻して，次の送信要求に備えます．この方式ではネットワーク規模に制限がなく，またその通信能力を確実に最大限度まで利用することができます．しかしトークンを巡回させるための制御装置は複雑になります．高価になる傾向をさけがたい上に，これが故障した場合には，ネットワーク全体の機能が停止してしまう弱点を持っています．

トークン・パッシング方式は光ファイバ通信ケーブル上で実現して，高速・大規模のネットワークを構築するときに採用するのが普通です．規模の大きい大学・研究所では，建物規模のイーサネットの間を，トークン・パッシングのネットワークで接続することが多いようです．

以上の2つの方式の性格を表にまとめると上の表2のようになります．

3. イーサネットの詳細

イーサネットの実体は1本のただの同軸ケーブルです．これを建物の中のワークステーションの設置場所に，一筆書き風に張り巡らします．1本の長さは500mですが，リピータ (repeater) によって1,500mまで (先に説明した理由による制限) 延長することができます．このようなイーサネットの形態を図1に示します．

イーサ・ケーブルにはワークステーション毎にトランシーバ (tranceiver) を設置します．この工事は，同軸ケーブルの被覆に穴をあけてトランシーバをネジで固定するだけの，簡単なものです．トランシーバは，ワークステーションからの通信データの電気信号を変換するほか，イーサネットの使用状態，つまり信号のキャリア (carrier) の有無と送信データの衝突の有無をワークステーションに報告します．

ワークステーション内のイーサネット・コントローラは，普通のシリアル通信のコントローラと同内容の簡単なものです．

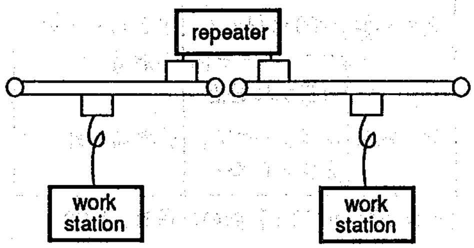


図1.　イーサネットの接続

4. イーサネットの応用

大部分のワークステーションはネットワーク機能に優れたUNIXオペレーティング・システムを採用していて，イーサネットに接続して使用することが普通です．ワークステーションとしての性格上，切り放せない関係にあるともいえます．以下ではUNIXシステムの事例を中心に，イーサネットに代表される構内ネットワークがどのように利用されているかを紹介します．

4.1 リモート・ログイン

これは，端末とホスト・コンピュータでのTSSの組合せという，従来の利用法と同じものです．しかし多数のワークステーションを使用して仕事を進める場合，ベースに使っているワークステーションから，任意のワークステーションへ自由にログインできるのは便利です．

図2にリモート・ログインの実行のようすを示します．見えているのはディスプレーの画面の一部です．下のウィンドの中がリモート・ログインで，イーサネットに接続されたメインフレームの文献検索システムを使用しているところです．残りはワークステーション上で実行

している原稿編集などの仕事の画面です．ほぼ中央にあるグラフは，ワークステーションの稼働状態を示しています．

ここではやっていませんが，ワークステーションの機能を使用すると，あるホストからの出力を他のホストへ入力するなど，有機的な利用ができます．

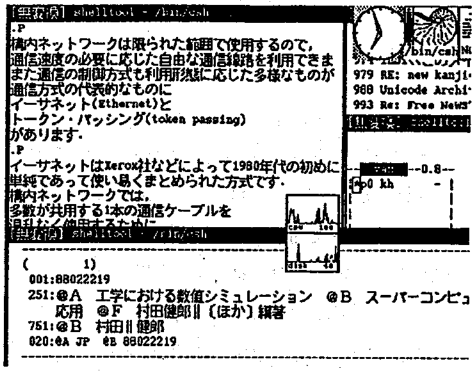


図2. ワークステーションからのリモート・ログインの例

4.2 ワークステーション経由の対話

ネットワークで接続されたワークステーションで仕事をしている任意の相手と対話することができます．相手が物理的にどこにいるかに関係なしに，使っているワークステーションを調べて，話しかけることができるので便利です．

4.3 ファイル転送

ワークステーションでの仕事の途中で，ネットワーク上の任意の場所の間でファイル転送をすることができます．即座に情報が手に入るので，能率的に仕事が進みます．この拡張として，プリンタを管理しているワークステーションへ印刷ファイルを転送するようにして，高価なプリンタを共用することもできます．

4.4 ネットワーク・ファイル・システム

物理的には他のワークステーションの磁気ディスク中に存在するファイル・システムを，自分のワークステーションのものと全く変わりなしに，コマンドやプログラムで使用することができます．実行プログラムのファイルなどにも適用できます． これを NFS (network file system) といいます．このやり方は，情報の共用がネットワーク全体で極めて容易にできる一方，重複コピーの管理の煩雑さがないので，全く便利です．

4.5 ネットワーク管理の自動化

ネットワークには共通に管理するべき情報があります．利用者登録，ネットワークの構成などに関するものです．例えば利用者識別番号に矛盾があると，それを基礎に管理しているファイルのセキュリティが損なわれます．これらの情報は個別のワークステーションが使用するものですが，多数のワークステーション毎に矛盾なく更新することには大きな面倒があります．これを自動化・簡便化するための手段として，YP (yellow page) という一種の分散データベースが準備されています．

4.6 インターネットワーク接続

UNIX システムはイーサネット上の通信プロトコル (接続・通信上の約束) として，アメリカで開発された TCP/IP (transmition control protocol, internet protocol) と呼ばれるものを使用します．インターネット・プロトコル (IP) は名前の通り，建物内や組織内をつなぐ個別のネットワーク間の接続を目標に設計されたものです．上で述べた応用の多くは，このプロトコルを利用して構成されています． それで，UNIX システムを使用して，ネットワークを相互に接続することが容易です．

簡単なインターネットワーク接続の場合には，1 台のインターネット・ルータ (internet router) を隣接した個別ネットワークの双方につなぐだけで済みます．遠距離にあるネットワーク間は広域ネットワークを経由して接続します．広域ネットワークの上では X.25 とい

う別のプロトコルを使用するので，これと2つのTCP/IPによるネットワークの間にゲートウェイ(gateway)を置いて橋渡しをします．インターネット接続によって，構内ネットワーク上の高度の機能が，遠くにある他の構内ネットワーク上のワークステーションとの間で利用できるようになります．これは大変強力です．

図3にインターネットワーク接続の形態を示します．

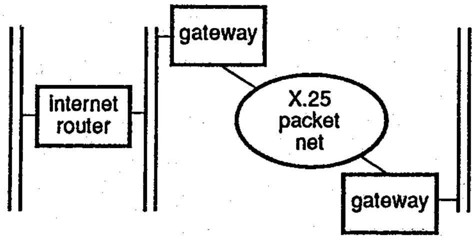


図3. インターネットワーク接続

広域ネットワークとしては，NTTの専用線や，デジタル・データ交換網(DDX)が一般的ですが，私設のパケット交換網も利用されています．大学の環境では，学術情報センターが日本全体に張った学術情報ネットワークがあります．これによって大学内ネットワークを，相互接続することが安い経費でできます．

5. まとめ

イーサネットを主とする構内ネットワークが研究・開発の環境で急速に普及しつつあります．構内ネットワーク間のインターネットワーク接続についても，広範囲な利用を可能にするための，研究プロジェクトのWIDEネットワークなどの試みがあります．アメリカなどでは大学や企業の研究所の間でインターネットワーク接続が既に普及していますが，日本でも近い将来に普通のものになるでしょう．

用語対照リスト・一口解説

イーサーネット：Ethernet．IEEE規格802.3 や ISO規格8802/3になった．この規格は LANアクセス方式である CSMA/CD方式と，物理層の規定から成る．バス型ネットワーク．

トークン・バス：token bus．IEEE規格802.4 や ISO規格8802/4になった．トークン・パッシング方式でネットワークがバス型のもの．

トークン・パッシング：token passing．トークン・リングやトークン・バスで採用しているLANアクセス方式

トークン・リング：token ring．IEEE規格802.5 や ISO規格8802/5になった．トークン・パッシング方式でネットワークがリング型のもの．

ネットワーク・アーキテクチャ：network architecture．ネットワークの構成様式のことで，ネットワークを構成する各要素の接続条件や，要素間で通信する場合の規約（プロトコル)を体系的に定めたもの．

プロトコル：protocol．データ通信を行うために必要な通信規約のこと．

ＣＳＭＡ／ＣＤ：イーサーネットで採用している LANアクセス方式

ＬＡＮ：Local Area Networkの略．構内ネットワークと訳される．

ＯＳＩ：Open Systems Interconnectionの略．開放型システム間相互接続と訳される．ISO が定めたネットワーク・プロトコルの標準で，7層から構成される．

ＳＮＡ：IBM 独自のネットワーク・アーキテクチャ．

ＴＣＰ／ＩＰ：OSI のトランスポート層プロトコルとネットワーク層プロトコルに対応．イーサーネット上で動く代表的なプロトコル．

ＷＡＮ：Wide Area Network の略．広域ネットワークと訳される．公衆網はＷＡＮの一例．

（文責　図書館情報大学　石塚英弘）

研究所のネットワークシステム基盤

㈱ソリトンシステムズ
営業技術部

はじめに

コンピュータネットワークの姿が変貌しつつある。従来のメインフレーム中心のネットワークから、各サイトに分散されたコンピュータ資源を対等に接続するネットワークへ、中心が変わりつつある。従来より、研究所のネットワーク利用ニーズは、各種のニーズの中でも先端的なものであった。事実、ＬＡＮ(Local Area Network)の発展は、米国における大学や企業の研究所ニーズが、牽引者としての役割を負ってきた観がある。例えば、現在ＬＡＮの主流であるEthernetは、もともとＸｅｒｏｘのパロアルト研究所において、研究者が最も使いやすい機能という観点から技術開発されてきた。研究所では、もともと集中的な管理を要するシステムはなじまなかったからかもしれない。個々の研究者が、それぞれのニーズに基づき、必要とするコンピュータ資源を利用することが必須であったからであろう。また、研究者間のコミュニケーションを図る上で、電子メールが早くから活用されてきた。地域が異なる研究者間の電子メールをサポートするために、ARPANETというコンピュータネットワークが全米に張りめぐらされてきた。これが、現在のネットワーク接続技術の源泉になっている。

ここでは、ネットワークを利用する上での基盤という観点から、現在のネットワークの世界を概観することにする。研究所というキーワードが表題にかぶせられているが、必ずしも研究所ということだけではない。但し、元々研究所ニーズが技術開発の原点にあるということから、合致する点が多いのではないかと思われる。

１．ネットワーク伝送路

ネットワークの機能を階層的に整理したものとして、ＩＳＯ(International Organization for Standardization)が標準化したＯＳＩ(Open syatems Inter connection)モデルがある（図１）。最下位層として物理層がある。これは、使用するメディア（ケーブル）や電気的条件などを決めているものである。又、その上の層として、リンク層がある。これは、互いのノードを接続する方法を決めているものである。通常、ネットワークの伝送路としては、この二つの層を視野に入れている。

ネットワーク伝送路は、利用者からは見えないものであり、通常は全体のインフラとして決められるべきものでる。大学などの大きな機関では、基幹ネットワークと支線ネットワークに分けられる事が多い。

最近の傾向としては、基幹ネットに光ファイバーを利用した高速伝送路が選択され、各建屋をループ状につないでいる。現在ＡＮＳＩ(American National

Standards Institute)でＦＤＤＩ(Fiber destributed Data Interface)の標準化が進められている。一方建屋内は支線ネットワークがはられる。支線ネットワークの方式には、イーサネット、トークンリングなどがあるが、研究所では、通常イーサネットが採用されている。ケーブルとしては、同軸ケーブルまたは電話線が使用される。地理的に離れた場所を接続する場合には、ＮＴＴのサービスを使用する。

２．コネクション サービス

コネクション サービスは、ネットワークを通じて、自分以外のコンピュータを利用するための基本的な機能である。研究所では、最近は一般のオフィスでも、様々な計算機、様々なメーカの機械が存在している。ホスト計算機、スーパーコンピュータ、ＵＮＩＸなどのワークステーション、パソコン、ミニコンなどがある。特に研究所では、どのハードウェアを使用するかは、ほとんど問題ではなく、このソフトウェアを使用するから、このハードを入れるというような選択が行われる。

こうした状況で、計算機を相互に接続する技術は、ほんの数年前まで一般的にはなかった。相互接続の約束事を我々はプロトコルと呼んでいる。数年前までは、プロトコルに標準がなく、各メーカが独自に（勝手に）決めていた。米国の国防省(DOD)が調達のために決めたＴＣＰ／ＩＰが、ＵＮＩＸで標準的にサポートされた事によって、現在は、これが実質的な業界標準(De Fact Standard)になっている。ＴＣＰ／ＩＰを利用すれば、他の計算機とだいたい接続できるという状況ができつつある。だいたいというのは、具体的な実装で細かくは差があり、つながらない場合もあるからである。

一方国際機関による標準として、ＯＳＩ規約が定められ、これも具体的にサポートされ始めているが、まだ一般的ではない。まずは、ＴＣＰ／ＩＰを採用し、今後ＯＳＩに移行するかもしれないというのが、一般的な態度である。

このように、コネクション サービスは以前に比べて進歩してきているが、例えばホスト計算機が従来使用しているＳＮＡなどは、全く別のプロトコルとして存在している。パソコンなど自分自身がＬＡＮに直接つながっていない計算機をコネクション サービスに参加させる機器として、コミュニケーションサーバが広く使用されている。コミュニケーション サーバがＴＣＰ／ＩＰあるいはＳＮＡなどのプロトコルを使用して、他の計算機へパソコンなどをつなげる役目を果たしている。

３．ネットワーク オペレーティング システム

伝送路およびコネクション サービスを決定すると、次にどのようなネットワーク オペレーティング システム（ネットワークＯＳ）を使用するかが、問題になる。もちろん、これを意識しない場合もある。例えば、ＵＮＩＸだけを使用している場合には、ＵＮＩＸの標準的なネットワーク機能により、ユーザはネットワークＯＳを意識することがない。しかし、例えば、ＵＮＩＸをサー

バとして、自分のパソコンからこのサーバを使用するようなケースでは、そのような機能を支援するためのネットワークＯＳを、少なくともシステムの導入時に決めておかなければならない。

このようなシステムでは、サーバあるいはパソコンは、自立した閉じた機能を果たすものではない。いわば、そこにつながれている各機器（ノード）全体で一つのシステムを形成している。ネットワークＯＳの果たす役割は、例えばサーバに接続されているファイルを、あたかもパソコンに接続されているように見せる事である。ネットワークＯＳには、マイクロソフトソフト系のＭＳ－ＮＥＴ、その拡張系であるＬＡＮマネージャ、別の系としてＮｅｔＷａｒｅなどがある。大型計算機においてＯＳが重要であるのと同じく、ネットワークを介在させた場合には、ネットワークＯＳの役割が重要になろう。今後、更に進歩が激しいと思われる分野である。

４．電子メール

電子メールは、ネットワークをコミュニケーション手段として使用する場合の代表的なアプリケーションである。電子メールを利用すると、利用者が時間的制約から解放される効果がある。相手が、不在であっても、自分の都合が良い時にメールを出しておけば良い。自分が出したメールおよび相手から来たメール、それらの返信などは、自動的に蓄積される。従って、経過を整理する事が容易にできる。相手が必ず見たかどうかを確認するために、相手がメールを開いた時に自動的に送信者へ、応答が返る機能を持つものもある。また、ワープロで作成した論文や資料をアタッチして送ることもできる。自分が所属するネットワークにＦＡＸサーバがあれば、ＦＡＸを電子メールと同じ操作で自分の端末から送る事も可能である。時差のある国際的なコミュニケーション手段としても電子メールは有効である。

５．インターネットワーキング及び複合的なネットワーク

インターネットワーキングとは、独立したネットワークを接続する事である。ＬＡＮ同士を直接接続する場合もあれば、途中にＷＡＮ(Wide Area Network)を介在させて接続する場合もある。接続する場合には、ブリッジ、ルータ、ゲートウェイなどを使用する。ブリッジは伝送路レベルで接続する。従って接続後は、ネットワークが単一のものとなる。ルータはプロトコルによってネットワークを接続する。接続されたネットワークはそれぞれ独立性を維持している。最近では、セキュリティや信頼性の上からルータで接続する事が多い。但し、コネクション サービスとして、一つのプロトコルに限定しえないケースが多く、幾つかのプロトコルをサポートしているルータを選択すべきである。ゲートウェイは、プロトコルを変換して接続する。

図２に複合的なネットワークの例を示す。ここでは３つの独立したネットワークをブリッジ及びルータで接続している。各ネットワークは、それぞれの都合により、トークンリング、イーサネット、光ファイバーなど多用な伝送路

を使用している。各種サーバ及びＰＣをサポートするコネクションサービス、ネットワークＯＳが導入されている。

おわりに

ネットワーク　システムの基盤という観点から、現在の状況を概観してきた。現在のネットワーク　ブームの背景には、従来のホスト中心型、情報システム部門中央集権型のコンピュータリゼーションが根底から破綻してきたという事実がある。今後は、ネットワーク自体がインテリジェントを高め、例えばこういうことをやるためには、どのサーバをアクセスすればよいかというような事を、ネットワークが答えてくれる時代が来るであろう。個人が、容易に多目的に使用する手段として、共通のインフラとして構築されてくるであろう。しかし、一方では、保全性、信頼性を確保するために、ネットワーク管理手段の重要性を認識しておく事も重要である。

<table>
<tr><th>ﾚｲｱ</th><th></th><th colspan="2">ｻｰﾋﾞｽ</th></tr>
<tr><td>7</td><td>ｱﾌﾟﾘｹｰｼｮﾝ</td><td rowspan="2">ﾈｯﾄﾜｰｸ
ｵﾍﾟﾚｰﾃｨﾝｸﾞ
ｼｽﾃﾑ</td><td rowspan="2">ｱﾌﾟﾘｹｰｼｮﾝ
・電子ﾒｰﾙ等</td></tr>
<tr><td>6</td><td>ﾌﾟﾚｾﾞﾝﾃｰｼｮﾝ</td></tr>
<tr><td>5</td><td>ｾｯｼｮﾝ</td><td colspan="2" rowspan="3">ｺﾈｸｼｮﾝ ｻｰﾋﾞｽ
ｲﾝﾀｰﾈｯﾄﾜｰｷﾝｸﾞ</td></tr>
<tr><td>4</td><td>ﾄﾗﾝｽﾎﾟｰﾄ</td></tr>
<tr><td>3</td><td>ﾈｯﾄﾜｰｸ</td></tr>
<tr><td>2</td><td>ﾃﾞｰﾀﾘﾝｸ</td><td colspan="2" rowspan="2">ﾈｯﾄﾜｰｸ 伝送路</td></tr>
<tr><td>1</td><td>物理</td></tr>
</table>

図 1　ﾈｯﾂﾄﾜｰｸのｻｰﾋﾞｽとOSIﾓﾃﾞﾙ

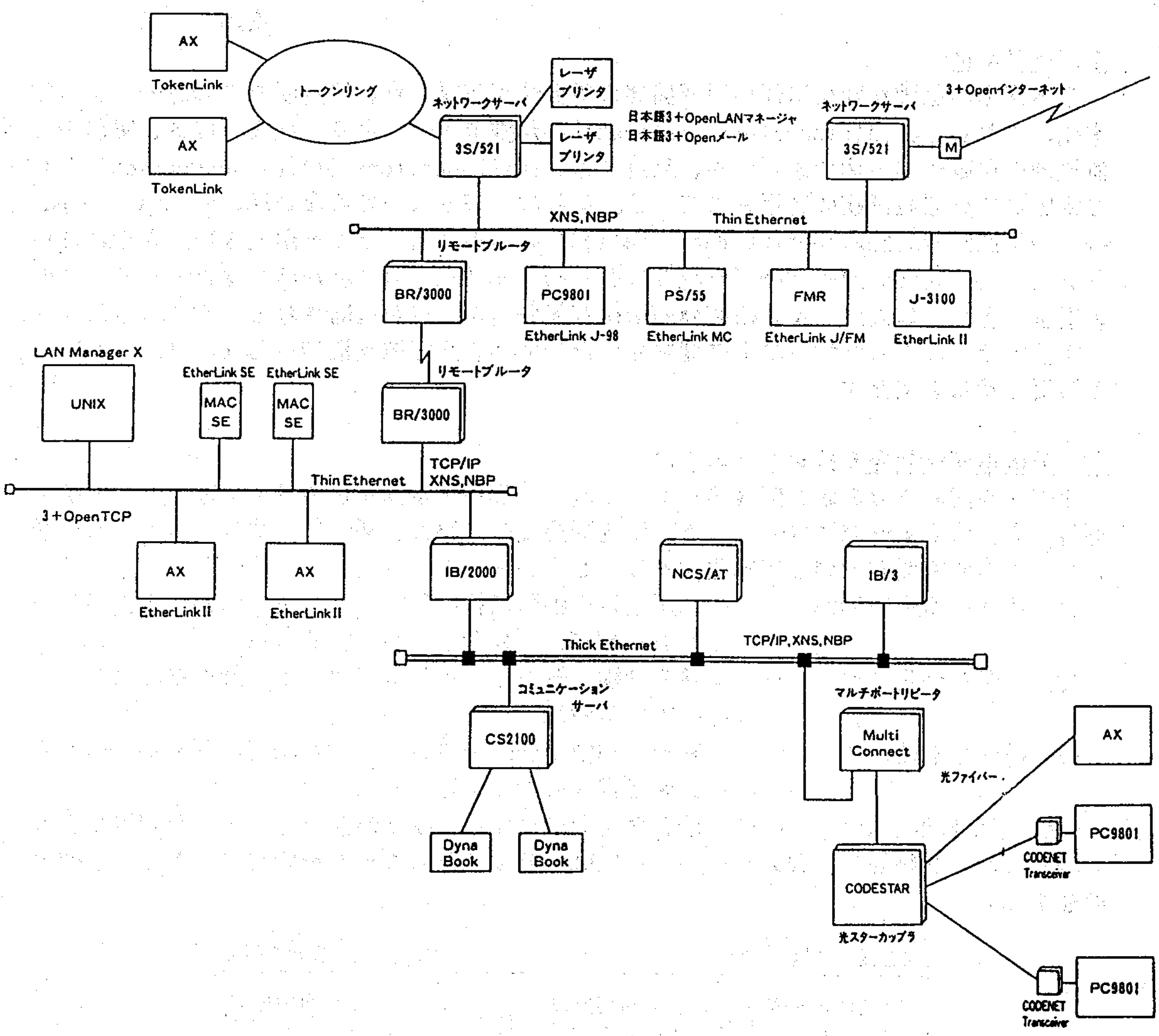


図２　複合的なネットワークの例

分散型研究開発支援システム

日本電気株式会社
塩川　正二

1．はじめに

経済構造の急激な変化に伴い研究開発の重要性が認識され、研究所でのｺﾝﾋﾟｭｰﾀによる効率化、すなわち、LA(Laboratory　Automation)が推進されている。従来、LAは、実験や計測処理の自動化が主体であったが、最近では、LOA(Laboratory Office Automation) として幅広い研究開発業務に適用されている。これは、ｺｽﾄﾊﾟﾌｫｰﾏﾝｽの良いPC(Personal Computer) や高機能EWS(Engineering Work Station) の出現に負うところが大きい。さらに、LAN(Local Area Network)やISDN(Integrated Services Digital Network) などのﾈｯﾄﾜｰｸ技術の進歩により、個人ﾍﾞｰｽ から研究ｸﾞﾙｰﾌﾟや研究所ﾍﾞｰｽ へとLAが展開されるようになった 。

本稿では、こうした背景の中で開発された分散型研究開発支援ｼｽﾃﾑ「micro-RESEARCHER」の概要と特徴を紹介する。

2．分散型研究開発支援システムとは

研究所や試験所での研究開発業務は、一般に、調査・企画から設計・実験を経て解析・報告書を作成するｻｲｸﾙになっている。研究開発支援ｼｽﾃﾑは、図１に示す３つのｼｽﾃﾑに分類され、この研究開発ｻｲｸﾙを短縮化することを目的としている。

(1) 研究情報管理ｼｽﾃﾑ　---　研究所全体の各種情報(研究ﾃｰﾏ 、特許情報、物性情報など) をﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽにより管理し利用するｼｽﾃﾑ

(2) 実験自動化ｼｽﾃﾑ　---　実験の計画を管理し、それに基づいて、計測機器よりﾃﾞｰﾀを収集するｼｽﾃﾑ

(3) 研究者支援ｼｽﾃﾑ　---　実験ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ中のﾃﾞｰﾀ を検索し、ﾃﾞｰﾀ 加工、解析からｸﾞﾗﾌ 表示、報告書作成までを行うｼｽﾃﾑ

micro-RESEARCHERは、この中の研究者支援ｼｽﾃﾑにﾃﾞｰﾀ 収集機能を組み込んだｼｽﾃﾑで、PCやEWS でﾃﾞｰﾀ を評価し、EWS やﾎｽﾄｺﾝﾋﾟｭｰﾀ(NEC ではACOS) でﾃﾞｰﾀ を管理する機能分散型の形態をとる。

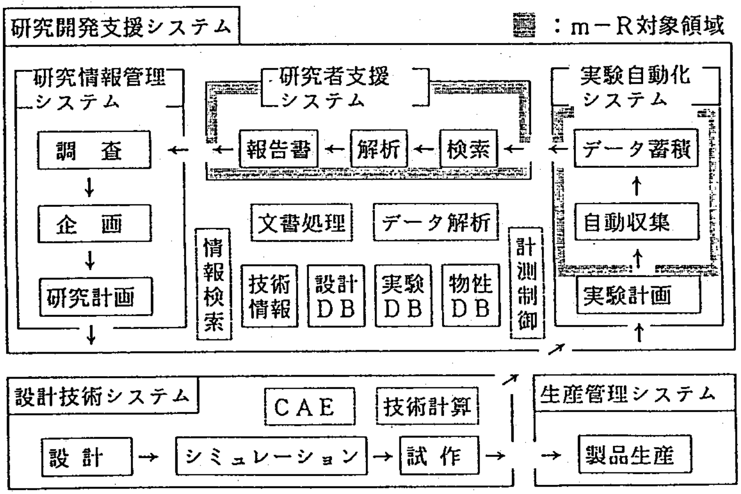


図１　研究開発サイクルと研究開発支援システム

3．分散型研究開発支援システムの構成

micro-RESEARCHERは、PCやEWS でのｽﾀﾝﾄﾞｱﾛﾝ 形態でも利用できるが、PC-EWS-ACOS を有機的に接続することより分散ｼｽﾃﾑとしても利用可能になる。図2に示すように、研究室に数多く散在するPCをEWS で束ね、それらを上位のACOSに接続する。研究所Ａと他の研究所Ｂや工場、営業部門とはISDNによって結び、ﾀｲﾑﾘｰ な情報交換を行う。

micro-RESEARCHERでは、PCとEWS 間をB4680(IEEE802.3)で接続し、TCP/IPのｿｹｯﾄｲﾝﾀｰﾌｪｰｽによりﾃﾞｰﾀ や報告書などﾏﾙﾁﾒﾃﾞｨｱ を双方向転送する。さらに、EWS､PCとACOS間は、拡張ﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑ 間通信機能COM-XEを利用し、ﾌﾟﾛｾｽ間通信を行う。このように、micro-RESEARCHERでは、密結合のMML(Micro-Mainframe Link) を実現しており、EWS やPCからACOS上の実験ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽを直接ｱｸｾｽすることができる。

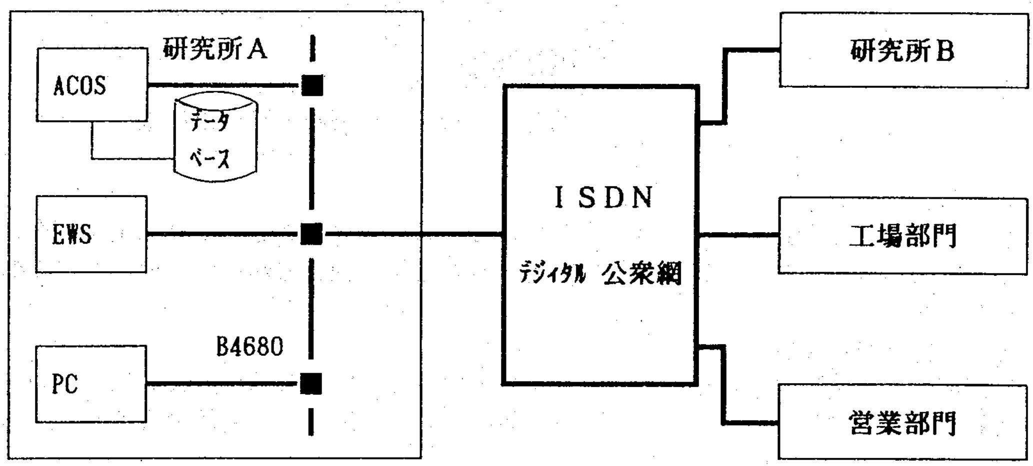


図２　分散型研究開発支援システムのｺﾝﾋﾟｭｰﾀ構成

4．分散型研究開発支援システムの特徴

micro-RESEARCHERは、ﾃﾞｰﾀ 収集から報告書作成までの研究開発業務を支援し、以下の特徴を持つ。

(1) 電子実験ﾉｰﾄ と実験ｷｬﾋﾞﾈによるﾃﾞｰﾀ 管理

PCやEWS 上の電子実験ﾉｰﾄ によって実験ﾃﾞｰﾀ だけでなく、解析結果・研究ﾚﾎﾟｰﾄを一元管理する。ACOS上の実験ｷｬﾋﾞﾈによって複数の電子実験ﾉｰﾄ を束ね、実験ﾃﾞｰﾀ や研究ﾚﾎﾟｰﾄを研究ｸﾞﾙｰﾌﾟ内で共有利用できる。

(2) 豊富なﾃﾞｰﾀ 評価機能

豊富なﾃﾞｰﾀ 加工・解析やｸﾞﾗﾌ 表示機能によりﾃﾞｰﾀ の視覚化や数式化を手軽に行える。また、高品位な研究ﾚﾎﾟｰﾄを短時間に効率よく作成できる。

(3) ﾏﾙﾁｳｨﾝﾄﾞｳによる試行錯誤的なﾃﾞｰﾀ 処理

EWS のm-R では、図3に示すように、ﾏﾙﾁｳｨﾝﾄﾞｳによって実験ﾃﾞｰﾀ やｸﾞﾗﾌ 、解析結果を比較表示しながら解析できる。さらにﾃﾞｰﾀ 解析と報告書作成を同一画面で連続的に実行できる。

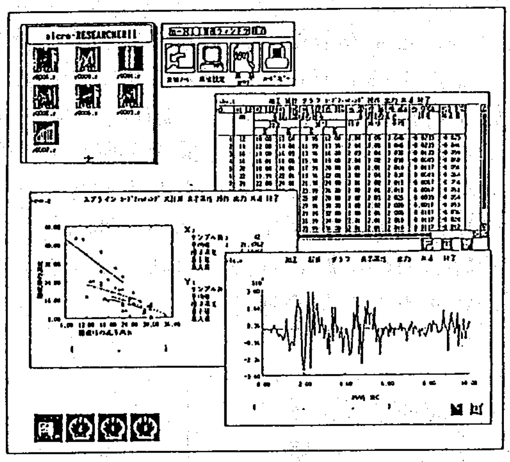


図3　　micro-RESEARCHERの操作例

(4) 定型業務のｶﾀﾛｸﾞ実行

ﾙｰﾁﾝﾜｰｸ 化した研究開発業務は、一連の処理をｶﾀﾛｸﾞ化することにより、人手を介さず自動実行できる。ﾃﾞｰﾀ 収集からﾃﾞｰﾀ 解析、ｸﾞﾗﾌ 表示、報告書作成までのすべての処理をｶﾀﾛｸﾞ化できる。

(5) 容易なLAｼｽﾃﾑの構築

計測機器との接続や利用者ﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑ による解析の追加、DTP(Desktop Publishing)ｿﾌﾄの接続など、LAｼｽﾃﾑの構築とその拡張を容易に行える。図4に一般的な分散型のLAｼｽﾃﾑ例を示す。

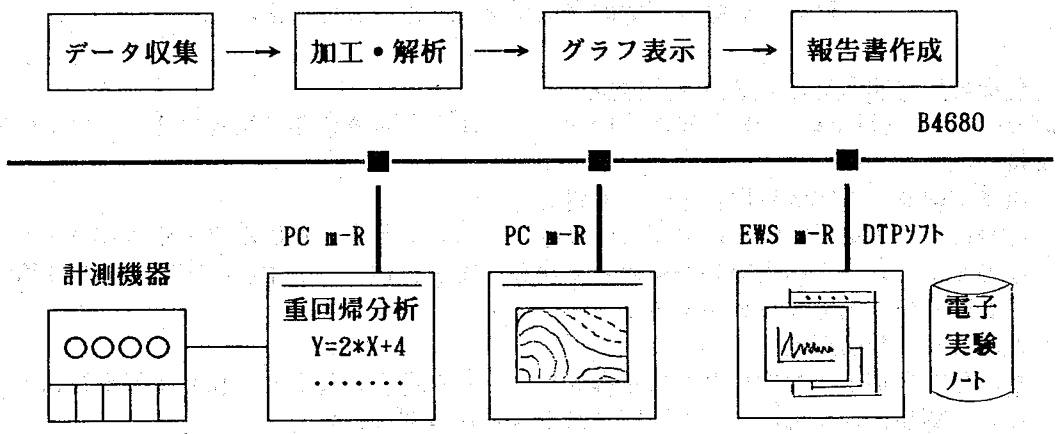


図4　　micro-RESEARCHERによる分散型のシステム例

５．分散型研究開発支援システムの効果

micro-RESEARCHERでは、表１に示すように、ｺﾝﾋﾟｭｰﾀを適材適所に利用し最適な機能分散を行っている。こうしたmicro-RESEARCHERの機能分散には、以下の３つの効果がある。

(1) ﾌｧｲﾙｻｰﾊﾞ としての効果
PCで計測したﾃﾞｰﾀ やPC上で得た解析結果を、EWS やACOSに転送し、大容量ﾃﾞｨｽｸに格納する。研究者は、このﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽを自分のPCから検索し解析する。

(2) ﾃﾞﾊﾞｲｽｻｰﾊﾞ としての効果
XYﾌﾟﾛｯﾀやﾌﾟﾘﾝﾀなどの周辺装置をﾈｯﾄﾜｰｸ上に接続し、各研究者のPCやEWS から共有利用する。

(3) ﾌｧｸｼｮﾝｻｰﾊﾞ としての効果
大量データを扱う時や解析に時間がかかる時は、EWS にデータを転送し、EWS 上で解析する。解析結果は、再びPCに戻し、PC上で結果を確認する。

表１　micro-RESEARCHERの機能分散

項目	PC micro-RESEARCHER	EWS micro-RESEARCHER	ACOS micro-RESEARCHER
利用形態	• ﾊﾟｰｿﾅﾙ 利用	• 研究ｸﾞﾙｰﾌﾟ、ﾊﾟｰｿﾅﾙ 利用	• 研究所、研究ｸﾞﾙｰﾌﾟ
ﾃﾞｰﾀ 管理	• 実験ﾃﾞｰﾀ の整理(ﾃﾞｰﾀ、解析結果、報告書の一元管理) • 計測機器からﾃﾞｰﾀ 収集	• 同左 • 書誌情報、実験条件などを付与し、ﾃﾞｰﾀ を階層的に管理	• 実験ﾃﾞｰﾀ の共有管理（実験ﾃﾞｰﾀﾍﾞｰｽ) • 大容量ﾃﾞｰﾀ の管理
ﾃﾞｰﾀ 評価	• 加工(ｿｰﾄ、ﾏｰｼﾞ、変換） • ｸﾞﾗﾌ(２次元ｸﾞﾗﾌ 、等高線ｸﾞﾗﾌ など) • 解析(統計解析、ｽﾍﾟｸﾄﾙ解析など) • 報告書の作成	• 同左 • 式ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝなど高速演算が必要な処理 • ３次元ｸﾞﾗﾌ など高性能ｸﾞﾗﾌｨｯｸｽ が必要な処理	• 汎用の統計解析ｼｽﾃﾑとの接続

６．おわりに

この数年で、研究開発は、ﾆｰｽﾞ 指向型からｼｰｽﾞ 探索型に変遷している。これに適確に対応するには、分散型研究開発支援ｼｽﾃﾑの中に、研究者の創造性を喚起する要素が必要になる。幸いにも、AI(Artificial Intelligence) や音声入力、さらには、高速ﾃﾞｰﾀ 通信などｺﾝﾋﾟｭｰﾀ技術は日進月歩である。これらの技術を研究開発支援ｼｽﾃﾑに取り込むことにより、研究者の夢を充たす日もそれ程遠くないと確信している。

部会行事

第３回情報化学夏期セミナー
―情報化学・基礎と応用―

主催　日本化学会情報化学部会

日時　８月２９日（水）１３時－８月３０日（木）１１時　（１泊２日）

会場　湯河原厚生年金会館（〒413 熱海市泉１０７　Tel0465-63-3721）

参加申込締切　７月３１日（火）但し定員４０名になり次第締め切らせて頂きます

話題提供

第１日（８月２９日）

１	化合物の構造表現とデータベース	（富士写真フィルム）	花井荘輔
２	これからの分子力学	（藤沢薬品）	今井啓祐
３	分子動力学入門	（京大理）	片岡洋右
４	分子グラフィックス	（システム）	伊賀祐一
＊	フリートーキング（夕食後）		

第２日（８月３０日）

５	ニューラルネットワークの化学への応用	（富士通）	湯田浩太郎
６	コンピュータ化学の応用展開	（旭硝子）	石田嘉明

参加費（資料代および２９日夕食から宿泊、３０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３回情報化学夏期セミナー申込」と題記し、①氏名、性、年齢　②勤務先、職名　③会員資格　④連絡先、電話番号を明記して、下記申込先宛お送りください。

会場の詳細な案内ならびに参加費支払い方法は申込締切後お知らせいたします。

申込先

〒113 文京区弥生２－４－１６　化学情報協会　（Tel03-816-3574）　佐藤明子

内容等の問い合わせ先

〒141 品川区大崎４の２の１６　立正大学教養部　（Tel03-492-3840）　今井　賢

年会報告

第59春季年会報告

1A406　テトラエチリデンシクロブタンの幾何異性の表示法
(群馬大教育、ベルン大薬学研) 飯塚健、J.T.Clerc

EZ則での表示ができない幾何異性を持つ化学構造の例として表記化合物を取り上げ、提案されたez則の適用例が示された。ez則は環の各炭素から二重結合側鎖が対称的に出ている場合に、RS順位則で順位が決まらない構造を扱う。そのために、各側鎖の置換基と環の位置関係をz（右）e（左）で表し、側鎖を右回りに見て、z,eの文字の並びを作り、最大文字列をそのコードとして採用し幾何異性を表す表示とするものである。EZ則の場合は、最大の置換基2つの位置関係を二重結合を基準にして記述したものであるが、このez則は環平面を基準にして当該置換基全部を記述対象としている。計算機とは関係のない研究テーマであるという講演者の前置きであったが、平面上に構造図を正しく書けば素直に計算機で取り扱える問題であり、コードの正準化とあわせて今後の課題とされた。

1A407　パーソナルコンピュータによる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

32ビットパソコン（PC9801RA）に、X線の自動構造解析システム「DIRECT-SEARCHER自動化システム」を移植した結果について報告している。性能的には従来のメインフレームに遜色なくまた経済的かつ手軽（非専門家に対する利用者インタフェースの配慮）に使えるシステムとして実現されている。

1A408　四結合三次元ネットワークのハミルトングラフ表現法と適用例
(群馬大、工) 佐藤満雄

ゼオライト系（四結合）三次元ネットワークのフレームワークがノード数24まではすべてハミルトングラフであることを、独自に発見開発したアルゴリズムによって確認している。これを利用すれば群操作などと合わせて四結合三次元ネットワークを系統的に誘導できる可能性があることになり、無限の広がりを持つ構造をトポロジカルな特徴で単純簡潔に表現する方法として着目される。

1a409　パーソナルコンピュータによる分子動力学計算システム
(北大理) 河村雄行・横川敏雄

スーパーコンピュータの処理対象であった分子動力学の計算システムをパソコン上に実現して実用性能を得ているという報告である。経済性は言うまでもなく、移植性（OPEN文の変更程度ですむ）や使い勝手の良さではパソコンシステムの有用性は非常に高く、X線の解析システム（1A407）と同様に、大規模計算システムにおいても（32ビット）パソコンの利用を本格的に考えてよい時期が到来したことが伺われる報告である。

(神奈川大理　中山　堯)

１Ａ４　２５　複合半導体ガスセンサシステムによる混合気体中の複数成分の同時定量
(豊橋技科大・新日鉄第一技研) 早川泰弘、他

H_2(30-300ppm), ＣＯ(350-3500ppm) 混合ガスの同時定量を、５種の半導体ガスセンサを用いた重回帰モデルにより実行した。重回帰式には、各センサの応答およびガス濃度ともに対数をとって利用している。得られた平均誤差は、Ｈ２，ＣＯに対しそれぞれ1%, 5.9%である。

１Ａ４　２６　有機化合物の自動構造推定システムCHEMICSの開発－COUNTERPART推定への２次元ＮＭＲデータの活用－　（豊橋技科大）船津公人、他

演者らが継続して開発を行っている CHEMICSシステムの改良報告である。構造推定対象分子の一部の構造が既知の場合、２次元ＮＭＲデータを活用して候補構造の絞り込みを行うとともに、必要な計算時間をも大幅に減少させるという内容である。実行の際は、既知部分に確実に帰属されるシグナルを指定する。^{13}Ｃ－^{13}Ｃのシグナル結合情報を自動的に生成するための機能が備わっているため、実用性が高いとのことであった。

１Ａ４　２７　ニューラルネットワークによるスペクトルパターン認識（１）スペクトルの分類　（化技研・ﾌｧｺﾑﾊｲﾀｯｸ）田辺和俊、他

化合物１００種類の赤外スペクトルを認識するニューラルネットを構築している。３層のネットを２段階に重ねて使い、バックプロパゲーション型の学習を行わせている。１段目のネットで１０種に分類した後、２段目のネットで個別分子スペクトルを同定するという考え方である。ピーク認識などの前処理が不用という大きな利点が存在する。一方、データベース検索システムとして見た場合は、新分子登録の度にネットの構造自身が拡大し、再学習が必要になるという問題点を解決する必要があろう。

１Ａ４　２８　多核種ＮＭＲスペクトルデータベース作成（１）コバルト－５９スペクトルデータの標準物質に関する検討　（電通大）山崎

^{1}Ｈ,^{13}Ｃ以外の多核種ＮＭＲスペクトルデータベース作成を目的として、その問題点を探るため、コバルト－59化合物約１０００種に対して、１６００ほどのスペクトルデータを収集し、比較検討を行っている。時代毎の測定法の違いも原因となって、原データそのままをデータベースに収録したのでは、信頼度が低いことが判明した。演者は、一部の物質に対し再測定を行うことにより、旧データを換算するなどの方法で、信頼度を向上させられることを示している。

（関学情報センター　岡田孝）

１Ａ４３１　有機合成設計システムＣＡＳＩＮＯの開発（12）抽象化した逆合成パターンを用いる逆合成パターンを用いる逆合成経路探索モジュールの構成ならびに実行検証例
（化技研）内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古（富士通）矢幡史子（東薬大）原　昭二
20余りの逆合成パターンを用意した有機合成設計システムについての発表。

１Ａ４３２　立体選択的反応の理解のための計算化学の利用（２）．３－オキシエステルの不斉合成反応へのＭＭ２の援用（山形大工）工藤喜弘
ＭＭ２を用いた予測。不斉誘導の因子を探す目的で仮想的に置換基を変えて計算している。ＭＭ２をこの種の予測に用いるのはかなりむずかしいとの印象を受けた。

１Ａ４３３　１，２－ジメトキシエタンとそのメチル誘導体の分子力学計算（京大薬）三輪嘉尚、町田勝之輔
１，２－ジメトキシエタン、１，２－ジメトキシプロパンの各コンホメーションのエネルギー差を分子力学を用いて計算。後者の計算を再現するためにＯ－Ｃ－Ｃ－ＯとＯ－Ｃ－Ｃ－Ｃねじれ角の間に交差項を導入している。

（富士写真フィルム㈱足柄研　藤田眞作）

１Ａ４３４－－１Ａ４３７

１Ａ４３４　分子動力学でグリシンの分子性結晶の構造を予測したという報告である。それが一般的な成功であるかのような結論に対して会場から厳しい批判を秘めた発言があり、同感であった。賛意の表明もあった。

１Ａ４３６　たんぱく質の二次構造の識別率を特徴抽出によって改善したという報告である。方法論、細かいところでは改善という語の意味、などへの自分の理解の見直しが必要であると思った。

１Ａ４３７　チオカーバメート類の殺菌と除草の両活性を同時に増大させる因子をＰＬＳ法で得たという報告である。対象をよく理解して検討すべき因子を適切に絞り込んでおけば、この方法が威力を発揮することを明確に示している。

（工藤喜弘　山形大学）

１Ａ４３８　化学用語・化学物質に関する問題点の現状と将来

化学物質の名前が複雑で分りにくく憶えにくいことが学校教育で化学が嫌われる最大の原因であろう。演者によれば日常用いる慣用名と化学式なり標準的な化学名の二本立てによる化学教育がベストである。しかし、演者の言うように慣用名が種々雑多であり、命名法の体系も様々である現実をどのようにするのか。そのへんの解決の提言が聞かれたらさらに有意義だったと思われる。

１Ａ４４１　化学・特許情報の現状と残された課題

化学はデータベースや情報検索の分野でも大きな比重を占めている。企業では以前から検索部門の専門家がいて依頼を引受けていたが、今日では研究者自ら情報検索に当ることも少なくなくなった。演者によればもれの無い検索（再現率１００％）システムは可能であり、今日の課題は適合率（ノイズをへらす）をあげることである。フリーワード検索でなく、良いファセット分類にもとづいた統制語による検索システムを推奨された。我々一般利用者にとっては、過去、統制語のキーワードに悩まされた思いが蘇りかねないが、使いやすいシステムが普及することを願いたい。特許に関しては検索ではなくて、請求範囲をデータベース化する方法も聞きたい思いであった。

（中外製薬㈱　松浦育敏）

部 会 記 事

常任幹事会報告

第3回　平成元年9月29日（金）　日本化学会会議室において開催

1）企画担当から

1.1）平成２年日本化学会春季年会の化学情報・計算機化学の会場で、ミニフォーラムを開催予定。そのテーマを日本化学会情報化学部会飯塚健・松浦育敏企画幹事宛に１１月１５日締切で募集する。

1.2）研究会開催　「化学物質名の機械処理に関する研究会」
平成元年１０月２７日（金）9:00〜17:00 中央大学駿河台記念館　世話人飯塚健先生（群馬大）。

1.3）高年齢者向け講習会　計画中。

1.4）企業の若手入門者トレーニング講習会　化学の研究者向けと、情報関係で化学の仕事をする人向けの２コースで、化学構造処理からはじめる。花井氏（富士フィルム）より提案があったもの。

1.5）シンポジウム　「化学における情報の現状と将来」の共催
日本学術会議化研連主催。平成２年1月１９日（金）10:00〜17:00　日本学術会議大会議室　世話人米田幸夫先生（東海大）。
詳細は１０月末ごろに決定の予定。

1.6）ワークショップ開催　「新しい領域としてのケモメトリックスーその現状と将来展望」　平成２年1月２２日（月）13:00〜18:00 お茶の水女大理学部　世話人藤枝修子（お茶女大）。

2）編集担当から

2.1）特集を検討中

2.2）1.5)のシンポジウムの話題提供のため、「２１世紀の情報化学の重要テーマと実現時期」のテーマで、デルファイ方式のアンケートを行う。
第１回の締切は１０月３１日、第2回アンケートは１１月中旬に配布、１１月末に回答締切の予定。

3）総務担当より

部会活動のアクティビティーを上げる意味でも、講師は変わってもよいが、カリキュラムを作って、定期的に行う講習会を企画して欲しい。ビギナー、シルバー、アドバンスコースなど。企画は飯塚先生にお願いすることになった。

４）平成２年度役員の件

部会長と副部会長が協議の上、平成２年度の部会長として、藤原譲幹事（筑波大）を推薦され、常任幹事会として了承した。

企画、編集、総務担当の常任幹事は各２名とする。各１名留任し、各１名を新たに常任幹事としてお願いする。

５）平成２年度情報化学部会の予算

予算案について、検討した。

日本化学会建築中の２年間は、臨時会場費、会議費が例年を大幅に上回ることはやむをえないだろう。

平成元年９月２９日現在で、法人部会員は９８社、１２２口になった。

６）部会内規変更案

部会員の種類を正部会員、学生部会員、法人部会員の３種とする。他の２部会（コロイドおよび界面化学部会、生体機能関連化学部会）と共通に、学生部会員を新設し、また、今までの「準部会員」を止める。正部会員の年会費は、日化会員と非会員の区別のみとする。

７）来年度以降の事業計画など

経済的にもやや安定期に入ってきたので、具体的な事業内容などを検討してはどうか。

7.1) ソフト・ハードを購入する。蓄積が必要。保管に問題がある。

7.2) ソフトウエアの普及

会員のソフト（パソコンレベルでもよい）、パブリックドメインなど。

7.3) ＢＢＳ

7.4) 雑誌を購入する

7.5) 日本語テキストの編纂　５年計画で。

7.6) 講演会・講習会の奨励

7.7) 役員旅費

7.8) 関西支部にも活動してもらえる

7.9) ＡＶ化した教材

7.10) 外人の招待

（文責　総務担当　藤枝修子(お茶女大)）

第4回　平成2年1月9日（火）　　日本化学会仮事務所会議室において開催

1．平成元年度　第2回役員会（平成元年11月8日　協栄生命ホール）および第3回常任幹事会（平成元年9月29日）の議事録承認。

2．各担当からの報告

1）編集から

1.1）第2回デルファイ方式アンケートの集計結果を次の CICSJ Bull. に掲載予定。無機・配位化学分野からの返事が少なかった。

1.2）他の次号予定記事として、PACIFICHEM '89 の報告、事務局担当者の変更（森啓一氏から保倉光邦氏へ）、JCPE(日本化学プログラム交換機構)講習会の内容紹介など。

1.3）常任幹事会議事録も今後掲載しよう。

2）企画から

2.1）化学命名法ワークショップ第2回「命名の歴史から機械処理まで」を開催予定（平成2年1月26日（金）　科学技術情報センター会議室）。

2.2）日本化学会第59年会22セクション（計算機化学・化学情報）会場及び第3回情報化学ミニフォーラムのプログラム紹介。

2.3）次年度は、教科書作成の検討を始めたい。

3）総務から

3.1）情報交換の場を多くして、会員の意見・希望を反映するために、拡大幹事会、ワークショップのあとで幹事会を開催するなどを検討する。

3.2）情報化学部会次年度計画に関するアンケートの報告

3.3）役員会、常任幹事会における役員関係事項の年間計画、選出方法の原案検討。

3．平成2年度役員の件

1）次期役員選出方法の確認

1.1）昭和62年第4回役員会議事録に従い、平成元年度の退任幹事を確認。

1.2）「次期役員選出方法（日化情報化学部会）」を確認。

1.3）日本化学会の役員選挙方法を情報化学部会の役員選出に適用することは、会員数が約100分の1でもあり、適切ではない。3．1）1.2)により、次期部会長と次期副部会長は、常任幹事会でバランスを考えて候補者をあげ、役員の投票により選出する。

2）次期役員候補の選出

2.1）3．3）3.2)のアンケート中の幹事推薦者を参考資料として、平成2年度役員候補原案の検討した（2回目）。

2.2）次期部会長候補者として藤原譲氏（筑波大）、副部会長候補者として吉田元二氏（住友化学㈱）および町田勝之輔氏（京大）を投票用紙に記入し、2月9日締切で、役員に投票依頼する（返信は郵送で）。

４．部会内規の確認

「平成元年１１月２７日第４７９回日本化学会理事会決議の情報化学部会内規」を確認。

部会長と副部会長の任期は、当分の間、１期を２年とし、選挙は１年おきに行う。

５．法人部会員勧誘の件

米田部会長にお願いする。

６．その他

１）化学文献データベースサービスについての要望

東大大型計算機センターでは、従量制使用料利用者半額負担方式＊の利用者負担比率を上げるという話であり、米田部会長からの提案で、現状維持の要望書を東大大型計算機センター長宛に提出することを了承した。

註＊　データベースの利用負担金については、科学研究費による開発終了後の55年6月より、接続時間あるいは出力文献数等に比例してセンターが Chemical Abstracts Service に支払うべき従量制使用料のうちの半額を利用者が負担し、センターはその残りの部分とライセンス料全額を負担するとの方式により運用されてきました。

第５回　平成２年２月１５日（木）　日本化学会仮事務所において開催

１．次期情報化学部会役員（敬称略）

１）部会長・副部会長選挙の開票結果

２６名に投票用紙を郵送し、２４名から返送があった。事務局保倉氏を立会人とする開票結果は次の通り。　有効票２４票中

部会長：	藤原　譲（筑波大）	２３票
	白票	１票
副部会長：	吉田元二（住友化学㈱）	２３票
	町田勝之輔（京大）	２１票
	飯塚　健（群馬大）	１票

２）監査　米田幸夫（東海大）　佐々木慎一（豊橋技科大）

３）幹事　地域、企業・大学などを考慮して、２８名の方々に依頼交渉することにした。

２．情報化学部会年間スケジュールについて（別紙へ）

３．日本化学会　部会長・支部会長合同会議の報告

米田部会長から、「コロイドおよび界面化学部会」、「生体機能関連化学部会」の平成元年度の事業内容、部会員数明細などの報告があり、当部会と比較した。

４．各担当の報告および本年度総括

１）編集より

８巻１号は出来上がっている。新しいＦＯＲＴＲＡＮを特集。第１２回情報化学討論会総括、PACIFICHEM '89 の情報化学関係の報告、デルファイ方式アンケート調査「２１

世紀の情報化学の重要テーマと実現時期」の結果報告、コンピュータケミストリーシステム一覧など。

８巻２号　ネットワークを特集、ＣＣＳ(Computer Chemistry System) シリーズなど。

２）企画より

2.1) 主催・共催による開催報告

シンポジウム「化学における情報の現状と将来」（平成２年１月１９日（金））。盛会であった。報告書を作成中。

ワークショップ「新しい領域としてのケモメトリックスーその現状と将来展望」（平成２年１月２２日（月））。４４名の参加者があった。報告は次号以降のCICSJ Bull. へ。

化合物命名法ワークショップ　第２回　「命名の歴史から機械処理まで」（平成２年１月２６日（金））。専門性が高く、参加者はやや少なかったが、有意義な催しであった。

2.2) ワークショップ開催申請書の書式の提案があり、活発に開催されることを希望。

2.3) ワークショップ開催計画中　　1件

2.4) 化合物命名法ワークショップ第３回　４月後半、ＪＩＣＳＴで開催予定。

３）総務より

共催、協賛関係について、今後判断基準を検討すること。

（文責　総務担当　藤枝修子（お茶大））

情報化学部会　**平成２年度総会報告**

日時　平成２年4月1日（日）　１６：３０～１７：３０
場所　神奈川大学横浜キャンパス　３号館　３４２教室

日本化学会第５９春季年会の化学情報・計算機化学の研究発表に引き続き、同じ会場で本年度第１回の総会が開催された。

平成元年度の全体的活動状況として、総会２回、役員会２回、常任幹事会５回、編集委員会６回の開催などが報告された。

平成２年度の役員として、部会長に藤原譲（筑波大）、副部会長に町田勝之輔（京大）と吉田元二（住友化学）、幹事に２８名（名前は省略）、監査に米田幸夫（東海大）と佐々木愼一（豊橋技科大）の諸先生に１期を２年としてお願いすることが承認された。

藤原部会長から挨拶があり、米田前部会長をはじめ大勢の方々のご努力により、財政的基盤ができてきたので、平成２年度は実のある活発な活動を進めて行きたいと述べられた。

次いで、編集担当の石塚幹事（図書館情報大）から、ＣＩＣＳＪ　Ｂｕｌｌｅｔｉｎの編集、特集記事についての報告があり、部会員の積極的参加を要請された。

企画担当の松浦幹事（中外製薬）と飯塚前幹事（群馬大）から前年度の活動として、
１）第１２回情報化学討論会開催（平成元年１１月、豊中市、構造活性相関シンポと同時）
２）日化第５８春季年会（平成元年４月）の化学情報・計算機化学部門の企画・担当
３）第２回情報化学夏期セミナー「情報化学入門」（平成元年８月、神戸市）の開催
４）研究会・ワークショップでは、化学物質名の機械処理に関する研究会第１回（平成元年１０月、東京）開催、化学命名法ワークショップ第２回「命名の歴史から機械処理まで」（平成２年１月、東京）、「新しい領域としてのケモメトリックスーその現状と将来展望」（平成２年１月、東京）
および、平成２年度はじめてのワークショップ　化学命名法ワークショップ第３回「命名の歴史から機械処理まで」の開催予定が報告された。

総務担当の藤枝より、部会長と副部会長の選挙結果、幹事候補選出経過、現会員状況は、正部会員４０６（日化会員３７４、非会員３２）、学生部会員２０、法人部会員９８社（１２３口）で計５２４名になり、５００名を越したことなどを報告した。ＰＡＣＩＦＩＣＨＥＭ’８９（平成元年１２月、ハワイ）とシンポジウム「化学における情報の現状と将来」（平成２年１月、東京）に参加協力した。

第１３回情報化学討論会を１１月２８～３０日にホリデイ・イン豊橋で開催予定（構造活性相関と同時）であることが阿部英次氏（豊橋技科大）から予告された。

最後に米田前部会長からご挨拶があり、情報化学部会の研究分野を特定の領域にこだわっていると、世の中の進歩から取り残されてしまうことを恐れるので、今後は広い分野での研究活動を希望するというお話を伺って、散会した。

（総務担当幹事　藤枝修子（お茶女大））

情報化学部会収支報告書

(平成元年3月1日～平成2年2月28日)

〔収　入　の　部〕　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　(単位：円)

科　　　目	予　算　額	実　績　額	差　　　異
部　会　費	3,060,000	4,331,208	1,271,208
正部会員費	(600,000)	(643,208)	(43,208)
準部会員費	(60,000)	(85,500)	(25,500)
法人部会員費	(2,400,000)	(3,602,500)	(1,202,500)
事　業　費	400,000	0	△ 400,000
広告掲載料	70,000	659,588	589,588
合　計	3,530,000	4,990,796	1,460,796

〔支　出　の　部〕　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　(単位：円)

科　　　目	予　算　額	実　績　額	差　　　異
Bulletin 費	1,248,000	1,863,718	△ 615,718
事　業　費	720,000	156,276	563,724
会　議　費	924,000	425,974	498,026
事　務　費	138,000	127,534	10,466
事務負担金	500,000	500,000	0
合　計	3,530,000	3,073,502	456,498

収支差額	0	1,917,294	1,917,294

将来展望

「２１世紀の情報化学の重要テーマと実現時期」アンケート調査結果に寄せて

－第一線研究者のコメント－

これから２１世紀にむけて情報化学が取組むべき主要課題とその達成見通しについて部会員の皆様に対するアンケート調査の結果を本誌Vol.8（'90）No.1号で御報告しました。本号では結果の視覚化を試みると共にジャンル別に、結果に対する第一線研究者のコメントを掲載しました。

調査は昨年秋、まず部会員の方全員に２１世紀（中に解決が見込まれる）主要テーマとその解決（実現）時期を挙げていただき、次に改めてそれぞれのテーマの重要性と、その解決（実現）時期を予測していただきました。はじめの調査では７５人の方から２８８件のテーマが寄せられ、２回目の調査では１４４人の方が回答を下さいました。本号では２回の調査によって重要度が高いと判断された主要テーマとその実現予測時期を掲載しています。

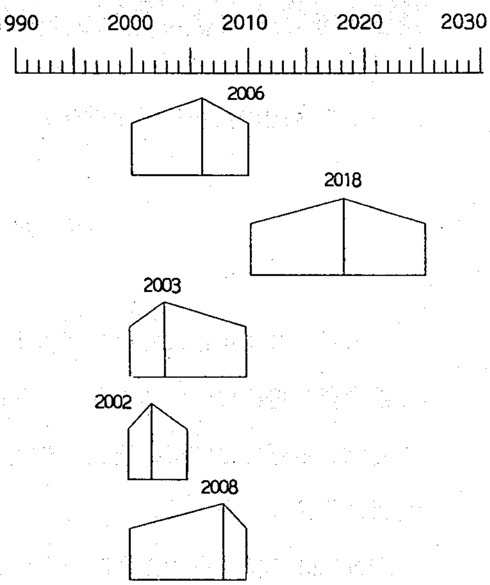
結果の表わし方について、まず［重要度］の項は１４４人の回答者の中で、重要テーマであると判断された方の割合（％）を示します。次に［実現時期］については、それぞれのテーマ毎に、重要であると回答された件数中の実現時期の早い方から1/4, 遅い方から 1/4の回答を除き、残り 1/2の中で最も早い時期、平均、遅い時期を５角形の横軸で表わしています。

情報（及び情報化学も？）とは、仲々捉えどころの難しい代物ですが、今回の調査結果を見ると情報化学は今後化学の広範なジャンルで様々な課題に挑戦し、その問題解決に力を発揮することが感じられ、同じく情報化学を志す者同士として心強く感じた方も多いと思います。テーマによっては２１世紀早々にも実現が予測されているものもあります。１０年後、まさに２１世紀の入口で今回とりあげられた諸テーマがどの様な展開を見せているか、興味深いものがあります。

最後に、快くコメントを寄せて下さった諸先生に心から感謝申し上げます。

1．物理化学

整理No.	テーマ	重要性%
0102	非経験的計算により有機分子の構造や物性が正確に予測できるようになる。	58
0107	溶液、固相中を問わず、非経験的反応実験のコンピュータシミュレーションが可能となる。	51
0101	分子間相互作用のシミュレーションがリアルタイムでできるようになる。	47
0103	分子科学計算、データベース等とレーザ分光、X線解析等の実験装置がＡＩにより組みあわされた分子特性解析装置が実用化される。	38
0106	物理化学法則体系知識ベースが実用化される。	26



夢の情報化学、情報化学の夢　　　　　　　　　　　　　（東大工・合成）平野　恒夫

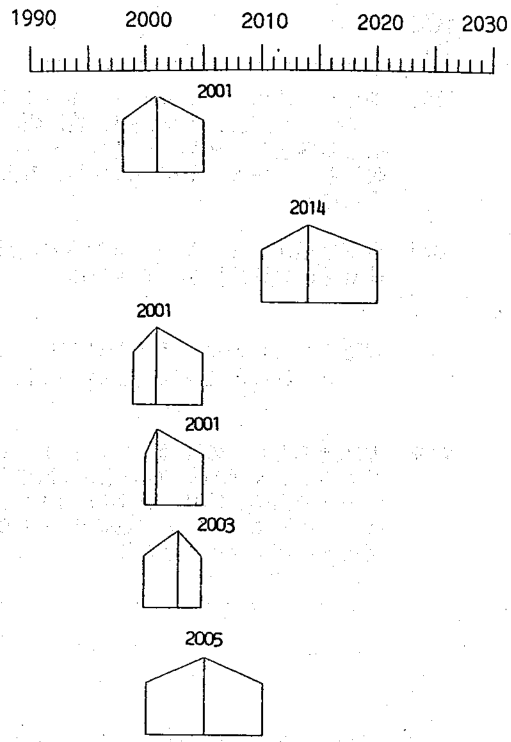
取り上げられている重要テーマを見ると、21世紀初頭には情報化学は大いに変貌を遂げていることになる。現在の日本の情報化学は、chemical informationを扱う学問であって、例えば分子モデリング、データベース等が主な内容となっている。しかし、重要テーマのそれは、分子の持つそれぞれの個性（たとえば電子構造）を情報と見做して、しかもそれを化学の第一原理（たとえば量子化学）に基づいて扱ってみようという姿勢であると見受けられる。試薬やフラスコこそ使わないが、まさに「化学」そのものを計算でやってのけていることになる。コンピュテーショナル・ケミストリーを標榜する筆者としては嬉しい限りである。

物理化学の上位３テーマは、それぞれ既に部分的には実現されている。いわば先の見えたテーマである。計算に必要な理論は大体揃っていて、当否の鍵はいかに高速に、かつ大容量のデータを処理出来るかにかかっている。多分、並列計算機のハード面での発展と、並列計算用の分子設計アルゴリズムの開発がブレークスルーの鍵となることであろう。４位、５位の情報工学的なテーマに関しては専門外ながら、ファジィ理論とかニューロコンピューターのような考え方に立つＡＩシステムが出来れば実現可能な気がする。

ともかく、現在ですら、小さな有機分子の構造や若干の物性は、非経験的分子軌道法で実験より良い精度で予測出来るし、二つの分子間でよければ、リアルタイムに分子間相互作用をシミュレーションすることも出来る。今から15年前を振り返って見れば、今からの十数年は長い。掲げられた重要テーマは、どれも手の届きそうなテーマである。もっと実現時期を早めるよう努力するのが、我々と、その後に続く世代の責務であろう。夢を大切にしましょう。

２．分析化学

整理No.	テ　ー　マ	重要性%
0202	物質の構造からスペクトルの予測ができるようになる。発光分析、UV、可視、IR、MS、NMR 等	47
0211	重要な物性データ、スペクトルデータが、すべて標準化された形式で、測定者からデータデポジットセンターに送られ、集積される。	38
0209	代表的なスペクトルデータの集成完備により化合物の同定が自動化される。	37
0203	有機化合物の構造とスペクトル解析に分子軌道法などの振動解析が組合せられた総合システムが完成する。	35
0204	NMR でタン白の高次構造の解明が、100 アミノ酸程度のものなら容易にできるようになる。	29
0206	化学実験支援エキスパートシステム、実用的LA機器とそのインターフェイスにより、分析、有機化学の実験現場の完全無人化、遠隔化が実現する。	26



（お茶の水女子大理）藤枝　修子

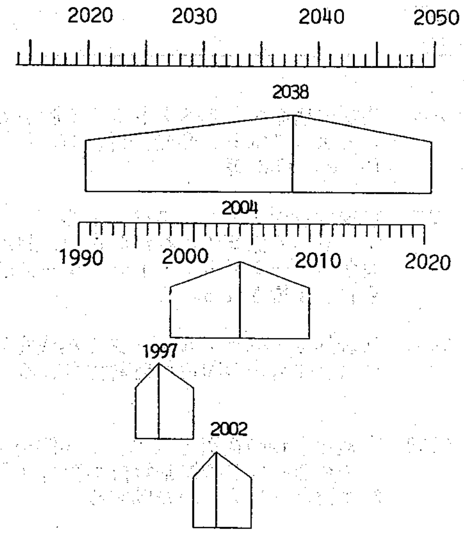
実現時期のデルファイ年が２００１年の０２０２、０２０３、０２０９は発光、ＵＶ、可視、ＩＲ、ＭＳ、ＮＭＲなどのスペクトルデータが関連している。物質の構造からスペクトルを予測したり、スペクトルから化合物を同定したり、スペクトルデータを総合的に利用するものは、現状でもその先がけとなる研究が試みられていることから、今の延長線上と考えられる。しかし、言わばデータベースの巧妙な利用形態とはちがって、物質情報（物性データ、各スペクトルデータなど）を標準化した形式で扱うことは、測定手法の多様化、複雑化により、０２１１では２０１４年というかなり先まで難しいと見ており、十分理解できる。

ある程度ルーチン的処理による化学実験では、０２０６で予測されているが、一般には、何種類かの混合物の中で、特定の化学種に注目して、定性的にせよ、定量的にせよ、分析を行おうとすると、現状ではその対象化学種の濃度や、共存化学種との濃度関係などによって、分析法が全く異なるので、試料量、サンプリング、前処理法をはじめ、適切な測定条件、方法などを選ばなければならない。さらに、目的、必要な分析精度、所要時間、経費などによっても異なってくるであろう。

高感度化や、微量分析法の開発などとともに、方法論的研究では測定にあたっての無制約化も必要かも知れない。

３．地球・環境化学

整理No.	テ　　ー　　マ	重要性%
0308	地球レベルのコンピュータ・ネットワークにより海底、オゾン層、酸性雨、などの各種データが、リアルタイムに収集され、分析・予測が行なわれるようになる。	３１
0303	温室効果がシミュレーションされ、地球温暖化対策技術が完成される。	３０
0301	炭酸ガスの環境に与える影響がシミュレーションなどでほぼ明らかになる。	２８
0302	地球全体としての環境のコントロールをめざし、全地球的な観測網の確立とデータの供給、同時に各地域（例えばば１河川）についても同様のデータの累積と利用網が完成される。	２７



（神奈川大理）　高木伸司

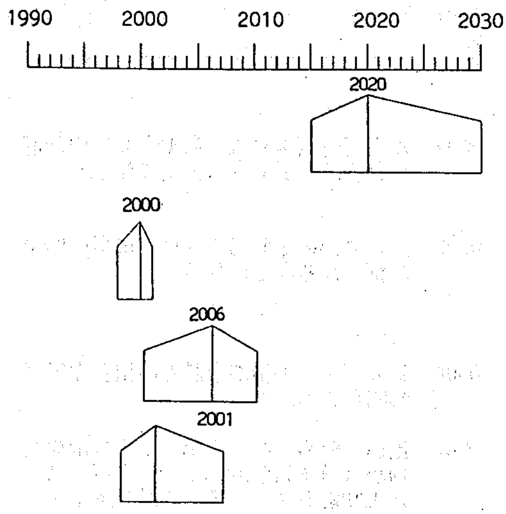
地球・環境化学問題の解決は人類にとっての悲願になって以来少なからざる年月を経ているように思う。思えば、人類が地球環境に生存することにより多かれ少なかれ環境に変化を与えざるを得ず、このことを最低限にしてなおかつ人類の生活レベルを維持することは容易なことではない。誰しも環境の悪化を望んでいるのではないのに地球温暖化などの新しい問題に直面し、なるべく早い時期にその解決を満点でなくても達成する必要がある。これは地球環境居住の人類の総意であることを、このアンケート結果をみて感じる。

現時点での地球レベルでの主要問題であるCO_2、CH_4による地球温暖化（温室効果）、オゾン層の破壊、酸性雨などの問題の解決は、実態を詳細なデータにより把握し、技術的にはもちろん社会経済的にも実行可能な技術を確立し、地球大での放出制御を実施しなくてはなるまい。これが容易でない一方できるだけ早期に実現しなくてはならない。この矛盾とも思えることはアンケートにみられるCO_2影響のシミュレーション達成と地球温暖化対策の確立、このために必要なデータのコンピュータによる実時間収集と予測の各技術の完成と実行、環境データ観測・利用網の完成についての実現予測時期とその変動幅に如実に現われているように思える。問題解決の困難度からみて予測時期が適切かやや早めであることは、研究者が技術達成に対して自らに課したくびきではないだろうか。

環境化学問題は典型的な学際的課題であり、さらに広くは技術と社会・経済の両分野にまたがる課題である。前述のように、この課題は現実的解決法が見出されない限り解決方策の実施が容易ではないかまたは困難であろう。このことは敢えて指摘するまでもない自明のことであるが、しかしなお地球・環境化学問題解決の方向性として、このことに日々思いを致すことが必要であることをあらためて記するものである。

4．生物化学

整理No.	テーマ	重要性%
0406	人のDNA の完全決定と、そのデータベース化に成功する。	39
0402	タンパク質の３次構造が１次構造より計算予測される様になる。	36
0403	タンパク質の結晶構造解析が短時間で可能になる。	32
0401	脳内伝達物質間の関係が明らかにされる。	31



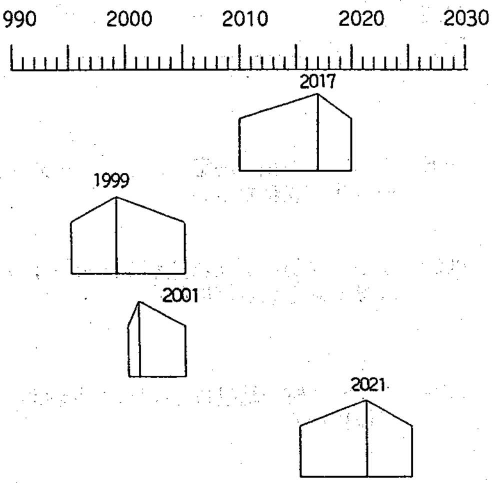
（蛋白工学研究所）八尾　徹

生物化学の分野における重要テーマとして，
0406ヒト遺伝子の全解明とＤＢ化(39%)　　0402蛋白質の立体構造予測法の確立(36%)
0403蛋白質の結晶構造解析期間の短縮(32%)，0401脳内伝達物質間の関係解明(31%)　の４つが挙げられたが，これらはいずれもこの分野の発展にとって特に重要なものばかりでテーマの選択は妥当であると思う。　これらにつけ加えるとすれば，"生体内の分子認識メカニズムの解明"という重要なテーマがあり，そのウエイトもかなり高いと考える。

各テーマの予測年次についてみると，
0406の実現時期 2020 年はあまりにも遅すぎると思う。このテーマはやればできるというテーマであり，現に米国ではプロジェクトがスタートしており，１５年もかからずに第一目標であるヒト遺伝子の全解明はすむであろう。もちろん，人種差・個人差・病気別など研究対象はエンドレスであろうとは思うが－－。"完全決定"という設問の表現の解釈でこれだけバラツキが大きくなった(15 年巾) ものと思われる。
0402は世界的にも多くの研究者が躍起になって研究しているテーマの一つであり，目標がはっきりしていてすぐにも出来そうに見えるのに，なかなか難しいテーマである。蛋白質の立体構造形成原理が解明されていないからである。2000年実現は多分に願望が込められているようで，遅れる可能性が高いと考える。
0403は結晶化のボトルネック解消がポイントであり，結晶化条件の科学的な解明の見通しがはっきりしないかぎり，自動化によるある程度の期間短縮に止まるだろう。結晶化後の測定・解析期間については大幅な短縮が見込める(SOR，分子置換法，直接法）。ここでも"短時間"の解釈の差が，予測年次の巾を大きくしたものと思う。
0401については，専門外なので，前述の"生体内の分子認識メカニズムの解明"と合わせて，着実な進歩を期待するとだけ申し上げておく。

５．医農薬品

整理No.	テ　ー　マ	重要性%
0509	化学構造式より医・農薬としての効能や毒性を推定できるようになる。	３７
0502	たいていの薬物分子がab initio MOで計算できるようになる。	２８
0504	レセプターの構造と膜との相互作用が解明される。	２７
0508	蛋白（酵素）の一次構造から最適な薬物が（分子科学計算やデータベース、人工知能システムで）設計できるようになっている。	２４



（住友化学）高山千代蔵

今後、生化学や量子化学などの基礎研究およびコンピューター技術は益々発展すると期待できる。また、NMRやX線解析などの分析技術も更に進歩するであろう。これらの学問、技術の進歩に支えられて、分子設計など将来の医農薬品に関する研究はより高度に、また生合理的になると予想される。このような将来予測が、アンケートの結果選び出されたテーマによって具体的に表されていると言える。医農薬の効力や毒性を推測する上でＱＳＡＲやパターン認識の手法が有用である。効力の推測については、デルファイ年よりももう少し早く実現するかも知れない。この場合、三次元構造情報の表現が重要な課題である。毒性のうち、変異原性や発がん性などの推測は比較的容易である。その他の複合的に発生する毒性については、系統的かつ定量的なデータの蓄積が必要である。またエキスパートの知識の知識ベース化も要求される。原子数１００程度の薬物分子のab initio MO計算は、近い将来、構造最適化も含め許容できる時間内に精度良く実行することが出来るであろう。複合分子系、レセプターとの相互作用系のab initio 計算は、重要なテーマであるが、実現するのはかなり先になると考えられる。光合成細菌の光合成反応中心の三次元構造の解明が既になされている。今後１０年以内に、膜に結合した幾つかのレセプターの構造が明らかにされるであろう。また膜の役割も解明されると考えられる。この場合、膜に結合した状態での直接的な構造決定もテーマとして考えられる。現在、多くの酵素について三次元構造が明らかにされており、それに基づいたドラッグデザインが行われているが、将来は、生合理的な医農薬設計のために、広くターゲットとするレセプターおよび酵素の三次元構造の解明が試みられるであろう。これと並行して、ターゲット蛋白の一次構造が決定されれば、人工知能システムなどにより三次元構造の推定が行われ、その推定構造に基づいた薬物設計が効率的に行われるであろう。

6．有機化学

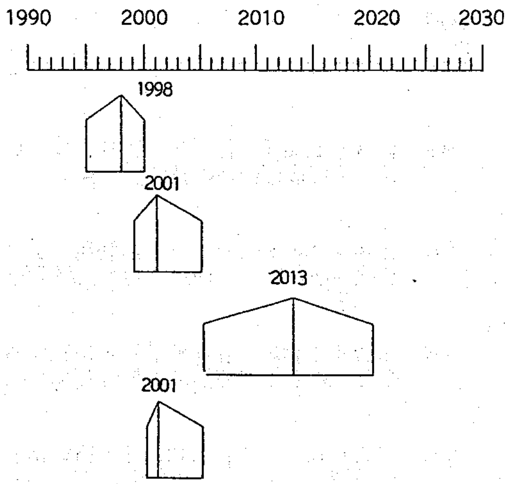
整理 No.	テ ー マ	重要性 %	1990 2000 2010 2020 2030
0604	有機合成知識の体系化により、コンピュータで最適経路の設計ができる。	45	2001
0601	化学反応のデータベースの利用により、有機合成実験の合理化・効率化が可能になる。	39	1996
0608	希望する物理・化学的性質を指定するとそれに合う候補構造式が出力される。	39	2006
0602	合成したい目的化合物とその原料化合物の構造式を指定すれば文献データベースから合成経路が選び出される。	38	1996
0610	分子量300 程度の通常の有機分子についてのab initio 計算は、ワークステーションなどで1時間程度で実行できるようになる。	37	2000
0603	有機合成設計と反応予測システムが、融合し実用化される。	33	2001

（豊橋技科大）高橋　由雅

この分野で多くの人が「重要性が高い」とした合成経路設計の問題は、これまで、そして現在も精力的に研究が進められているテーマの一つであり、これらの研究成果への期待の大きさを伺うことができる。一方、すでに有機合成反応に関するいくつかのデータベースが構築され、さらには構造検索機能を含むデータベース管理システムが開発されているのは周知の通りである。従ってテーマ０６０１については今後の重要性に変わることはないがすでに実用の段階に来ている。０６０２は単なる事例検索あるいはその組合せによるデータベース検索を意図したものであればそのシステム化は十分可能であろう。また、ここで多くの人が取り挙げた有機合成設計・反応設計のシステム化が何らかの意味で知的処理（or判断）を含むものとすれば、データベース等を利用しこれまでの膨大なデータからどのような知識を如何にして汲み出すか？またこれをもとにどのようにしてコンピュータに知恵をつけるか？が重要であり、これこそがこの分野における情報化学としての重要なテーマではと考える。一方、合成経路とは別に合成目的として「何を作るか？」との観点からテーマ０６０８は興味深い問題である。しかしながら、これとは逆の位置にある化学構造からの特性予測の問題とは異なり、これまで殆ど取り組まれていないのが現状である。これに関しては、まずシステム化へ向けての論理の組み立てから出発する必要があろう。また、テーマ０６１０については人々の希望ではあるにしても「21世紀における情報化学の重要テーマ」として疑問を感じるのは筆者ひとりだろうか？ハードウェアは、ミニスーパーコン、並列マシン、hyper cubeそして光による超高速並列マシンへと進歩を見せている。これらのハードウェアにアグラをかくことなく情報化学は何をなすべきか？最後に私見を言わせてもらえば、ここに掲げられたそれぞれの重要性もさることながら、広く有機化学（さらには化学全般）に寄与する情報化学の重要テーマとして「化学情報の種類と表現と処理」の観点から特に今後は三次元幾何も含めた構造情報の取り扱いに関する基本処理技術の確立が増々重要となろう。

７．高分子化学

整理 No.	テ　ー　マ	重要性 %
0701	高分子の物性データベースが整備され、求める機能を発現する高分子設計支援システムが実用化する。	３３
0703	ポリマー物性が分子論的アプローチにより予測できる様になる。	３０
0707	高分子固体物性（弾性率・強度など）が分子構造から予測できる様になる。	１９
0705	エキスパートシステムによる、高分子化合物の構造特性推定システムが普及する。	１９



（東工大工）安藤　勲

高分子は数多くのモノマーが連なった分子で、通常は分子量分布がある。また、分岐、立体規則性、異種結合などと構造は大変複雑である。さらに、各結合のまわりである特定のコンホメーションをとるために、構造が多様となる。これらの構造が高分子の物性・機能と密接に関係しているために、物性・機能の精度高い予測及び分子設計を困難にさせている。しかし、高分子の量子化学、統計力学、熱力学などの基礎的学問の進歩とコンピュータ及びそのソフトプログラムの進歩によって現在でもある領域の物性、機能の予測もある程度満足できるようになっている。もちろん、すべての物性・機能を精度高く予測及び分子設計するのにはこれらの学問の充実とコンピュータソフトの向上が必要となる。７０１と７０５のデータベース及びエキスパートシステムに関する仕事は大規模な組織が必要であるが、アンケートに予測されている実現時期は同意できる。今日、いろいろな高分子の分野でデータベースが作成されており、またエキスパートシステムも少しずつ充実してきていることから今後の発展を期待したい。７０３と７０７の予測において、分子論的アプローチによる予測の７０３が固体物性の予測の７０７より10年以上早く実施の達成が予測されているが、奇妙な気がする。もっとも、二つの質問の意味の差がアンケートに答える人に正確に理解できなかったのではないかと考えられる。私には７０３と７０７の実現時期は同程度のように思える。また、重要性が７０３に比べて７０７の方がかなり低いのは理解できない。同程度がよいところではないかと思う。いずれにしても、高精度で物性・機能を予測できる日が早く来るように期待したい。

12. 触媒化学

整理No.	テーマ	重要性%	実現時期 (1990–2030)
1201	触媒データベースの完成により性能予測技術が確立される。	25	1998
1204	酵素反応、触媒反応などの分野で、リアルタイム・シミュレーションが行われるようになる。	20	2017
1203	触媒反応や電極反応等の表面反応が、設計できるようになる。	21	2018

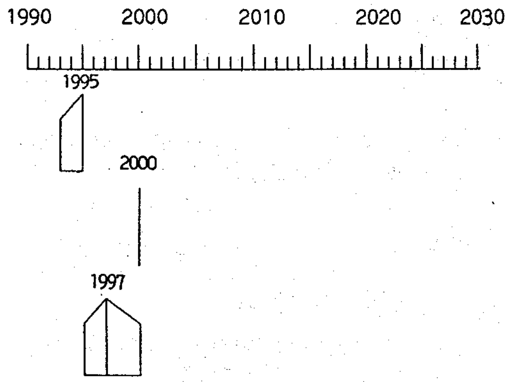
（愛知工大）鬼頭　繁治

＃１２０１から＃１２０４の触媒化学的内容はさまざまであるが，＃１２０１は帰納的アプローチであり他は演繹的アプローチであることは明かである．この観点から今回の実現時期の調査結果をみてみると，少なくとも化学者は帰納的方法に対して楽観的であるように思われる．これはやや化学を離れた立場の評者が何となく感じていることと符合している．とまれこの結果は，化学者は帰納的アプローチについては平生の経験に裏打ちされた圧倒的な自信を有することの現れであると思う．またこの実現時期については，＃１２０１の「触媒データベースによる性能予測技術の確立」が提案者を含めて他のものより著しく速くなっているのは，社会一般にデータベースという概念が浸透していることが大きな原因であろう．事実，触媒化学を含めて化学の分野では，データベース技術がコンピュータ化のひとつの大きな柱となっている．

提案者の予測年とデルファイ年の関係をみてみると，＃１２０１においてはデルファイ年が提案者予測年の先になっているのに対し，他の技術についてはその逆になっている．これは，＃１２０２～１２０４で前提となる情報処理技術がデータベースと比べて化学者になじみにくいものであり，そのため過度の期待が寄せられたとみるのは考え過ぎであろうか．触媒現象は非常に複雑であり，その機構の解明が簡単ではない．したがってコンピュータ化に必要な定量的理論にもとづいた信頼できる数学モデルの構築が簡単ではないことからも，いま述べた傾向が情報処理面の理由であることが推察される．

17. 化学教育

整理No.	テーマ	重要性%
1703	情報処理実習が化学関連学部・学科で必須科目となる。	33
1702	ニューメディアを利用した、視覚による教育が可能になる。	24
1704	コンピュータの過度の使用で実験への理解が観念的になったことへの反省で本当に実験するというカリキュラムに戻る。	23



（福井高専工業化学科）吉村忠与志

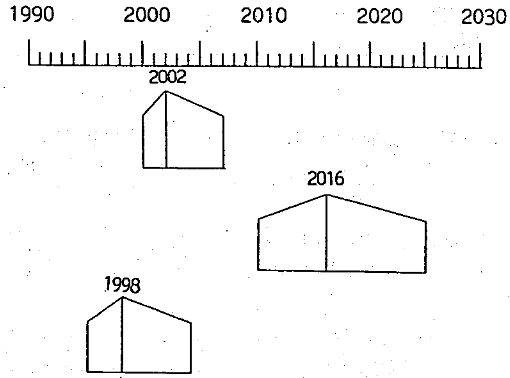
コンピュータがあらゆる分野の道具として活用されている今日、化学教育におけるコンピュータ教育は重要である。化学関連学部学科で学ぶ学生にも当然のことながらコンピュータリテラシーは必須である。化学のエキスパートシステムとしてＤＥＮＤＲＡＬがE. Feigenbaum によって作られたが、このシステムは知識工学者によって化学構造式を解くための知識が化学者の助けのもとで構築されたと聞いている。その結果を見ると、ＤＥＮＤＲＡＬはエキスパートシステムのシェルとしては大成したものの、化学構造式解析エキスパートシステムとしては必ずしも成功していない。

有機化合物自動構造推定システム「ＣＨＥＭＩＣＳ」を作成した佐々木慎一先生（豊橋技科大学長）は、化学エキスパートシステムは、化学者・研究者がコンピュータを学んで化学知識を構築しなければ大成しないと、力説されている。筆者も全く同感である。そのためにも大学の化学関連学部学科で情報処理実習が必須科目となる必要があり、その学科に情報処理担当の専任技官を置く必要がある。このアンケートでの重要性が33パーセントであったこともうなづける。パソコン、ＣＤなどのニューメディアが利用しやすくなり、視覚による化学教育方法も発達しつつある。環太平洋国際化学会議(1989)の報告、下沢　隆先生（埼玉大）によると、我国ではＣＡＩの開発の時代は終わり、実施の評価の時代である。我国では筆者らの啓蒙開発が始まったところで、試行から実用化にはまだ時間が必要であるが、実用化に進むものと思われる。

第三番目のアンケート項目として、“コンピュータの過度の使用で実験への理解が観念的になったことへの反省で本当に実験するというカリキュラムに戻る”とある。これは、何でもかんでもコンピュータ至上主義となることへのフィードバックであるが、化学教育でコンピュータ利用を推進・普及を努めている者としては、現時点ではいろいろなコンピュータ利用法が過度すぎると言われるほど実施されてほしいと願う次第である。化学が実験科学である以上、コンピュータが過度に使われても、“本当に実験する”というカリキュラムはなくならないと思う。シミュレータでは実験の腕は上がらないことを化学教育者は知っているはずである。

18. ＬＡ・ＦＡ化

整理 No.	テーマ	重要性 %
1804	人工知能をもった計測機器があたりまえになる。	２４
1805	汎用化学実験ロボットが開発される。	２４
1802	実験装置のインターフェイスが統一され、かつ１台のコンピュータで全ての装置を制御できるようになる。	１８



（昭和電工㈱）阿部　勲夫

１８０４：人工知能をもった計測機器があたりまえになる。　　　　２００２

現在でも多くの計測機器がＣＰＵを持ってインテリジェント化しているが、ハードウエアの発達、ＡＩの開発の進展とともにエキスパートシステムをさらに進歩させた知能を持つようになり、計測条件の選定、計測結果の判定が機械自体で行なわれるようになるであろう。これにより現在では専門家にしか操作や結果の判定のできない高級な分析機器等が一般研究者にでも扱えるようになるであろう。

１８０５：汎用化学実験ロボットが開発される。　　　　　　　　２０１６

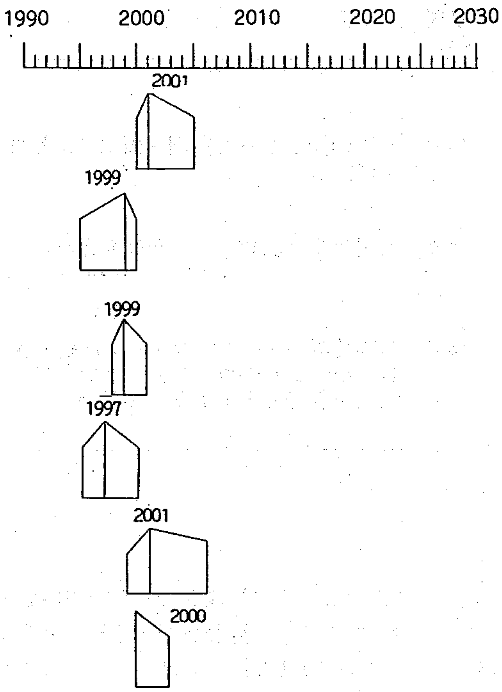
人間の実験者の扱う器具をそのまま使って実験するような汎用ロボットの開発はずっと先の事となろう。そのようなロボットは要求される機能から見て実験だけでなくひろい分野で人間の代りになれるロボットでなければならないから現在の技術では解決できていない問題のブレークスルーが必要とされよう。しかし生化学の検査分析等で現在用いられているような自動分析装置がさらに発展し、汎用の化学反応操作を自動的に行う機器になる可能性は大きく、時期的にもここで言われているよりはずっと早く実現するであろう。この場合、生産ラインと違い毎回のように変る実験操作のプログラムをいかに能率的に行なうかが重要な問題となろう。

１８０２：実験装置のインターフェイスが統一され、かつ１台のコンピュータで全ての装置を制御できるようになる。　　　　　　　　１９９８

実験装置のインターフェイスはハード的には現在でもＲＳ２３２ＣかＧＰＩＢバスに統一されつつある。従ってこの面での統一は早く実現されるであろうが、ＣＰＵが安価になるため個々の装置毎の分散処理が行なわれ、１台のコンピュータで全ての装置を直接制御する事はあまりないであろう。しかしこれらのコンピュータはＬＡＮ等のネットワーク環境で相互に接続され、お互いの情報を必要に応じて自由に伝達し、駆使して高度のデータ処理を行なうことが可能となり、あたかも１台のコンピュータで制御されているように働く事だろう。

19. 化学データベース

整理No.	テーマ	重要性 %
1907	各種の化学データが統一的に管理でき、一元化されたデータベースとして公開・利用できる。	37
1904	化学雑誌はほとんど電子メディアに変わり、常にオンラインで入手できる。	36
1910	コンピュータに入力された論文から、重要な文章、キーワード、物質名が自動的に抽出され、標準形式でデータベースに収められる。	28
1905	文献データベースの中から化学知識を引き出す検索インターフェイスの改善がほぼ完了する。	27
1909	コンピュータによる化学物質表現法の標準化が整う。	26
1911	各種の物性データベースの国際的相互利用について、世界共通のルールが確立される。	26



（電気通信大　山崎　昶）

それぞれにたいへん興味のある結果となっていて、さもありなんと思われるところが少なくないが、全般的に見て識者と言われる方々はかなり将来を楽観的に考えておいでのようである。

データベースはやはり利用者がなくては存在し得ない（もちろん数少ない好事家のためのものも有意義ではあるのだが、ここで取り上げられた対象は一応別であろう）から、ナミの人間（研究者）に使いよいものが出来なくては意味を持つまい。そのためにはハードウェアとソフトウェアがそれぞれにもっと人当たりのよいものにならなくては、いくら質のよいデータベースファイルが出来たとしても、やはり一部のエリートの占有物から脱却できそうもない。

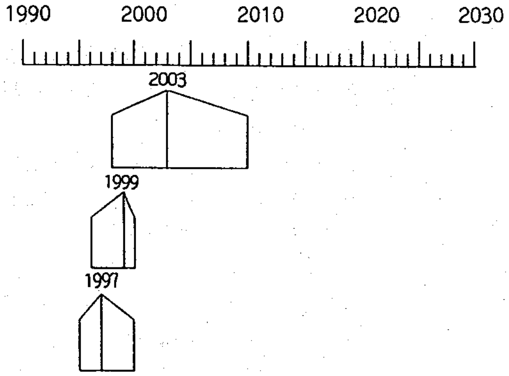
その意味では、始めから玄人の関与する割合の大きな、「ファクトデータベースの自動構築」とか、「化学物質表現法の標準化」などが、この予測よりも早めに進む可能性がある。だが、「電子メディアによる化学雑誌」とか「物性データベース相互利用ルールの確立」などは、情報化学上での問題はさほど難しくないだろうが、むしろ外部要因のためにもっと大幅に遅延するのではないだろうか。たとえば論文の審査システムと業績評価などの理解が大幅に変わらぬ限り、電子メディア化された自然科学ジャーナルのメリットはほとんど活かせない。また「全文データベースからの重要な情報の抽出」も、学術論文の執筆方針の度重なる改訂と、執筆者や編集部門がそれをどのくらい厳密に守ってくれるかどうかで、難易度や実現の時期がかなり大幅に変化する。もっともアメリカではコンピュータ利用学術論文執筆のソフトウェア（単なるワープロソフトやＤＴＰ用ではない）がすでに数年以前から市販されているそうだから、この種のものが普及しさえすれば問題はなくなるかも知れない。（カール・Ｊ・シンダーマン著『続サイエンティストゲーム』（拙訳）に紹介されている。）

ここにまとめられた13項目の中で「CAS 文献全体に相当する内容の知識ベース」だけは、提案者の予測と実現予測が大幅に食い違っているのだが、この「知識ベース」に相当するものは、CAS よりもむしろ Gmelin や Beilstein、Landolt などの三次情報（ハンドブーフ）的なもっと整理された形のものではないだろうか。このあたりの見解の相違が回答者と提案者との間にあったために、大きくずれた数字が出現したものと考えられる。二次情報は知識の源泉ではあろうが、精選を経ぬままでは知識ベースにはなり得まい。

ここのアンケート項目には取り上げられていないが、データベースの作成や保守、管理を司る人間のエキスパートや、検索ガイドそのほかの執筆者となる優秀な人材の養成なくしては、このような実現予測などすべて画餅となる危険性をはらんでいることを指摘しておきたい。

20. コンピュータ・情報通信

整理No.	テーマ	重要性%
2003	現在のスーパーコンピュータの能力＋３次元グラフィック機能をもつパソコンが普及する。	45
2004	論文誌のオンライン投稿やオンライン出版が普及する。	42
2001	論文、特許などのコンピュータ支援翻訳システムが実用化される。	40



－　コンピュータと情報通信分野について　－　　　　（筑波大学）藤原　讓

コンピュータと情報通信の分野全体については対象領域が広すぎるためかテーマがやや漠然としており、そのせいもあってか個別分野に比して先見性が乏しいように感じられる。

論文、特許などの翻訳支援システムの実用化と、現在のスーパーコンピュータの能力＋３次元グラフィック機能をもつパソコンの普及などは技術的にはほぼ見通しのついていることと言える。次にＩＳＤＮの実現化の状況から見て内外の研究機関がネットワーク化され、情報伝達、画像情報を含むデータなどの共用が行われることや論文誌のオンライン投稿やオンライン出版が普及することも特許の電子出願や欧米の出版の状況から現実の延長上にあると言えよう。

またネットワークに関しては電子会議や電子メールの利用による知的作業の共同化や、組織化のような面も進むと思われるが、日本では馴染みが薄いせいかテーマとしては取り上げられていない。

新しい展開への期待としては、革新的な計算機システムやアルゴリズムの発見または開発が行われ、化学における数値計算法が刷新されることは現在の数値計算とくに積分に関する方法は基本的に不自然なものであるから文字通り抜本的解決に対する要望が強いことがよく表われている。

ヒトの知能とほぼ同等のエキスパートシステムが完成することと、多数のニューラルネットワークを集積したニュータイプの計算機が開発されることは、やや具体性に欠ける憾も無いではないが、これまでの急速な情報処理技術の進歩を考慮した上での期待ともいえよう。

結局、この分野に対しての要望、期待は控え目になっているが、他の分野で見られるような具体的な問題点の堀り下げと、技術動向からの展開がある筈であるし、一方、技術と制度の絡む知的所有権、安全、標準化などの面も検討すべき課題であろう。

関 連 行 事

第５回化学ＰＣソフトウエア研究討論会

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　日本分析化学会　（予定）
後援	ＮＥＣ
日時	１１月７日（水）午後、８日（木）
会場	お茶の水女子大学一般教育２号館２０１教室 所在：〒１１２　東京都文京区大塚２－１－１ 交通：営団地下鉄丸の内線　茗荷谷駅下車　徒歩７分
討論主題	化学の研究・教育におけるパソコンの利用
特別講演	ニューラルネットとパーソナルニューロコンピュータ（仮題） 飯沼　一元先生（ＮＥＣ　Ｃ＆Ｃ情報研究所所長）
講演申込	８月８日締切（必着） １件ごとに葉書で次の事項をご記入の上、下記宛にお送り下さい。 １）講演題目　２）発表者と所属（講演者に下線） ３）連絡先（住所、電話、ファクシミリなど） ヘッダー用紙とデモ用使用機器調査票をお送りします。
講演要旨	９月３０日締切（必着） ヘッダー＋要旨でＡ４サイズ２枚
懇親会	１１月７日（水）　お茶の水女子大生協内マルシェにて 17:30～19:00を予定
会費	参加登録費　化学ＰＣ研究会会員　３０００円 共催学・部会会員　３５００円 一般　４０００円 学生　１５００円 懇親会費　３５００円
参加申込	１０月１０日締切 郵便またはファクシミリで、氏名、勤務先、住所、電話をご記入の上、下記宛にお送り下さい。なお懇親会に出席ご希望の方も併せてお申込み下さい。
連絡先	〒１１２　東京都文京区大塚２－１－１ お茶の水女子大学　理学部　化学教室 藤枝修子 電話　０３－９４３－３１５１　内線５６２ ファクシミリ　０３－９４２－２８１５　（藤枝宛を明記して下さい）

MEETINGS

3-7 June 1990.
Second International Meeting on Chemical Structures.
Noordwijkerhout, THE NETHERLANDS.
Contact: Dr. Wendy A. Warr, Manager, Information Services Section, ICI Pharmaceuticals, Mereside, Alderley Park, Macclesfield, Cheshire SK10 4TG, UNITED KINGDOM.

3-7 June 1990.
26th Annual Meeting of the Drug Information Association.
San Francisco, CA.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002, (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

6-8 June 1990.
Computational Aspects of Inorganic Chemistry in Biological Systems.
Aberdeem Prving Ground, MD.
Contact: George Famini, SMCCR-RSP-C, U.S.Army CRDEC, Aberdeen Proving Ground, MD 21010 (301-671-2670) or Alfred Lowrey, Laboratory for the Structure of Matter, Naval Research, Washington, DC 20375 (202-767-6381).

7-9 June 1990.
International Conference on Chirality.
Cancun, MEXICO.
Contact: Mary Jo Richards, Conference Secretary, 341 Schrenk Hall, University of Missouri at Rolla, Rolla, MO 65401 (314-341-4429).

12-13 June 1990.
Computer Modelling of Polymers: Predicting Properties Before Synthesizing.
Atlant. GA.
Contact: The Program Division, Technomic Publishing Co., Inc., 851 New Holland Ave., Box 3535, Lancaster, PA 17604 (717-291-5609; FAX: 717-295-4538).

17-22 June 1990.
1990 Gordon Conference on Computational Chemistry.
Plymouth, NH.
Contact: William Jorgensen, Dept. of Chemistry, Purdue University West Lafayette, IN 47907 (317-494-5260) or John McKelvey, Eastman Kodak Research Laboratories, 66 Eastman Ave., Building 82, Rochester, NY 14650 (716-477-3335).

17-21 June 1990.
International Joit Conference on Neural Networks.
San Diego, CA.
Contact: Nomi Feldman, Meeting Management, 5665 Oberlin Dr., Suite 110, San Diego, CA 92121 (619-453-6222).

21-23 June 1990.
Supercomputing '90.
Manheim, WEST GERMANY.
Contact: Prof. H. W. Meuer, University of Mannheim, Dept. of Informatics, L 15, 16, D-6800 Mannheim 1, WEST GERMANY.

25-27 June 1990.
Dynamics and Kinetics of Myoglobin and Hemoglobin.
Bethesda, MD.

Contact: Martin Karplus, Dept. of Chemistry, Harvard University, 12 Oxford St., Cambridge, MA 02138

25-29 June 1990.
1990 QCPE Workshop on Computational Chemistry.
Geneva, SWITZERLAND.
Contact: Quantum Chemistry Program Exchange, Dept. of Chemistry, Room 204, Indiana University, Broomington, IN 47401 (812-855-4784; FAX: 812-855-5678; BITNET: COUNTSR@IUBACS).

1-6 July 1990.
9th Annual International Conference of the Molecular Graphics Society.
Uppsala, SWEDEN.
Contact: Dr. B. Bywater, Molecular Biophysics Dept., Pharmacia AB, S-75182 Uppsala, SWEDEN.

2-5 July 1990.
Architecture and Algorithms in Condensed Phase Simulations.
St. Andrews, SCOTLAND.
Contact: Dr. D. J. Tidesley, Dept. of Chemistry, The University, Southampton SO9 5NH, UNITED KINGDOM.

8-13 July 1990.
33rd IUPAC International Symposium on Macromolecules.
Montréal, Québec, CANADA.
Contact: IUPAC MACRO 90 Secretariat, Dept. of Chemical Engineering, McGill University, 3480 University St., Montréal, Québec H3A 2A7, CANADA (FAX: 514-398-6678).

8-14 July 1990.
1990 European Computational Chemistry Workshop.
Oxford, UNITED KINGDOM.
Contact: Anna Morris, Continuing Professional Development Unit, Rewley House, 1 Wellington Square, Oxford OX1 2JA, UNITED KINGDOM.

8-14 July 1990.
World Association of Theoretical Organic Chemists.
Toronto, Ontario, CANADA.
Contact: WATOC Congress 1990, c/o Department of Chemistry, University of Toronto, Toronto, Ontario, CANADA M5S 1A1.

15-21 July 1990.
The Frontiers of Theoretical Chemistry.
Halifax, Nova Scotia, CANADA.
Contact: Prof. R. J. Boyd, Dept. of Chemistry, Dalhousie University, Halifax, N. S. B3H 4J3 CANADA (902-424-8883; FAX: 902-424-2319; BITNET: BOYD@DALAC).

17-21 July 1990.
1990 Gordon Conference on Computational Chemistry.
Plymouth, NH.
Contact: William Jorgensen, Dept. of Chemistry, Purdue University, West Lafayette, IN 47907 (317-494-5260) or John McKelvey, Eastman Kodak Research Laboratories, 66 Eastman Ave., Bldg. 82, Rochester, NY 14650 (716-477-3335).

19-28 July 1990.
IUCr 15th General Assembly and International Congress.
Bordeaux, FRANCE.
Contact: Prof. M. Hospital, Lab de Cristallografie, Université de Bordeaux 1, 351 Cours de la Liberation, 33405 Talence, FRANCE.

23-27 July 1990.

Expanding Frontiers in Polypeptide and Protein Structural Research.
Whistler, British Columbia, CANADA.
Contact: Dr. V. Renugopalakrishnan Harvard Medical School, Department of Orthopedic Surgery, 300 Longwood Avenue, Boston, MA 02115 (617-735-8413).

29 July-3 August 1990.
10th International Biophysics Congress.
Vancouver, CANADA.
Contact: Mr. L. Forget, Congress Manager, 10th International Biophysics Congress, National Research Council Canada, Ottawa, Ontaria, CANADA K1A ORG.

6-10 August 1990.
10th International Congress on Physical Organic Chemistry.
Haifa, ISRAEL.
Contact: Prof. Yitshak Apeloig, Dept. of Chemistry, Technion-Israel Institute of Technolgy, Haifa 32000, ISRAEL.

11-15 August 1990.
The Fourth Protein Society Symposium.
San Diego, CA.
Contact: Mary K. Woods, Dept. of Biochemistry, SJ-70, University of Washington, Seattle, WA 98195 (206-526-9936).

15-17 August 1990.
Computers and Advanced Technology in Medicine, Healthcare and Bioengineering.
Honolulu, HI.
Contact: Biomed '90, IASTED Secretariat, P. O. Box 25, Stn, G, Calgary, Alberta T3A 2GI, CANADA (403-270-3616; FAX: 403-270-8855).

15-17 August 1990.
Expert Systems and Neural Networks.
Honolulu, HI.
Contact: ESNN IASTED Secretariat, P. O. Box 25, Stn, G, Calgary, Alberta T3A 2G1, CANADA (403-270-3616; FAX: 403-270-8855).

23-25 August 1990.
Workshop on Desktop Molecular Vision.
Bethesda, MD.
Contact: William R. Light, Center for Bio/Molecular Science and Engineering, Code 6090, Naval Research Laboratory, Washington, DC 20375 (202-767-1154; E-mail: Light1@nrl3.nrl.navy.mil).

26-31 August 1990.
200th ACS National Meeting.
Washington, DC.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

28-31 August 1990.
コンピュータの材料科学・工学への応用　国際会議・展示会(CAMSE '90)
連絡先：CAMSE '90 事務局　〒101 千代田区九段北1-8-10　日刊工業新聞事業局内 (03-222-7162, FAX; 03-221-7137)

2-8 September 1990.
21st European Peptide Symposium.
Platjad'Aro, SPAIN.
Contact: Ms. Fina Armengol, 21st EPS Secretariat, BRP, Pau Claris 138, E-08009 Barcelona, SPAIN.

16-20 September 1990.
Computational Chemistry 1990.

Orlando, FL.
Contact: Lynn McDaniel, Al Tek International, Inc., 8321 N. Woolsey, Portland, OR 97203 (503-289-7735).

18-20 September 1990.
Scientific Computing & Automation Conference and Exhibition.
Philadelphia, PA.
Contact: Elsevier Science Publishers, P. O. Box 330, 1000 AH, Amsterdam, THE NETHERLANDS.

18-22 September 1990.
Conference on Computers in Chemistry.
Wroclaw, POLAND.
Contact: Dr. P. Misiak, "Computers in Chemistry", Institute of Organic and Physical Chemistry 1-4, Wyb. Wyspianskiego 27, 50-370 Wroclaw, POLAND.

10-12 October 1990.
Machine Learning and Neural Networks.
New York, NY.
Contact: Dr. C. A. Vassiliadis, ECE Dept., Ohio University, Athens, OH 45701 (FAX: 614-593-0007).

15-20 October 1990.
ELMAU 3: Computational Methods in Chemical Design.
Schlo β Elmau, WEST GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a.d. Ruhr, WEST GERMANY.(49-208-30-64-88 ; FAX: 49-208-30-46-07).

1-4 November 1990.
Molecular Modelling in Drug and Protein Design (part of International Conference of IEEE Engineering in Medicine and Biology Society).
Philadelphia, PA.
Contact: Dr. Janardan S. Yadav, Dept. of Information Services and Technologies, University of Medicine and Dentistry of New Jersey, 185 S. Orange Ave., Newark, NJ 07103 (201-456-3657).

12-16 November 1990.
SUPERCOMPUTING 1990.
New York, NY.
Contact: Dr. Joanne Martin, IBM, T. J. Watson Research Center, P. O. Box 218, Yorktown Heights, NY 10598 (914-945-3285)

28-29 January 1991.
Sixth Biennial Workshop on Computer-Assisted Chemistry.
New Orleans, LA.
Contact: Babu Venkataraghavan, Lederle Laboratories, Middletown Rd., Pearl River, NY 10965 (914-732-3406) or Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

14-19 April 1991.
201st ACS National Meeting.
Atlanta, GA.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

13-17 May 1991.
Eleventh Internationhal Meeting of the Molecular Graphics Society.
Chapel Hill, NC.
Contact: Dr. Fred Brooks, Jr., Dept. of Computer Science, University of North Carolina, Chapel Hill, NC 27599 (919-962-1931).

30 May-9 June 1991.
Static, Kinematic and Dynamic Aspects of Crystal and Molecular Structure.
Erice. Trapani, ITALY.
Contact: Prof. L. Riva Di Sanseverino, Diparimento de Scienze Mineralogiche, Piazza Porta San Donato 1, 40126 Bologna, ITALY.

17-20 June 1991.
27th Annual Meeting of the Drug Information Association.
Washington, DC.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

21-26 July 1991.
American Crystallographic Association Annual Meeting.
Toledo, OH.
Contact: Alan Pinkerton, Dept. of Chemistry, Univ. of Toledo, Toledo, OH 43606 (419-537-4568).

14-19 July 1991.
10th International Conference on Computers in Chemical Research and Education (ICCCRE).
Jerusalem, ISRAEL.
Conract: the Conference Secretariat, 10th ICCCRE, P. O. Box 71102, Jerusalem 91079, Israel (972-2-662989, 668070, TELEX: 26577 OMGIS IL, FAX: 972-2-6656689). 詳細は国際会議欄参照。

25-30 August 1991.
201st ACS National Meeting and 4th Chemical Congress of North America.
New York, NY.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

18-22 November 1991.
SUPERCOMPUTING 1991.
Albuquerque, NM.
Contact: Raymond L. Elliott, MS B-260. P. O. Box 1663, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545 (505-667-1449).

国際会議

10th INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTERS IN CHEMICAL RESEARCH AND EDUCATION (ICCCRE)

July 14-19, 1991, Jerusalem, Israel

First Announcement

SCIENTIFIC PROGRAM

The Conference will be devoted to the various aspects of computer application in chemistry with special emphasis on: Education, Drug Design, Receptor Modeling, Chemical Databases, Computer Graphics, Chemometric, New Approaches to Mechanistic Studies, Software Integration, 3D Searching, Expert Systems.

The scientific program will include invited lectures, oral presentations, poster sessions, round-table discussions and software presentation and demonstration.

GENERAL INFORMATION

Venue
The Conference will be held at the Mitzpeh Rachel Kibbutz Congress Center on the southern outskirts of Jerusalem, overlooking Bethlehem. A swimming pool and tennis courts are on the premises and there is easy access by public transportation to the center of Jerusalem.

Language
The Conference will be conducted in English.

Visas
Participants from most countries do not require entry visas. If needed, visas will be granted to all bona fide participants provided that application to the local Israel representatives is made at least three months prior to arrival in Israel.

Social Program
A special program and excursions are planned for the participants of the Conference and their accompanying persons.

Exhibition
There will be a professional exhibition and demonstration of hardware and software within the framework of the Conference. Further details will be forwarded in the second announcement.

Clothing
Informal for all occasions. Don't forget to pack a swimsuit, headcovering, sunglasses and comfortable walking shoes. A light jacket is recommended for the evenings.

Weather
The weather in July in Jerusalem is generally hot with no rain. Temperatures are around 26ºC (78ºF) at midday and about 16ºC (60ºF) in the evening.

Second Announcement
Further information and the Second Announcement will be mailed to those responding to the First Announcement. We would be most grateful if you could bring the information included herein to the attention of your colleagues who might be interested in participating in the Conference.

Conference Chairman
Yecheskel Wolman
Dep. of Organic Chemistry
The Hebrew University, Jerusalem 91904, Israel
Tel: 972-2-584501
Fax: 972-2-660346, 972-2-666804
Telex: 25391 HU IL
Bitnet CHESKEA@HBUNOS,
Dialmail 12707; STNMail 1515C

Information and Registration
The Organizing Committee will be more than happy to provide any additional information required. For further information please contact the Conference Secretariat:
10th ICCCRE
P.O.Box 71102, Jerusalem 91079, Israel
Tel: 972-2-662989, 668070
Telex: 26577 OMGIS IL, Fax: 972-2-665668

編集委員注：日本からは豊橋技術科学大学の佐々木慎一先生が 10th ICCCRE の Board of Trustees に，住友化学工業㈱の吉田元二氏が Advisory Board に加わっておられます．

文献紹介

COMPUTERS & CHEMISTRY

1990年第14巻第2号 論文題目、著者、頁

A General procedure for transformation of abstract factor solution to real one in presence of linear constraints. An applicatrion for chemial component analysis from NMR data, *Reino Laatikainen and Kari Tuppurainen*, p. 109

EASIEST —a program system for ElectroAnalytical SImulation and parameter ESTimation —I. Simulation of cyclic voltammetric and chronoamperometric experiments, *Bernd Speiser*, p. 127

Robust solution of proper, matched sigma-pi multi-nomial equation systems, *David J. M. Park Jr.*, p. 141

Robust multivariate analysis applied to separation of components in absorption spectra, *I. B. C. Matheson and R. J. De Sa*, p. 157

Determination of macroscopic thermodynamic ionization constants under conditions of variable ionic strength by an optimization algorithm, *Maria N. Moreno, Jose Luis Gonzalez, M. Angeles del Arco and Julio Casado*, p. 165

Conformational energy derivatives for polypeptides with flexible proline rings, *R. A. Abagyam and A. K. Mazur*, p. 169

Chebyshev methods for the numerical evaluation of the reversible Randles-Sevcik function, *F. G. Lether and V. Shivpuri*, p. 177

Book Reviews

Numerical methods with FORTRAN 77: a practical introduction, by L. V. Atkinson *et al. David Edelson*, p. 183

Computation methods in the chemical sciences, by A. F. Carley and P. H. Morgan and Algorithms for chemists, by J. Zupan, *David Edelson*, p. 183

Advanced scientific computing in BASIC with applications in chemistry, biology and pharmacology, by P. Valko and S. Vajda, *DeLos F. DeTar*, p. 184

Microcomputers and laboratory instrumentation, by David J. Malcolme-Lawes, *Edwin F. Hilinski*, p. 185

Methods in computational chemistry, Edited by Stephen Wilson, *Walter C. Ermler*, p. 186

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

NOVEMBER 1989 Vol. 66, No. 11

Computer Series, 107: Teaching COMPUTER Interfacing in Instrumental Analysis, *Rhys N. Thomas and John E. Kuo*, p. 947

DECEMBER 1989 Vol. 66, No. 12

A Facile Hückel Molecular Orbital Solution of Buckminsterfullerene Using Chemical Graph Theory, p. 1012

Computer Series, 108: Computer Simulation of Chemical Equilibrium, *John F. Cullen, Jr.*, p. 1023

J. Molecular Structure の vol.199～206 について

（編集委員会）

Vol.199 ～206 は，これまでのルートでは入手できず，本誌での紹介が遅れておりました．しかし，この度その分は別の雑誌ＴＨＥＯＣＨＥＭに収録されているらしいとの情報が得られたため，国会図書館に行って調査しました．その結果，その事実が確認され，Vol.204 を除いて目次のコピーも入手できましたので，紹介いたします．

J．Mol．Structureのvol.199 はＴＨＥＯＣＨＥＭの58に，200 は59にというように対応しているため，その対応を明記して紹介することにしました．なお，ＴＨＥＯＣＨＥＭはTheo. Chem.のような略誌名ではなく，ＴＨＥＯＣＨＥＭで完全誌名であり，オランダのＥlsevier Ｓcience Publishers B.V.から出版されています．

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE Vol. 199 (1989)
―― THEOCHEM Vol. 58 (1989) ――

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE Vol. 200 (1989)
—— THEOCHEM Vol. 59 (1989) ——

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE Vol. 201 (1989)
— THEOCHEM Vol. 60 (1989) —

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE Vol. 202 (1989)
— THEOCHEM Vol. 61 (1989) —

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE Vol. 203 (1989)
— THEOCHEM Vol. 62 (1989) —

Quantum Chemistry Literature Data Base, Bibliography of ab initio Calculations for 1988

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE Vol. 205 (1990)
— THEOCHEM Vol. 64 (1990) —

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE Vol.206,Nos.1/2
—— THEOCHEM Vol. 65, Nos.1/2 (1990) ——

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE Vol.206, Nos.3/4
— THEOCHEM Vol. 65, Nos.3/4 (1990) —

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

※Vol. 215は未着です。

Vol. 212, 1989

Short communication

Vol. 216, 1990

Vol. 217, 1990

Special Issue:

Molecular Spectroscopy and Molecular Structure 1989 — Proceedings of the XIXth European Congress on Molecular Spectroscopy, Dresden, G.D.R., 3–8 September 1989.

Part A: Plenary and Section Lectures

(This is the first of three Congress Volumes)

Vol. 218, 1990

Special Issue:

Molecular Spectroscopy and Molecular Structure 1989 — Proceedings of the XIXth European Congress on Molecular Spectroscopy, Dresden, G.D.R., 3–8 September 1989.

Part B: Contibuted Papers

(This is the second of three Congress Volumes)

STRUCTURAL PROBLEMS

Vol. 219, 1990

Special Issue:
Molecular Spectroscopy and Molecular Structure 1989 — Proceedings of the XIXth European Congress on Molecular Spectroscopy, Dresden, G.D.R., 3–8 September 1989.

(This is the third of three Congress Volumes)

Part C: Contributed Papers

CRYSTALS AND SOLID STATE

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1990年第8巻第1号（3月） 論文題目、著者、頁

TETRAHEDRON COMPUTER METHODOLOGY

1989年第2巻第3号 論文題目、著者、頁

Contents of Disks 10 to 13

Disk 10: CONTENTS.ASC contains all READ.ME files of all disks describing each file in detail; *.ASC, ASCII text files of each paper; NEWS.ASC, meetings and events; GREDIA.DOC, ChemText® format for paper by Fricke, Nickelsen, Fugmann and Sander; WORDPERF.WP5, Style sheet and guide for Word Perfect 5.0® in Word Perfect 5.0 format; TCMFORMA.WP5, a model TCM format paper in Word Perfect 5.0 format; WORDPERF.ASC and WP5MODEL.ASC are ASCII versions of the two preceding papers, respectively.

Disk 11: WOLF.DOC, ChemText document of paper by Wolf; WOLFREAD.ME, ASCII file describing the *.DAT and *.MOL files from the paper; WOLF'number'.DAT, data for compounds in Table 2 of the paper; *.MOL, the same data in MDL MolFiles©.

Disk 12: READ.ME, ASCII file describing the KINARBER system, part of the paper by Bertrand, Arbelot, and Chanon; KINARBER.EXE, executable version described in paper; KINARBER.C, the C language source code; KINARBAS.EXE, French version of KINARBER; *.BGI, graphic card handlers; INSTALL.BAT, installation procedure for hard disk.

Disk 13: Macintosh® format contains CONTENTS.ASC, the complete contents of all disks in this issue; KINARBER.WORD, Microsoft Word® 4.0 document for KINARBER paper by Bertrand, Arbelot, and Chanon; *.ASC, ASCII versions of all papers; NEWS.ASC, meetings and events; WORDPERF.ASC, Style sheet and guide for Word Perfect 5.0 in ASCII; WP5MODEL.ASC, ASCII version of Word Perfect TCM format model paper.

KINARBER folder: READ.ME, ASCII file describing KINARBER system; KINARBER.C, C language source code for KINARBER program.

WOLF folder: WOLFREAD.ME, ASCII file describing the *.DAT and *.MOL files from the paper by Wolf; WOLF'number'.DAT, data for compounds in Table 2 of the paper; *.MOL, the same data in MDL MolFiles.

Macintosh is a trademark of Apple Computer Co. MDL MolFile is a proprietary file format and ChemText is a trademark of Molecular Design Limited, San Leandro, CA. Microsoft Word is a trademark of Microsoft Corporation.

新会員勧誘にご協力下さい

職場、家庭を問わず、また日、欧を問わず、みんながワープロを使い、ブック型ノート型パソコンもかなり普及してきて、いつも電子文房具が視野に入るようになってきた現在、化学者のコンピュータに関する意識も年毎に変わってきていると思います。この背景の中で、化学情報、計算機化学などの情報化学に関心をもっている人、これからは化学の分野でも情報化学に関心をもっている人、これからは化学の分野でも情報化学が不可欠だと思っている人などが多数にのぼることは、情報化学部会編集委員会が行ったデルファイ方式のアンケートや情報化学部会についての最近の問い合わせにも見られます。

情報化学部会として、研究活動と情報交換の範囲をさらに広げ、内容もより充実させるために、会員増加をはかりたいと願っています。お知り合いの方々をぜひお誘い下さい。

問合先：〒101 千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル6Ｆ
（社）日本化学会 会員部 ☎(03)258-9815

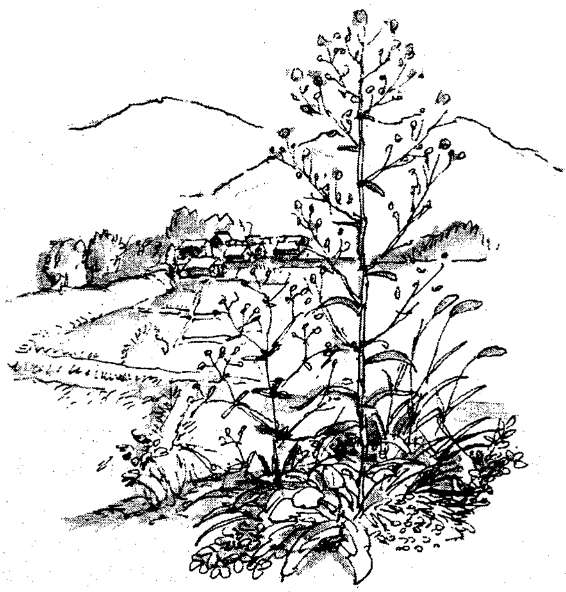
編集後記

昨年来の懸案となっていたネットワーク特集を漸く刊行しました．当初は，化学への応用を主にと思いましたが，化学業界の現状はネットワークの導入が始まったところであり，化学への応用を発表していただくのは未だ時期尚早のようでした．そのため，今回の内容はネットワークそのものの解説とし，化学への応用例については次の機会としたいと思います．

「21世紀の情報化学の重要課題」本号ではアンケート結果を専門家に評価していただいた．読者の御感想は如何だったでしょうか．御意見をお寄せいただければ幸いです．

ところで，ご承知のように外国雑誌では入荷が遅れたり，巻号が前後して到着することはさほど珍しいことではありません．本誌で紹介している J. Molecular Structure の場合は Vol.199～206 が何時までも来ないと思っておりましたところ，その分は別の雑誌に掲載されておりました．詳しくは本号の文献紹介欄をご覧下さい．この件についてお世話になりました前編集委員と現委員に御礼申し上げます．また，これ以外の雑誌についても複数の前委員の方から情報をいただいて掲載しております．さらに該当誌の出版社にご協力いただいている例もあります．この場を借りまして併せて御礼申し上げます．なお，文献紹介欄につきまして，採り上げるべき雑誌などのご意見がありましたら，編集部までお寄せ下さい．

（編集委員長　石塚英弘）



ISSN 0913-3747

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 8, Number 4
July 1990

目　次

部会行事

第３回情報化学夏期セミナー
—情報化学・基礎と応用—

主催　日本化学会情報化学部会

日時　８月２９日（水）１３時—８月３０日（木）１１時　（１泊２日）

会場　湯河原厚生年金会館（〒413 熱海市泉１０７　Tel 0465-63-3721）

参加申込締切　定員４０名になり次第締め切らせて頂きます。申込状況は下記申込先までお問い合わせ下さい。

話題提供

第１日（８月２９日）

１	化合物の構造表現とデータベース	（富士写真フィルム）	花井荘輔
２	これからの分子力学	（藤沢薬品）	今井啓祐
３	分子動力学入門	（京大理）	片岡洋右
４	分子グラフィックス	（システム）	伊賀祐一
＊	フリートーキング（夕食後）		

第２日（８月３０日）

５	ニューラルネットワークの化学への応用	（富士通）	湯田浩太郎
６	コンピュータ化学の応用展開	（旭硝子）	石田嘉明

参加費（資料代および２９日夕食から宿泊、３０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３回情報化学夏期セミナー申込」と題記し、①氏名、性、年齢　②勤務先、職名　③会員資格　④連絡先、電話番号を明記して、下記申込先宛お送りください。
会場の詳細な案内ならびに参加費支払い方法は申込締切後お知らせいたします。

申込先

〒113 文京区弥生２—４—１６　化学情報協会　（Tel 03-816-3574）　佐藤明子

内容等の問い合わせ先

〒141 品川区大崎４の２の１６　立正大学教養部　（Tel 03-492-3840）　今井　賢

部会記事

情報化学部会　アンケート集計結果の報告

（平成２年４月１日実施）

日本化学会第５９春季年会の化学情報・計算機化学の会場で、情報化学部会の平成２年度活動についてアンケートをお願いした。当部会員でない人が当然大勢おられるので、参考資料として平成元年度の活動状況を、情報化学討論会、CICSJ Bull.、日化春季年会、セミナー、研究会・ワークショップ、協力関係、部会運営の７項目にわけて簡単に書いたメモを同時に配布した。アンケートの集計結果は次のようであった。

１．アンケート回答者３０名　情報化学部会員　１４名　その他　１６名

２．セミナーについて（平成元年度を参考にして）

内容と程度を変えずに継続　２４名　その他　６名　（無回答４）

発展させれば参加を希望　１６名　その他　１４名　（無回答２）

３．ワークショップについて（平成元年度を参考にして）

１）機械処理	参加したい　９名	その他　２１名		（無回答５）
２）ケモメトリックス	興味あり　１２名	その他　１８名		（無回答６）
・分野は？	現状通り　６名	その他　２４名		（無回答１０）
・進め方は？	ソフト中心　３名	応用例中心　５名	全般的　９名	
		（２通り回答１件）		（無回答１４）

４．今後の希望テーマ

セミナーについて：

・無機材料化合物の情報化学　　・無機材料凝集体の情報学

・情報部分の基礎　ＰＣハードウエア
　ＰＣソフトウエア（コンパイラ、グラフィック）
　互換性

・分子設計、反応設計における新しい理論、技術

・ケモメトリックス　　・ＬＡ

・化学教育　　・データベースの新しい動向

・材料設計（高分子、セラミックス、合金、半導体等）

・分子動力学　　・モンテカルロ法

・グラフィックス　　・分子力学

・分子軌道法　　・ＱＳＡＲ

・生物化学における計算機利用の現状と展望について

・実験的な情報利用（軌道法、動力学 etc）の情報交換、セミナー

ワークショップについて：

- 無機材料物関連の情報・計算化学
- 凝集物関連の情報・計算化学
- 機能材料
- 液晶
- 海外とのインターフェイス…システム、媒体の互換性
- 情報化学教育の基礎作り…標準カリキュラム、教科書
- 材料設計（高分子、無機、合金、複合材料、先端技術材料）
- ニューロコンピューティング
- 分子動力学研究会
- 実験的な情報利用（軌道法、動力学など）の情報交換、セミナー
- 海外とのプログラム流通、翻訳（ＩＢＭ／ＮＥＣ etc）上の問題
- 化学教育部会との協力でのworkshop
- エネルギー最小構造の自動生成
- ＡＭＢＥＲやＧＲＯＭＯＳを目標にした研究会

講演会について：

- 無機材料物関連の情報、計算化学
- 凝集物関連の情報、計算化学
- ＣＡＳの動向
- Ｒｅａｃｔｉｏｎ ｄａｔａｂａｓｅ
- 実験的な情報利用（軌道法、動力学など）の情報交換、セミナー
- ＵＮＩＸ
- ネットワーク利用
- ＬＡＮ
- 高分子、セラミックス、合金設計、機能性材料

５．情報化学部会への希望

- 研究交換を活発にする。
- 標準化、システムやＤＢの共同プロジェクト、出版を考える。
- ２～３年がかりでモノグラフ（シリーズ）をまとめられないか。
- 化学会がネットワークホストを作る。
- 昨年の活動内容について詳しく知りたい。
- ワークショップで利用できるような単行本の発行。（情報化学の分野は実務家向きの書物が少ない。）
- 情報処理（ソフト）流通機構は情報化学部会で行ってはどうか。

回答者の半数以上の方が当部会員でなかったことは、化学情報・計算機化学および情報化学部会への関心がかなり高いことがうかがえるように思う。このような貴重なご意見が一つでも多く反映できて、一人でも多くの人が参加できる情報化学部会を目指して、早速に進みたいと願うものである。　　（総務担当　藤枝修子（お茶女大））

年会プログラム

日本化学会第60秋季年会
情報化学関連講演*

日時　1990年10月2日（火）～5日（金）
場所　広島大学東千田町キャンパス

G3会場
〔化学情報・計算機化学〕
10月4日　15:30 ～15:40
3G326　^{13}C-NMR の検索同定システムにおける合致度に対する吸収強度因子の効果（II）
（日立計測・日立那珂）○田中保子・笹淵　仁・橋本正雄

A1会場
〔錯体化学〕
10月4日　10:50 ～11:00
3A112　Ni(0)-CO_2 錯体の構造と結合性に関するab Initio MO研究（熊本大工・分子研）
○榊　茂好・古賀伸明・諸熊奎治

B1会場
〔有機合成化学の新展開〕
10月5日　11:20 ～12:00
4B106　依頼講演　有機合成における新兵器―コンピューターの活用（東工大工）高橋孝志

E1会場
シンポジウム〔有機パイ電子系化合物の化学の新展開〕
10月2日　10:00 ～10:20
1E104　ビタミンEラジカルによるヒドロペルオキシドからの水素引き抜き反応の速度論とab-initio 計算による研究（愛媛大理）○澤田公平・向井和男・長岡伸一・福本洋二

E3会場
〔機能物質〕
10月3日　14:50 ～15:00
2E327　ピエゾクロミズムを示すヒドロキシアクリジン類の発色機構のAMI計算（阪府大研・阪府大工・岐阜大工・阪府産技研）○阿部康夫・中尾　廉・堀井豊一・北尾悌次郎・中澄博行・松居正樹・柴田勝喜・村松広重・夏川一輝

Ｆ２会場

〔有機化学―物理有機化学〕

10月４日　15:50 ～16:10

３Ｆ２３０　分子力場パラメータの最適化（32）エーテルの配座エネルギーの計算に与える基底関数の選択、電子相関の影響（化技研）〇都築誠二・田辺和俊・内丸忠文

３Ｆ２３１　ウラシル互変異性化反応のＡＭ１計算（阪府大研・阪府大総科）〇阿部康夫・中尾　廉・堀井豊一・北尾悌次郎・林　幸生・谷口　節男

10月５日　10:10 ～10:20

４Ｆ２０５　計算化学的手法による反応性予測（３）アクリル酸メチルとプロペンの間のエン反応の非経験的分子軌道法計算による解析（化技研・東大理）〇内丸忠文・都築誠二・田辺和俊・林雄二郎

Ｇ１会場

〔第３周期以降の元素を配位原子とする金属錯体〕

10月５日　 9:40 ～10:00

４Ｇ１０３　白金（０）－エチレン、シノン、ジシレン錯体の構造と結合性に関するab Initimo研究（熊本大工）〇榊　茂好・家城雅美

Ｇ２会場

シンポジウム〔分子分光法と磁気共鳴法の新展開〕

10月３日　16:00 ～16:20

２Ｇ２１４　^{13}C-NMR スペクトルのコンピュータ解析による混合物の組成分析（鐘紡化粧品研）〇菅井紀久子・菊池　源・島村公雄・本田計一

Ｋ３会場

〔化学教育・化学史〕

10月３日　10:40 ～11:20

２Ｋ３０７　パソコンによる化学実験シュミレーションプログラムの開発（埼玉大理）〇田中威朗・下沢　隆

２Ｋ３０８　化学教育に用いるマイコン用オーサリングシステムの開発（埼玉県立伊奈学園高・埼玉大理）〇岡村起代之・下沢　隆

２Ｋ３０９　化学教育におけるパーソナル・コンピュータの活用（鈴峯女子短大）岡本信子

２Ｋ３１０　コンピュータを利用して化学（学生）実験データーを処理させた時の教育効果について（２）（大阪工大）大植弘義〇清水亮作・熊沢博美・飯田健郎

Ｌ１会場

シンポジウム〔次の世代を育てる化学教育〕

10月４日　 9:20 ～ 9:40

３Ｌ１０２　薬学部基礎化学教育におけるＣＡＩの利用、学生が積極的に取り組む教材とは？（神戸学院大薬）山岡由美子

10:00 ～11:00

3Ｌ１０４　依頼講演　マイコンは化学教育に生かせるか（埼玉大理）○下沢　隆

3Ｌ１０５　パソコンービデオプロジェクターの有機化学教育への活用（香川医大）○獅々堀彊・倉橋研吾

10月５日　15:20 ～15:40

4Ｌ１１４　工科系大学における一般教育「化学」（Ⅲ）教養課程「化学」教科書データベースの作成（広島工大）石田　孝

★講演時間はシンポジウム　応募講演　20分（講演15分・討論５分）
招待講演　60分（質疑応答を含む）
依頼講演　40分（質疑応答を含む）
一般研究発表　講演　10分（講演７分・討論３分）です。

＊今回は発表がいろいろな分野に分散していますので、プログラムから抜き出してみました。ただし、タイトルのみで判断しましたので、抜けがあるかもしれませんが、その際はご容赦下さい。

（編集委員会）

関　連　行　事

1991情報学シンポジウム

知的情報の資源化とその高次処理をめざして

論　文　募　集

背　景

本シンポジウムは、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・情報・知識に関する基本的問題を論じる場として、１９８４年以来毎年開催されている。これまで、データ・情報・知識の獲得・蓄積・利用の問題について、自然科学から人文科学まで多様な専門分野から発表が行なわれている。

１９９１年のテーマ

今回は、以下のテーマに重点をおいてセッションを構成する予定である。

1．ハイパーメディア・ハイパーテキスト
　a）ハイパーメディアのモデル・理論・技術
　b）高度利用者インターフェース・マルチメディアデータベースの構築
　c）ハイパーテキストシステムの応用例
2．全文データベース
　a）マルチメディア全文データの入力・管理・利用
　b）テキストデータベースのアクセス手法
3．バイオ・データベース
　a）バイオ・データベースの構築と利用
　b）知識ベースおよびファジー理論のバイオ・データベースへの適用例

共同主催（予定）

日本学術会議　情報学研究連絡委員会
　　　　　　　学術文献情報研究連絡委員会
　　　　　　　学術データ情報研究連絡委員会
　　　　　　　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（予定）

学術情報センター、計測自動制御学会、国際電信電話（株）、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、日本生化学学会、日本電信電話（株）、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

日　　時

１９９１年１月８日（火）～９日（水）　９：３０～１７：００

場　　所

日本学術会議講堂（地下鉄千代田線、乃木坂駅下車）

参加申し込み

氏名、連絡先、資料必要の有無を葉書に記入し１２月２０日までに下記に申し込む。
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（資料代として）

共催学協会員	５、０００円
学生	１、５００円
一般	７、０００円

論文申込方法

ワープロ使用でＡ４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てに申し込む。

論文申込締切

１９９０年８月３１日（金）必着

採否通知

プログラム委員会で審査し、採否は１９９０年１０月１日までに通知する。

最終原稿締切

１９９０年１１月３０日（金）必着

宛　　先

情報処理学会　情報学シンポジュウム担当　木村保明
〒１０６　東京都港区麻布台２－４－２　保科ビル３Ｆ
電話　０３（５０５）０５０５

講演会「理論化学のフロンティア――*ab initio*法は何に使えるか」

主催　日本化学会関東支部

日　時　平成２年11月８日（木）９時30分～16時45分

会　場　東京理科大学記念講堂１７Ｆ〔☎０３（２６０）４２７１㈹〕

〔交通〕ＪＲ中央・総武線、地下鉄東西線、地下鉄有楽町線「飯田橋」駅下車、徒歩２分。

量子力学を分子の問題に適用する際、最も信頼できる正統的な方法として、非経験的分子軌道法（*ab initio*法）は、ますますその重要性を増しつつある。本講演会では、現在この分野で先端的な研究をされておられる諸先生に講師をお願いし、主として、「どのように使えるか」という立場から平易に解説していただく。

内　容　（講演５０分、質疑１０分）

１．*ab initio*法の最近の進歩
（９：３０～１０：３０）　慶応義塾大学理工学部　岩田　末広　氏

２．高周期典型元素化合物の構造と反応の特性
（１０：３０～１１：３０）　横浜国立大学教育学部　永瀬　茂　氏

――――――――昼　食――――――――

３．金属触媒サイクルの反応経路
（１３：００～１４：００）　分子科学研究所　諸熊　奎治　氏

４．マイクロコンピュータによる*ab initio*計算
（１４：００～１５：００）　分子科学研究所　北浦　和夫　氏

――休　憩（ロビーでワークステーションによるデモを行う予定です）――

５．金属錯体の配位結合と大規模計算
（１５：４５～１６：４５）　九州工業大学情報工学部　柏木　浩　氏

参加費（講演要旨代を含む）会員１０，０００円、学生６，０００円、非会員１５，０００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（１０，０００円）扱いといたします。

参加申込方法　ＦＡＸ、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・法人会員）、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　普通預金　口座 No. ３５８４６９　名義：㈳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。
なお、銀行送金の場合は、事務処理円滑化のため振込日、振込先銀行をなるべく明記して下さい。（開催日までにご送金願います。）参加証は概ね１週間前にお送り致します。

申込先　１０１　東京都千代田区神田須田町１－９　教信木田ビル（社）日本化学会関東支部
講演会係　電話（０３）２５８－９８１３、ＦＡＸ（０３）２５８－９８１０

計算化学講習会

第４回「パソコンによるコンピュータケミストリー入門」

主　催　先端科学技術・情報教育センター
共　催　ＣＢＩ研究会
日本化学会情報化学部会
日本化学プログラム交換機構

日　時　９月13日（木）、10月15日（月）、11月15日（木）、12月10日（月）、１月28日（月）、２月25日（月）の６日間　６回　10:30 ～ 17:15（ただし、13:30 ～ 14:15は休憩）

会　場　東京・上野・ＪＲ上野駅構内パソコンステーション上野（東京都台東区上野７－１　東日本旅客鉄道㈱　電話(03)847-2270)

１．分子力学法（京大理）今城文雄
２．分子動力学法（北大理）川村雄行
３．量子力学入門（埼玉大工）時田澄男
４．経験的および半経験的分子軌道法（兵庫教大）木原　實
５．ＭＮＤＯ型半経験的分子軌道法（長岡技科大）内田　希
６．非経験的分子軌道法（分子研）北浦和夫

参加費　主催共催団体会員160,000 円、国公立研究機関・大学の研究者220,000 円、その他285,000 円（以上全期間）、大学院生、大学生は定員に余裕がある場合に限り一回毎に2,000 円。費用は教材ソフト込み。

申込先　〒101 東京都千代田区神田淡路町１－３－２　広屋ビル８Ｆ　先端科学技術・情報教育センター（電話(03)255-8735 FAX(03)254-8040)）担当　岡　すみれ

ＣＣＳの紹介

高分子材料設計支援システムＥＸＰＯＤ

㈱　三菱総合研究所
応用システム部
山内　正

1．はじめに

化学材料に対する知識やデータの多様性、多量性、個々の記述レベルの独自性のため、この分野における研究・開発支援システムの実用化事例は、薬品設計や合成設計など比較的早い時期から研究が着手された分野を除いて、数少ないのが現状です。

一方、新素材開発競争の激化、知的所有権の保護化といった動きは、化学産業、材料開発の分野においても設計作業の効率化、情報の迅速・円滑な管理・運用の実現が急務であることを示唆しています。

高分子材料は、分子量や分子形態が低分子化合物に比べ、きわめて複雑・多様であり、さらにその特性には、加工方法や合成方法の影響が複雑に絡みあいます。こうした高分子の物性におけるあいまい性・非決定性により、高分子材料に対する設計は、どうしても専門家の直観や試行錯誤による実験に頼らざるを得ない傾向にありました。

以上の背景の下、高分子材料の設計・開発の効率化、高分子化合物に関する情報の有効利用といった観点から、昭和電工、住友化学工業、東レ、三菱化成各社のご協力を得て開発いたしました、高分子材料設計支援システムＥＸＰＯＤ（ Expert System for Polymer Design）について説明いたします。

2．ＥＸＰＯＤの実現手法

ＥＸＰＯＤシステムの主な機能は、ポリマーの構造から、諸物性の関係式、原子団寄与に関するパラメータ等の半経験則を用いた、融点、ガラス転移温度などの基本的な物性値の推算です。（半経験則という名称は、物性値計算に用いる式は理論に基づいたものを用いているが、パラメータ・補正項等は、個々の物質、条件毎の測定結果をもとに経験的に定められていることによります。）

この機能により、目的とするポリマーの諸特性を合成する前に推定したり、全く未知のポリマーについて各種特性を評価し、有用なポリマーを発掘することができます。その効果として、見捨てられあるいは見落とされていた新規ポリマーの開拓が期待されるようになります。特に、種類及び、構造の多種・多様性から物性値データの収集が完備しているとはいえない高分子化合物の設計に際しては、重要な役割を果たすと考えられます。

ＥＸＰＯＤでは、こうした機能を高分子に関する知識・データを共有し、管理・利用することにより実現しています。具体的には、知識ベースとデータベースとが一体となったエキスパートシステムとして、高分子研究者が直接データや知識を変更追加できる、拡張性のあるシステムを実現しています。

知識ベースやデータベースには、ポリマーの物性を推算する際必要となる高分子に関する情報が格納されます。ポリマーに関するデータや代表的な推算法は、収集・整理されＥＸＰＯＤに格納されています。更に、同じ形式で各ユーザ独自の知識・データを格納する

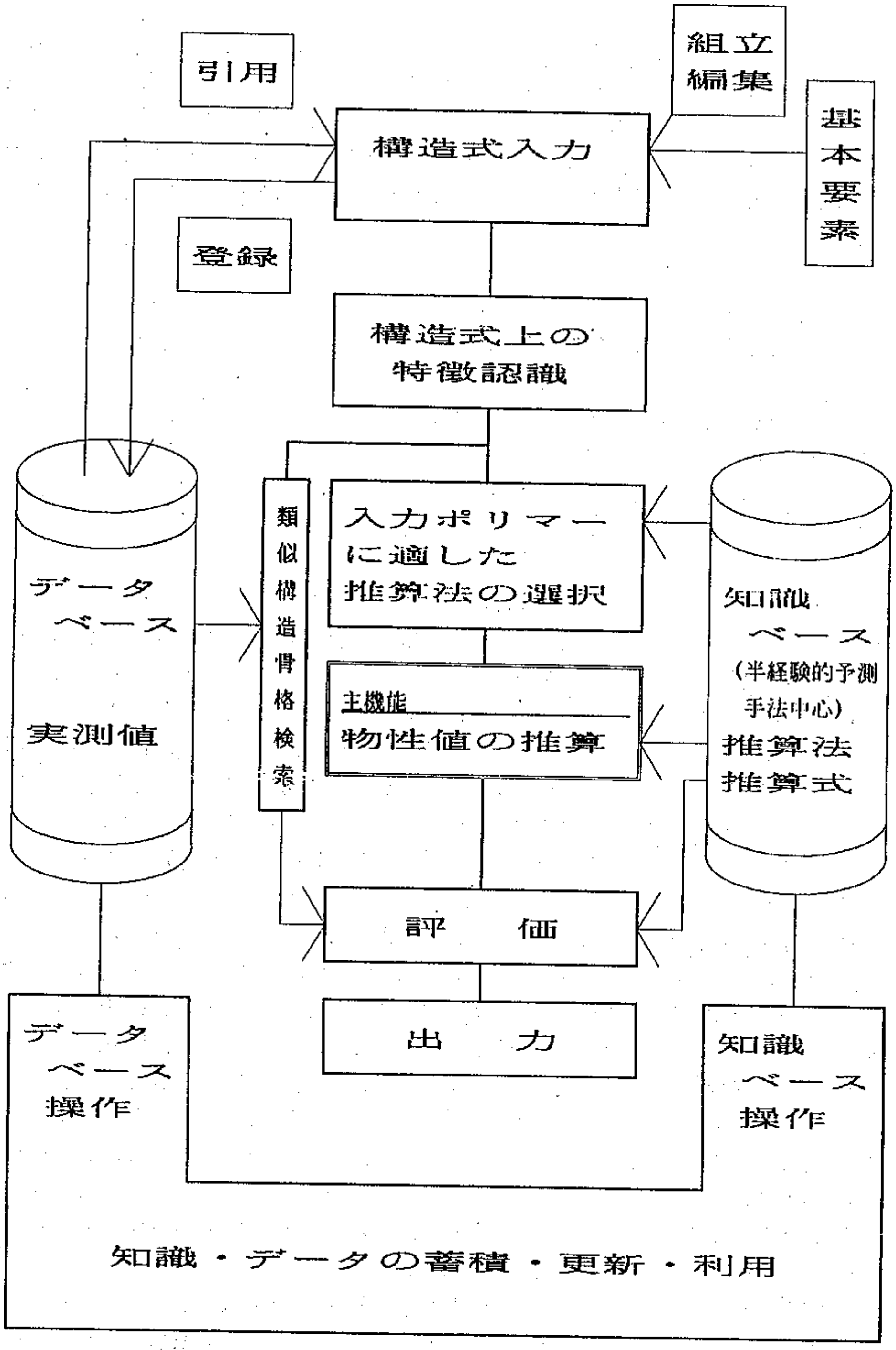


図1　EXPODの利用システムイメージ

ことが可能です。

図１は、知識ベースとデータベースを用いたＥＸＰＯＤの利用イメージを示したものです。高分子研究者が、部分構造の組立、既存のポリマー構造の引用などからポリマーを設定入力し、知識ベース上に登録されている推算法を用いて物性値の推算を行います。この時、物性値の推算に留まらず、実測値データベース（線状ホモポリマーを中心）から類似構造骨格検索を行ったり、定性的知見からなる知識ベースを参照し、推算結果の検証を行います。

３．システム構成

ＥＸＰＯＤで取り扱う知識・データは、

① 実測データ　（事実）

② 高分子化合物の構造に関する情報　（構造）

③ 半経験的予測法　（規則）

④ 経験則（定性的知見）　（規則）

⑤ 推算方法の使い分けに関する知識　（規則）

のように大別されます。

この中で、実測データに関する情報はポリマーデータベースに、構造に関する情報は、ポリマーデータベース、部分構造辞書、さらに部分構造の集合としての構造単位フォルダーに格納されています。ポリマーデータベースは、高分子材料向けの構成（約１６０個の格納論理項目）をとっており、物質名及び構造式、分子構造、各特性データの３階層に分けてデータが格納されています。また、構造式の内部表現にあたっては、高分子を表現する上でよく用いられる原子及び、いくつかの原子で構成された原子団（部分構造）を基本要素として定義し、各原子団をグラフの点に対応させる方法を採用しています。

ＥＸＰＯＤでは推算に関する知識（推算法自身、推算法の使い分け方）や定性的知見等の各種知識は追加、変更が行えるよう知識ベースに格納されています。知識ベースは、利用形態、操作性の観点から、推算法ベース、推算式ベース、パラメータテーブル、ストラテジーベース、定性的知見ベースとして管理されています。各知識ベースは、知識を蓄積・変更・利用しやすく、且つ他の物性への拡張性を図るため知識表現言語を用いて記述されています。この知識表現言語を用いて、ユーザは独自の知識の変更・追加を行うことができます。知識表現言語は、使用可能なシンボル（文字）、演算子、推算式、推算方法、テーブルの記述形式、特殊な関数や条件式、制御構造の記述に対して形式を規定したものです。更に、ポリマーの類似度やポリマーの属する系を分類・定義するための知識がシステムに組み込まれています。

図２にＥＸＰＯＤのシステム構成を示します。システムは、データベース、知識ベース群と５つの機能モジュール群とから成り立っています。

動作環境としては、今後の『研究開発支援環境の分散化』を想定し、ハードウェアとして、ＵＮＩＸ系のＷＳ（ワークステーション）をターゲットにしています。現在Ｓｕｎ、ＮＥＷＳ、ＨＰ、ＮＥＣ各社のマシン上（主記憶１６Ｍ以上）で動作します。システム記述言語には、ＣとＩＦ／Ｐｒｏｌｏｇを用い、ユーザインタフェースには、Ｘウィンドウをベースとしたマルチウインドウによる表示、マウスを中心とした入力方法を採用しています。

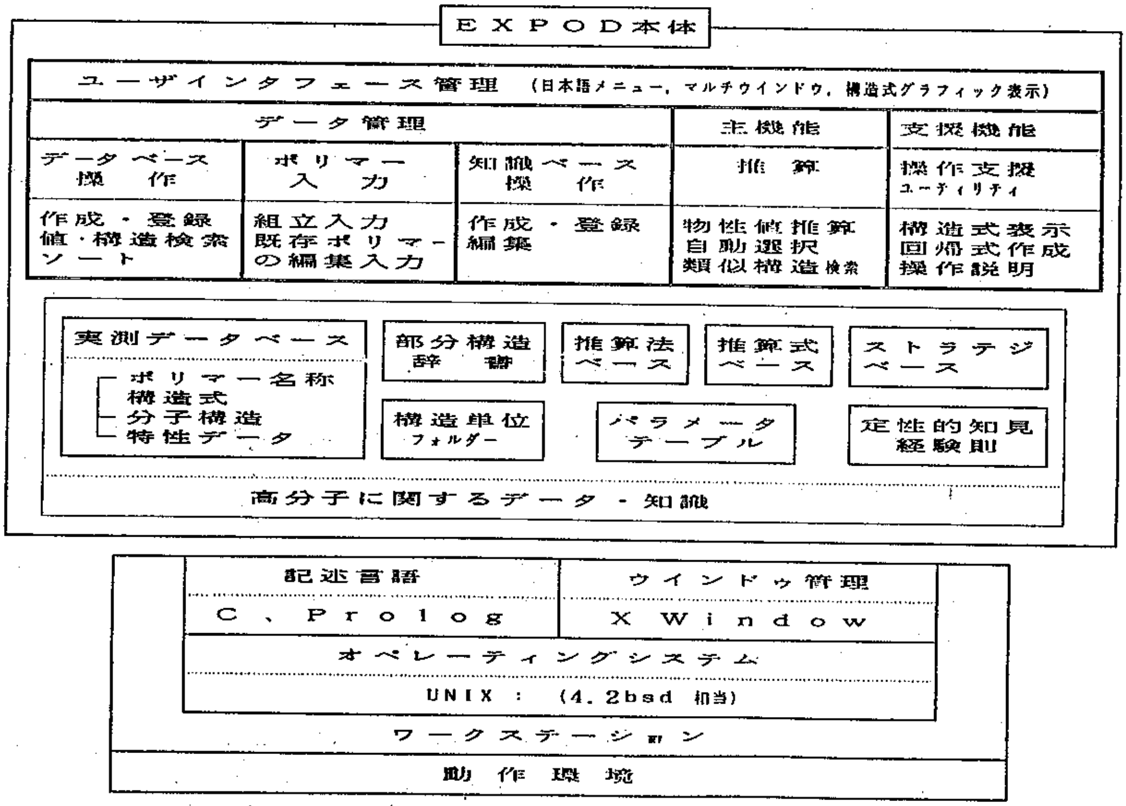


図２　ＥＸＰＯＤのシステム構成

4．ＥＸＰＯＤの機能

ＥＸＰＯＤのシステム機能は、以下の５つに集約されます。

(1) データベース操作機能

ポリマーデータベースはポリマーの構造情報、特性情報を蓄積・管理します。ポリマーデータベースに対する機能として、

- データ登録、編集機能
- ポリマーを選択する検索機能
- データを並び替える機能

等があります。選択したポリマーに対する検索の視点としては、

・ポリマー名称・分子構造に着目した項目検索

・物性値に着目した項目検索

の２段階の検索操作が行ます。

選択した検索結果は、検索条件を満たすポリマー単位にデータベース内に保存され、再度検索・しぼりこみの対象とすることも可能です。

(2) ポリマー入力機能

ポリマー入力機能には、

・　ポリマーの構造式を作成・編集する機能
・　ポリマー系を認識する機能
の２つの機能があります。

①　構造式の作成・編集

ポリマーの繰り返し単位の構造式を以下の２つの方法で入力できます。

(a)　組立入力

構造式をその構成要素（部分構造）から組み立てて作成できます。作成に使用する構成要素が約２００種類（結合形態の差異を除く）用意されており、システムで提示する部分構造（基本要素メニュー）およびユーザーが基本要素メニューから作成して登録した構造単位フォルダーが利用できます。

(b)　既存ポリマー構造の編集入力

データベースに登録済みのポリマー構造（約２５００件）に部分構造の追加、削除等の編集を行って、新たな構造式を作成することができます。

②　ポリマー系の自動認識

ポリマーは、現在２１種類のポリマー系に分類されていますが、ポリマーデータベースに登録する際に、構造式から、システムがこのポリマー系分類を自動的に行い、ユーザーに結果を提示します。

(3)　知識ベース操作機能

知識ベースには、推算法および推算法の使い分けに関する知識等を蓄積・管理することができます。ユーザの方は、既に登録された知識を利用して、各自の推算法を組み立てることもできます。

①　作成機能

システムが提供する知識ベースに格納されている推算法を利用して、ユーザーが新たに推算法を作成できます。推算法を作成するには、推算に利用する式、パラメータテーブル、それらの適用順序を各々、ＥＸＰＯＤ専用の知識表現言語で記述、登録します。

②　登録・編集機能

ユーザーが作成した知識ベースに登録した推算法、推算式、パラメータテーブルを文字列の編集機能を使って編集できます。

③　削除機能

ユーザーが作成し、知識ベースに登録した推算法、推算、パラメータテーブルを知識ベースから削除できます。

(4)　推算機能

推算機能には、指定ポリマーの指定特性を推算する機能（推算実行）と指定ポリマー構造と類似の構造骨格を持つポリマーを検索する機能（類似骨格検索）の２つの機能があります。

①　推算実行

知識ベース中の推算法を用いて、特性の推算を行う機能です。推算法はシステムが提供する推算法およびユーザーが作成した推算法に分類されます。本システムが対象とする特性については、ユーザーが作成した推算法も、システムの提供する推算法も、

同じ知識ベースという土俵で、推算する特性、推算法を指定するという具合に同様の手順で実行できます。

② 類似構造骨格検索

推算対象ポリマーと構造式が似ているポリマーを検索する機能です。構造についての類似性（類似度）を評価するため、繰り返し単位の構造式の構成要素の種類、各要素の個数、結合順序に着目した複数の計算式（評価関数）が用意されています。これらの評価関数の重み変更することにより、異なった視点でユーザーが検索を行えます。

(5) 支援機能

操作支援メッセージや構造式を表示したり、回帰式を作成し推算式として利用する機能があります。

5．ＥＸＰＯＤの特徴

ＥＸＰＯＤは、高分子研究者にとって使いやすいシステムをめざしています。そのために、

- 代表的なポリマーデータ・推算知識の整理提供
- 専門家が知識を、容易に拡張・変更・蓄積できる環境の実現
- マルチウィンドウを用いたユーザフレンドリーなインタフェース
- 高分子材料設計に関する知識・データのモデル化

を行っています。

これらの特徴により、

- ポリマーに対する基本特性値の推算
- 高分子に関するデータ・知識の管理・運用を効率的に行う基盤

が実現されています。

6．おわりに

高分子研究者の知見を計算機で蓄積・管理し、開発担当者の高分子に関する発想を支援する広範な情報を即座に提供していくためには、今後も機能を拡充していく必要があると考えられます。今後の課題と考えられる項目としては、以下のものがあります

- 各種の物性についての要求値を満足する候補ポリマー探索機能の実現
- 多成分系（共重合体、ポリマーアロイ）への適用
- 実用特性（力学的特性など）への拡張
- 新しいモデル・理論に対する拡張容易性の確保
- 高分子研究者が容易に操作できる柔軟性・拡張性を有する知識表現の実現

本システムの実用化は、国内４０社余りの参加を得た共同プロジェクトとして実施されました。専門家の知識が不可欠なエキスパート・システムの実用化は、一朝一夕では完遂せず、事前の充分な検討・試行と高分子の専門家の方々の広汎な協力が不可欠です。

最後に、実用化にあたって、膨大な知識・データ収集にご協力戴いた、昭和電工、住友化学、東レ、三菱化成の方々、及び、アドバイザーの高柳、藤重、田辺諸先生に深謝し、結びの言葉に替えさせていただきます。

参考文献
〔1〕高分子材料設計支援システムの検討
和田、吉光、安田、山内
三菱総合研究所報　　　　N015 1988

〔2〕高分子材料設計支援システム「ＥＸＰＯＤ」
山内、吉光、和田
PROLOG産業応用シンポジウム論文集 1989

〔3〕高分子材料設計支援システム「ＥＸＰＯＤ」
―基本概念とシステム構成―
山内、谷口、飯沼、鷲、吉光
情報処理学会全国大会 1990 年9月発表予定

〔4〕高分子材料設計支援システム「ＥＸＰＯＤ」
―知識管理機能と実現方式―
飯沼、山内、長阪、矢田、吉光
情報処理学会全国大会 1990 年9月発表予定

連絡先：〒101 千代田区大手町２－３－６　タイムライフビル
㈱三菱総合研究所　応用システム部　応用システム室
☎03(277)0575

国際会議

2nd International Meeting on Chemical Structures

関西学院大学　岡田 孝

表記の学会が，オランダのLeiden近郊Noordwijkerhout（ﾉｰﾄﾞﾜｲｶｳﾄと発音？）という田舎町にあるLeeuwenhorst Congress Centerにおいて，本年6月の3日－7日の5日間開催された．主催者は，Chemical Structure Associationと英米独蘭各化学会の化学情報グループである．会議には，ヨーロッパと北米を中心に14カ国から180名程度の参加者があったようである．発表は英米独の3国からのものが多く，なかでも主催学会の関係か，Sheffield グループを中心とした英国が力をいれているように思えた．日本からは，豊橋の阿部氏と筆者の2名が参加し，発表も行なった．

会議名は化学構造という非常に一般的なものであるが，その内容は後に示すプログラムからもわかるように，化学構造情報のコンピュータによる取扱に焦点がしぼられている．筆者の主観ではあるが，会議全体の焦点がしぼられているせいか，興味の持てる発表の比率が多いように思われた．なお本会議のProceedingがSpringer社から出版予定とのことであり，詳細については，そちらを参照して頂きたい．

Van Goch展，Amsterdam の運河めぐりへの遠足や，各種ソフトウェアの展示会も含まれており，なかなか楽しく過ごさせて頂いた．また会議の最後には，組織委員会が選んだありとあらゆる賞？（各種締切を最もきっちりと守ったWillett さん，最もたくさん質問した誰かさん，講演時間オーバのWipke さん，未だにProceedingの原稿を出していない15人ほどの人，コーヒータイムに服を着替えたダンディーなBrandtさん，等々）が披露されたのには爆笑した．私もDowns，Brandt両氏とともにlearnedなるものに指名され，意味ははっきりしないが悪いことでもないようなので一安心したことであった．参加者の投票で決めるBest speakerには、「時計を一つ持っている人は時刻が分かる。時計を二つ持っている人は、決して時刻が分からない。」の名文句から命名法システムの講演を始めたWisniewski氏が選ばれた。3年先の第3回の会議には，もっと多くの方とともに日本から参加したいものである．

TECHNICAL PROGRAM

Sunday June 3

14.00　Meeting of the Standard Molecular Data File Group

16.00　Tea

16.15　Business Meeting ACS-CINF

17.15 1 Keynote address: 'Chemistry in Three Dimensions', Ernest Eliel, University of North Carolina, Chapel Hill

18.00 Rijsttafel Dinner courtesy of Springer-Verlag

Monday June 4

Wendy Warr presiding

9.00 2 'Optical Recognition of Chemical Graphics', Stephen Boyer, IBM Almaden Research Center

9.25 3 'A Personal Computer Program System for NMR Database Construction', Hidetsugu Abe, Toyohashi University of Technology

9.50 4 'Integrating Chemical Nomenclature Interfaces to Structure-Based Information Systems', Mark Lord, University of Hull

10.15 5 'AUTONOM – A Chemist's Dream: System for (Micro)Computer Generation of IUPAC-Compatible Names from Structural Input', Janutz Wisniewski, Beilstein Institute

10.40 Break

Martyn Wilkins presiding

11.10 6 'Searching a Full Generics Database', Valerie Gillet, University of Sheffield

11.35 7 'Automatic Translation of GENSAL Representations of Markush Structures into GREMAS Fragment Codes at IDC', G Stiegler, IDC Internationale Dokumentationsgesellschaft für Chemie

12.00 8 'Chiral Structure Database for Saccharides', Nancy L Porter, Maxwell Online

12.25 9 'Addition of Node/Bond Stereochemistry to the CAS Registry File', Paul Blower, Chemical Abstracts Service

13.00 Lunch

16.00 Poster Sessions and Exhibition

Posters chaired by David Johnson

Tuesday June 5

David Johnson presiding

8.35 10 'Stereochemical Substructure Searching: Handling of Relative Configurations', Paul Blower, Chemical Abstracts Service

9.00 11 'The Du Pont Global Technical Information System', Jean Marcali, E.I. du Pont de Nemours & Co

9.25 12 'Structure Registration for Beilstein Online', Steve Welford, Beilstein Institute

9.50 13 'A New Structure Search System', Peter Rusch, Dialog Information Service

10.15 14 'The DARC Inhouse Packages as a Library of Standalone Functions for Building Applications in Handling Chemical Information', Pascal Huguet, Questel

10.40 Break

Gerry Vander Stouw presiding

11.10 15 'Rings – The Importance of Being Perceived', Geoff Downs, Barnard Chemical Information Ltd

11.35 16 'Computer Representation and Searching of Chemical Substances', Doug Hounshell, Molecular Design Ltd

12.00 17 'Information Integration: Distributed Chemical Information Management Systems', Dennis Smith, Molecular Design Ltd

12.25 18 'Integrating Chemical Structures into an Extended Relational Database System', Tom Hagadone, The Upjohn Company

13.00 Lunch

17.00 Annual General Meeting of the Chemical Structure Association

18.30 Dinner

Wednesday June 6

Peter Nichols presiding

8.35 19 'Representation and Searching of 3-D Protein Structures', Peter Willett, University of Sheffield

9.00 20 'Conformational Freedom in 3-D Databases', Nick Murrall, Chemical Design Limited

9.25 21 'Using 3-D Similarity Searching to Develop Synthetic Targets', Charles Eyermann, E.I. Du Pont de Nemours Experimental Station

9.50 22 'Strategies for the Evaluation of Hits from 3-D Substructure Searching', Yvonne Martin, Abbott Laboratories

10.15 23 'Chemical Structure Handling Using the Distributed Array Processor', Peter Willett, University of Sheffield

10.40 Break

Bill Town presiding

11.10 24 '3D Search and Numerical Analyses Applied to Files of Crystallographic Data: Methodologies, Examples, and Integration with 1D and 2D Techniques', Frank Allen, Cambridge Crystallographic Data Center

11.35 25 'An Integrated Approach to 2D and 3D Similarity Searching for the Cambridge Structural Database (CSD)', Eleanor Mitchell, Cambridge Crystallographic Data Center

12.00 26 'Molecular Dissimilarity in Chemical Information Systems', David Bawden, Pfizer Central Research

12.20 27 'Similarity and Analogy Based on Discrimination Net', Takashi Okada, Kwansei Gakuin University

Thursday June 7

Reiner Luckenbach presiding

9.00 28 'Similarity Criteria for Chemical Structures and Reactions', Johnny Gasteiger, Technical University Munich

9.25 29 'The Path Matrix, A Useful Tool for Coding Cyclization Reactions', Josef Brandt, Institut für Organische Chemie

9.50 30 'The Computer Aided Design of Organic Reactions', Rainer Herges, University of Erlangen-Nürnberg

10.15 31 'Chemical Reaction Retrieval Using Citation-Based Relationships', Dan Meyer, Advanced Research Technology

10.40 Break

Joanne Witiak presiding

11.10 32 'Chemical Reaction Sequence Searching', Glen Hopkinson, ORAC Ltd

11.35 33 'Multistep Reaction Schemes in the Reaction Access System', Tom Moock, Molecular Design Limited

12.00 34 'Computer Invention of Molecular Structures', Todd Wipke, University of California

12.25 Summary, Wendy Warr, ICI Pharmaceuticals

POSTER

A Hierarchy of the Structure of Matter, from the Viewpoint of Information Retrieval and Structure-Property Correlations

S. Barcza, Sandoz Research Institute

The Standard Molecular Data (SMD) Format

J. M. Barnard, Barnard Chemical Information

Similarity Searching in the Development of New Bioactive Compounds. An Application

G. Grethe, Molecular Design Ltd

Macromolecules: Structure Representation and Nomenclature

W. V. Metanomski, J. E. Merritt, Chemical Abstracts Service, K. L. Loening, Topterm

Calculation of Three-Dimensional Structural Similarity

C. A. Pepperrell and P. Willett, Department of Information Studies, University of Sheffield

Multiplatform Chemical Structure Management

M. Peeters and D. Verbinnen, Janssen Research Foundation

Selection of Screens for 3-D Substructure Searching

A. R. Poirrette and P. Willett, Department of Information Studies, University of Sheffield

'B-Base' – A Structure-Oriented Numerical Factual Database for ^{11}B-NMR Spectroscopy and Related Information About Other Nuclei

H. Nöth, E. Striedl, Institut für Anorganische Chemie

Inter-Molecular Similarity and Clustering Methods for Prediction of Toxicity

P. T. Walsh, Health and Safety Executive, and P. Willett, Department of Information Studies, University of Sheffield

GEMINI: A Generalized Connection Table Language and Interpreter

David Weininger and Arthur Weininger, Daylight Chemical Information Systems

海外動向

MEETINGS

6-10 August 1990.
10th International Congress on Physical Organic Chemistry.
Haifa, ISRAEL.
Contact: Prof. Yitshak Apeloig, Dept. of Chemistry, Technion-Israel Institute of Technolgy, Haifa 32000, ISRAEL.

11-15 August 1990.
The Fourth Protein Society Symposium.
San Diego, CA.
Contact: Mary K. Woods, Dept. of Biochemistry, SJ-70, University of Washington, Seattle, WA 98195 (206-526-9936).

15-17 August 1990.
Computers and Advanced Technology in Medicine, Healthcare and Bioengineering.
Honolulu, HI.
Contact: Biomed '90, IASTED Secretariat, P. O. Box 25, Stn, G, Calgary, Alberta T3A 2GI, CANADA (403-270-3616; FAX: 403-270-8855).

15-17 August 1990.
Expert Systems and Neural Networks.
Honolulu, HI.
Contact: ESNN IASTED Secretariat, P. O. Box 25, Stn, G, Calgary, Alberta T3A 2G1, CANADA (403-270-3616; FAX: 403-270-8855).

23-25 August 1990.
Workshop on Desktop Molecular Vision.
Bethesda, MD.
Contact: William R. Light, Center for Bio/Molecular Science and Engineering, Code 6090, Naval Research Laboratory, Washington, DC 20375 (202-767-1154; E-mail: Light1@nrl3.nrl.navy.mil).

26-31 August 1990.
200th ACS National Meeting.
Washington, DC.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

28-31 August 1990.
コンピュータの材料科学・工学への応用　国際会議・展示会(CAMSE '90)
連絡先：CAMSE '90 事務局　〒101 千代田区九段北1-8-10　日刊工業新聞事業局内 (03-222-7162, FAX; 03-221-7137)

2-8 September 1990.
21st European Peptide Symposium.
Platjad'Aro, SPAIN.
Contact: Ms. Fina Armengol, 21st EPS Secretariat, BRP, Pau Claris 138, E-08009 Barcelona, SPAIN.

14-15 September 1990.
Challenges in Computational Chemistry (as part of the ACS Local Section Meeting, North Carolina).
Raleigh, NC.
Contact: Mike Whangbo, Dept. of Chemistry, North Carolina State University, Raleigh, NC 27695-8204 (919-737-3464) or Jeff Whitaker, IBM Corp., Dept. NB9, 4800 Falls of the Neuse Rd., Raleigh, NC 27609 (919-850-7872).

17-20 September 1990.
Molecular Graphics and Modelling Short Courses.
York, ENGLAND.
Contact: Dr. Carys Calvert, Short Course Coordinator, Dept. of Chemistry, University of York, Heslington, York YO1 5DD, ENGLAND (44-904-432-576-432-511; FAX: 44-904-432-516-433-433).

18-20 September 1990.
Scientific Computing & Automation Conference and Exhibition.
Philadelphia, PA.
Contact: Elsevier Science Publishers, P. O. Box 330, 1000 AH, Amsterdam, THE NETHERLANDS.

24-26 September 1990.
The Montreux 1990 International Chemical Information Conference & Exhibition
SWITZERLAND.
Contact: IBC Technical Services Ltd., Bath House, 56 Holbom Viaduct, London EC1A 2EX, ENGLAND; Telephone Inquires: Harry Collier Infonortics Ltd. (44-249-816-407; FAX: 44-249-813-656) or Lucinda Tosh, IBC Technical Services (44-71-236-4080, 44-71-489-0849).

10-12 October 1990.
Parallel and Distributed Computers, and Systems.
New York, NY.
Contact: Dr. R. Ammar, PDCS '90, U155, Computer Science and Engineering Dept., University of Conneticut, Storrs, CT 06268 (FAX: 203-486-0318).

10-12 October 1990.
Machine Learning and Neural Networks.
New York, NY.
Contact: Dr. C. A. Vassiliadis, ECE Dept., Ohio University, Athens, OH 45701 (FAX: 614-593-0007).

15-20 October 1990.
ELMAU 3: Computational Methods in Chemical Design.
Schlo β Elmau, WEST GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a.d. Ruhr, WEST GERMANY.(49-208-30-64-88 ; FAX: 49-208-30-46-07).

1-4 November 1990.
Molecular Modelling in Drug and Protein Design (part of International Conference of IEEE Engineering in Medicine and Biology Society).
Philadelphia, PA.
Contact: Dr. Janardan S. Yadav, Dept. of Information Services and Technologies, University of Medicine and Dentistry of New Jersey, 185 S. Orange Ave., Newark, NJ 07103 (201-456-3657).

12-16 November 1990.
SUPERCOMPUTING 1990.
New York, NY.
Contact: Dr. Joanne Martin, IBM, T. J. Watson Research Center, P. O. Box 218, Yorktown Heights, NY 10598 (914-945-3285)

28-29 January 1991.
Sixth Biennial Workshop on Computer-Assisted Chemistry.
New Orleans, LA.
Contact: Babu Venkataraghavan, Lederle Laboratories, Middletown Rd., Pearl River, NY 10965 (914-732-3406) or Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

14-19 February 1991.
The 41st International Pittsburgh Conference & Exhibition on Analytical Chemistry abd Applied Spectroscopy.
Chicago, IL.
Contact: The Pittsburgh Conference, Inc., Dept. Bro, 300 Penn Center Blvd., Ste. 332, Pittsburgh, PA 15235.

13-20 March 1991.
Hannover Fair CeBIT '91.
Hannover, WEST GERMANY.
Contact: Hannover Fairs USA Inc., 103 Carnegie Center, Princeton, NJ 08540 (609-987-1202).

8-14 April 1991.
UCLA Symposium on Protein Folding and Design.
Keystone, CO.
Contact: UCLA Symposia, 2032 Armacost Ave., Los Angeles, CA 90025 (213-207-5042; FAX: 213-207-2397).

14-19 April 1991.
201st ACS National Meeting.
Atlanta, GA.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

13-17 May 1991.
Eleventh Internationhal Meeting of the Molecular Graphics Society.
Chapel Hill, NC.
Contact: Dr. Fred Brooks, Jr., Dept. of Computer Science, University of North Carolina, Chapel Hill, NC 27599 (919-962-1931).

21-23 May 1990.
Computational Aspects of Inorganic Chemistry in Biological Systems (as part of the Mid-Atlantic Regional ACS Meeting).
Newark, DE.
Contact: George Famini, SMCCR-RSP-C, U.S. Army CRDEC, Aberdeen Proving Ground, MD 21010 (301-671-2670) or Alfred Lowrey, Laboratory for the Structure of Matter, Naval Research, Washington, DC 20375 (202-767-6381).

30 May-9 June 1991.
Static, Kinematic and Dynamic Aspects of Crystal and Molecular Structure.
Erice. Trapani, ITALY.
Contact: Prof. L. Riva Di Sanseverino, Diparimento de Scienze Mineralogiche, Piazza Porta San Donato 1, 40126 Bologna, ITALY.

17-20 June 1991.
27th Annual Meeting of the Drug Information Association.
Washington, DC.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

14-19 July 1991.
10th International Conference on Computers in Chemical Research and Education (ICCCRE).
Jerusalem, ISRAEL.
Conract: the Conference Secretariat, 10th ICCCRE, P. O. Box 71102, Jerusalem 91079, Israel (972-2-662989, 668070, TELEX: 26577 OMGIS IL, FAX: 972-2-6656689). 詳細は8巻3号の国際会議欄参照。

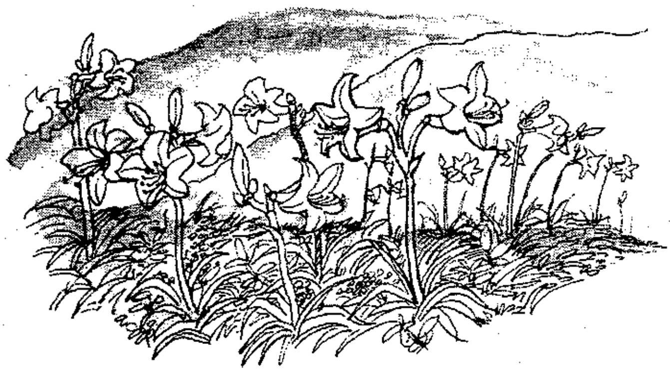
21-26 July 1991.
American Crystallographic Association Annual Meeting.

Toledo, OH.
Contact: Alan Pinkerton, Dept. of Chemistry, Univ. of Toledo, Toledo, OH 43606 (419-537-4568).

25-30 August 1991.
201st ACS National Meeting and 4th Chemical Congress of North America.
New York, NY.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

18-22 November 1991.
SUPERCOMPUTING 1991.
Albuquerque, NM.
Contact: Raymond L. Elliott, MS B-260. P. O. Box 1663, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545 (505-667-1449).

8-11 June 1992.
28th Annual Meeting of the Drug Information Association.
San Diego, CA.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).



文献紹介

COMPUTERS & CHEMISTRY

1990年第14巻第2号　論文題目、著者、頁

A general procedure for transformation of abstract factor solution to real one in presence of linear constraints. An application for chemical component analysis from NMR data, *Reino Lattikainen and Kari Tuppurainen*, p. 109

EASIEST —a program system for ElectroAnalytical Simulation and parameter ESTimation —I. Simulation of cyclic voltammetric and chronoamperometric experiments, *Bernd Speiser*, p. 127

Robust solution of proper, matched sigma-pi multi-nomial equation systems, *David J. M. Park Jr*, p. 141

Robust multivariate analysis applied to separation of components in absorption spectra, *I. B. C. Matheson and R. J. De Sa*, p. 157

Determination of macroscopic thermodynamic ionization constants under conditions of variable ionic strength by an optimization algorithm, *Maria N. Moreno, Jose Luis Gonzalez, M. Angeles del Arco and Julio Casado*, p. 165

Conformational energy derivatives for polypeptides with flexible proline rings, *R. A. Abagyan and A. K. Mazur*, p. 169

Chebyshev methods for the numerical evaluation of the reversible Randles-Sevcik function, *F. G. Lether and V. Shivpuri*, p. 177

Book Reviews

Numerical methods with FORTRAN 77: a practical introduction, by L. V. Atkinson *et al*, *David Edelson*, p. 183

Computational methods in the chemical sciences, by A. F. Carley and P. H. Morgan and Algorithms for chemists, by J. Zupan, *David Edelson*, p. 183

Advanced scientific computing in BASIC with applications in chemistry, biology and pharmacology, by P. Valko and S. Vajda, p. 184

Microcomputers and laboratory instrumentation, by David J. Malcolme-Lawes, *Edwin F. Hilinski*, p. 185

Methods in computational chemistry, Edited by Stephen Wilson, *Walter C. Ermler*, p. 186

1990年第14巻第3号　論文題目、著者、頁

Multiple straight-line least-squares analysis with uncertainties in all variables, *J. M. Lisy, A. Cholvadova and J. Kutej*, p. 189

The microcomputer OASIS system for predicting the biological activity of chemical compounds, *Ovanes Mekenyan, Stoyan Karabunarliev and Daniel Bonchev*, p. 193

Calculation of the entropy caused by hindered internatl rotaion —a mechanistic tool to explore the steric influence on the entropy of activation, *Anuschirwman Peyman and Hans-Dieter Beckhaus*, p. 201

Computer-assisted prediction for industrial organic reactions based on a semi-formal

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

TETRAHEDRON COMPUTER METHODOLOGY

Contents of Disks 14 to 18

Disk 14: CONTENTS.ASC, contents of hardcopy and each disk; authorname.ASC, ASCII version of paper by that author; BLUROCK.BIB, bibliography for Blurock paper in REFFORM format; NEWS4.ASC, announcement of TCM-Online; MTGS4.ASC, meeting announcements; HOLLAND.ASC, program and abstracts for Chemical Structure meeting in June 1990.

Disk 15: BLUROCK.DOC, BROOK.DOC, OKADA.DOC, ChemText® document files corresponding to hardcopy paper by that author, only readable with ChemText; READ.ME, describes the files.

Disk 16: Graphics programs described by Brook (see experimental) for UNIX: PART1.ARC and PART2.ARC, archived program and data files; ARC.EXE, the archive program needed to restore the files; DEARCHIV.BAT, command file to dearchive the files, uses ARC.EXE; READ.ME, lists files in archives with instructions for compiling under UNIX®. Note: these files have only <lf>, no <cr>'s.

Disk 17: Aggregation simulation program for IBM PC by Hoagland: READ.ME, describes files and operation; SPGMSDOS.EXE, executable program for IBM PC; SPAGINFO.DOC, program documentation; AREAS.TXT, required data file; *.BGI; graphic drivers; *.TPU, program units; INITSPAG.INC, Pascal include file; SPGMSDOS.PAS, Turbo Pascal® source code for SPGMSDOS.EXE; CAPLPT.COM, utility to capture LPT1 output into named disk file; HOAGLAND.TXT, TCM-Online submission cover message.

Disk 18: Macintosh® format. HOAGLAND.MSW, Microsoft Word® format of paper by Hoagland; *.ASC, same as on Disk 14, but not all present, limited by disk space (omitted files available from TCM-Online).

Folder HOAGLAND.PROGS, contains a Macintosh version of the aggregation simulation program by Hoagland, executable and Pascal source code.
Note: Computers that can not read IBM or Mac format disks can download files from TCM-Online.

1990年第30巻第2号（5月） 論文題目、著者、頁

新会員勧誘にご協力下さい

職場、家庭を問わず、また日、欧を問わず、みんながワープロを使い、ブック型、ノート型パソコンもかなり普及してきて、いつも電子文房具が視野に入るようになってきた現在、化学者のコンピュータに関する知識も年毎に変わってきていると思います。この背景の中で、化学情報、計算機化学などの情報化学に関心をもっている人、これからは化学の分野でも情報化学が不可欠だと思っている人などが多数にのぼることは、情報化学部会の編集委員が行ったデルファイ方式のアンケートや情報化学部会についての最近の問い合わせにも見られます。

情報化学部会として、研究活動と情報交換の範囲をさらに広げ、内容もより充実させるために、会員増加をはかりたいと願っています。お知り合いの方々をぜひお誘い下さい。

入会に関する問合先：〒101 東京都千代田区神田須田町１－９　教信木田ビル６Ｆ
（社）日本化学会　会員部　☎(03)258-9815

ちなみに、平成元年度に次のような活動をしました。

１．第12回情報化学討論会開催（平成元年11月８日～10日　豊中市、千里協栄ホール）

２．CICSJ Bull., 7, (1989) No.1 ～No.6（隔月）特集記事を含め203 頁の編集・出版

３．セミナー関係

第２回情報化学夏期セミナー—情報化学入門—（平成元年８月24日～25日　神戸市、YMCA六甲研修センター）

４．研究会・ワークショップ

１）化学物質名の機械処理に関する研究会　第１回（平成元年10月27日　東京都千代田区、中央大学駿河台記念館）

２）新しい領域としてのケモメトリックス—その現状と将来展望（平成２年１月22日東京都文京区、お茶の水女子大学）

３）化学命名法ワークショップ　第２回　—命名の歴史から機械処理まで—（平成２年１月26日　東京都千代田区、日本科学技術情報せんたー）

５．日化年会関係

第５８春季年会　化学情報・計算機化学部門を企画・担当

６．協力関係

１）1989環太平洋国際化学会議（PACIFICHEM '89）情報化学部会関係部門への協力

２）シンポジウム「化学における情報の現状と将来」（平成２年１月19日　東京都港区、日本学術会議）参加協力

（総務担当幹事　藤枝修子（お茶女大））

****

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。

本誌に適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須田町１－９　教信木田ビル６階
社団法人　日本化学会　情報化学部会　事務局
電話 (03) 258-9813

****

日本化学会事務局　仮事務所のお知らせ

日本化学会事務局は新化学会館竣工までの間、下記において業務を行いますのでお知らせ致します。

何かとご不便、ご迷惑をおかけいたすと存じますが、何卒ご協力を賜りますようお願い申し上げます。

記

①仮事務所住所

〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル 6, 7 階
（郵便物は旧住所でも届きます）

②電話番号

東京(03)258-9811（代表）

総務部：(03)258-9812
業務部：(03)258-9813（部会事業一般、部会誌編集）
経理部：(03)258-9814
会員部：(03)258-9815（部会入退会、送本）

編集第一部：(03)258-9816
編集第二部：(03)258-9817
会館建設室：(03)258-9818
常務理事室：(03)258-9819
図書室関係：(03)258-9811

②ファクシミリ番号

(03)258-9810

ISSN 0913-3747

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 8, Number 5
September 1990

目　　次

部 会 行 事

第13回情報化学討論会

共催　日本化学会・日本薬学会・日本農芸化学会・日本分析化学会・情報科学技術協会
日　時　11月28日（水）―30日（金）
会　場　ホリデイ・イン豊橋（ホリデイ・インシアター）
〒441　豊橋市藤沢町 141　TEL 0532-48-3131
FAX 0532-46-6672
交通　新幹線豊橋駅西口よりタクシー約10分
尚、本討論会は第18回構造活性相関シンポジウムと併催されます。
参加登録予約締切　10月31日（水）
[講演時間25分（講演18分、討論7分）]

第1日（11月28日）

一般講演　―（10時から）―

28I01　二置換ベンゼンの水－オクタノール分配係数の推定（山形大工）○金谷重彦・工藤喜弘

28I02　有機化合物の水溶解度の値を求めるシステムの開発（山形大工・東工大）○工藤喜弘・鈴木孝弘

28I03　有機合成反応設計支援反応データベースシステムCORESの開発（図書館情報大・ミドリ十字・三井東圧化学・藤沢薬品・大正製薬・出光石油化学・吉富製薬・三菱化成・クラレ・神奈川大・万有製薬・リクルート・NTT・中外製薬・田辺製薬・東芝・三菱油化・筑波大）石塚英弘・○井上佳久・小田研悟・加藤一孝・川島　豊・清水恵次郎・中　洋一・白木政巳・関谷哲雄・高島浩幸・中山　尭・西岡　亮・原　典行・菅原駿吾・松浦育敏・宮城島利一・宮村雅隆・吉田慎一・大保信夫・北川博之・山口和紀・藤原　譲

28I04　データベースに基づく有機合成設計支援システム"PC-SYNTREX"の開発（中外製薬）松浦育敏

特別講演I　―（13時～14時）―

大学・化学・コンピュータ（豊橋技科大）佐々木慎一

— （14時20分から） —

28Ｉ05　合成設計のための知識獲得支援システム－ＫＡＳＰ－（神奈川大理）中山　尭

28Ｉ06　分子構造処理プログラム・ライブラリーの開発と応用について（呉羽化学新技術開発研）朝永　惇

28Ｉ07　ＮＩＳＴ－ＭＳＤＢに於けるＣＡＳ化合物名の側鎖部分（筑波研究学園・東京家政学院筑波短期大）○仲久保正人・仲久保公子・前田浩五郎

28Ｉ08　文字入りの立体化学構造式の解読（東海大開発技研）米田幸夫

28Ｉ09　ＪＯＩＳ－Ｆにおける結晶構造データベースシステムの開発（ＪＩＣＳＴ・日本結晶学会）○岡野恵子・鈴木一明・志村和樹・早瀬修一・大崎健次

28Ｉ10　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（Ⅳ）－化学構造式の数値化と構造データ検索への応用（豊橋技科大）○奥山　徹・樋口　聡・西尾聰・阿部英次・佐々木慎一

28Ｉ11　^{13}Ｃ－ＮＭＲの検索同定システムにおける合致度に対する吸収強度因子の効果（日立計測・日立那珂）○橋本正雄・田中保子・笹淵　仁

28Ｉ12　ＣＯＳＹ－二次元ＮＭＲを考慮した^{13}ＣＮＭＲと^{1}ＨＮＭＲの同時検索・推定システム（神田外語大・化技研）○山本　修・早水紀久子・柳沢　勝

第２日（11月29日）

一般講演　　　　— （9時10分から） —

29Ｉ13　汎用配座発生プログラム改良版ＣＯＮＦＬＥＸ３における新しいアルゴリズム（豊橋技科大）○後藤仁志・大沢映二

29Ｉ14　ＳＯＰＥ(Selection and Optimization of Potential Energy Functions and Parameters)プログラムの試作（北大理・豊橋技科大・東大工）○ Claudia Marquardt・今井啓祐・大沢映二・平野恒夫

29Ｉ15　結晶エネルギー計算　－架橋フェロセノファンにおけるdisorderについて（北大理・豊橋技科大）Jerzy M. Rudzinski・○大沢映二

29Ｉ16　分子力学計算による振動スペクトルシミュレーションの自動化（その１）一般原子価力場の取扱い（京大薬）○町田勝之輔・三輪嘉尚

29Ｉ17　疎水性相互作用を考慮した分子動力学計算（東大薬）○飯野　稔・板井昭子

29Ｉ18　分子動力学法による分子性結晶の構造予測（Ⅱ）（東京農工大工・化技研）○麓　雅樹・安川民男・田辺和俊

―（13時から）―

29Ｉ19　毛状根の代謝産物ミキモピンの分子動力学計算による配座解析（呉羽化学新技術開発研・東大農）○中村和彦・中馬　寛・磯貝　彰・福地直之

29Ｉ20　画像として扱う Belousov-Zhabotinskii反応の空間模様（お茶女大理）○藤枝修子・高田智美

29Ｉ21　反応予測に役立つ流線モデルのグラフィックス　－静電ポテンシャル解析へのＫＯＲＩＮ／ＩＲＩＳの適用－（分子研・九工大工・中京大）○伊奈　諭・柏木　浩・秦野甯世

第２日（11月29日）　　―（14時20分～16時20分）―

一般ポスターセッション

29Ｐ01　ＢＩＯＣＥＳ［Ｅ］による受容体蛋白質のモデリングと構造活性相関的考察（北里大薬）○三井士子・梅山秀明

29Ｐ02　核酸のモデリングシステムの発展（北里大薬）○四宮和子・梅山秀明

29Ｐ03　蛋白質の異なる立体構造における基準振動の比較（旭化成・京大理）○戸澗一孔・郷　信広

29Ｐ04　複数種の半導体ガスセンサによる多成分ガス分析方法の開発（新日鉄第一技研・山形大・豊橋技科大）○早川泰弘・小野昭紘・金谷重彦・元田崇士・阿部英次・佐々木慎一

29Ｐ05　ＬＡＮ（ローカルエリアネットワーク）によるデータベースの分散とその効率的なデータ検索の試み－スペクトル

データベースへの適用例（豊橋技科大）○奥山　徹・佐々木慎一

29Ｐ06　分子動力学シミュレータのためのワークベンチ：ＣＯＭＤＥＰ　１（富士通九州システムエンジニアリング・西肥情報サービス・富士通）○木戸敏弘・廣田智香・大谷正尚・大浦輝夫・三上益弘

29Ｐ07　アラキドン酸のモデルと抗炎症剤（ミドリ十字）○井上佳久・山浦康成・深谷　力

29Ｐ08　複数種の半導体ガスセンサを備えた混合ガス試料識別装置の開発（福井高専・日華化学）吉村忠与志・斉藤政晴

29Ｐ09　ニューラルネットワークによるスペクトルパターン認識(3)　スペクトル1000件の識別テスト（化技研・ファコムハイタック）○田辺和俊・田村禎夫・上坂博亨

29Ｐ10　３次元薬剤設計のためのシステム開発（石原産業中研）赤木俊夫

29Ｐ11　パターン認識によるタンパク質の二次構造識別　－識別結果のリファインメント－（豊橋技科大）○神村基和・高橋由雅・唐沢　肇・佐々木慎一

29Ｐ12　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（３）（ゼリア新薬中研・北里大薬）○平野弘之・森口郁生・広野修一

29Ｐ13　個別反応データベースに基づくシステムで、合成設計はどこまで可能か　－"PC-SYNTREX"での例（中外製薬）松浦育敏

29Ｐ14　陽イオンの系統分析のためのエキスパートシステムの試み（兵庫教育大）○尾関　徹・木原　寛

29Ｐ15　パーソナルコンピュータによる ^{1}Ｈ－ＮＭＲフルスペクトルデータベース（豊橋技科大）○河野英二・阿部英次・佐々木慎一

29Ｐ16　ＮＯＥデータのＣＨＥＭＩＣＳへの導入　－Distance Geometry法による三次元候補構造の推定－（小野薬品水無瀬研・豊橋技科大）○西崎　稔・船津公人・佐々木慎一

29P 17　有機構造解析へのマススペクトルデータの応用　－CHEMICSから出力される候補構造の検定－（豊橋技科大）○速水健一・船津公人・佐々木慎一

29P 18　CHEMICSの最近の進歩　－2D－NMRデータ活用と既知部分構造処理を中心として－（豊橋技科大）○原藤　寛・船津公人・佐々木慎一

29P 19　有機合成設計システムAIPHOSの開発（1）　－反応知識ベースシステムおよび個別反応データベースシステムの開発－（豊橋技科大・田岡化学・日本合成化学・日本触媒化学・積水化学・オリエント化学・住友精化・鐘淵化学・住友化学・関化協）船津公人・白石喜久・○西村拓朗・高橋由幸・野村茂樹・北村　覚・木村　聡・興梠光治・千波　誠・高畠哲彦・内田　透・銅金　巌・佐々木慎一

29P 20　有機合成設計システムAIPHOSの開発（2）　－Bond dissociation energy推算法の開発－（豊橋技科大・塩野義製薬・鐘淵化学・ダイキン・関化協）船津公人・○渡辺正道・上山　昇・根岸良夫・大橋武久・佐々木慎一

29P 21　有機合成設計システムAIPHOSの開発（3）　－芳香族性および互変異性認識プログラムの開発－（豊橋技科大・山本化成・播磨化成・大阪市立工業研・関化協）船津公人・○堀内健一郎・磯崎昌史・大野敏信・銅金　巌・佐々木慎一

29P 22　受容サイトにおける分子認識機構（Ⅶ）（東京農工大工）○片岡良一・安川民男

29P 23　パーソナルコンピュータによる学会講演要旨のデータベース化。その1。情報化学討論会英文要旨（電通大・北里大薬・DAKO）○山崎　昶・梶川博司・木下俊夫・石崎勉・伊藤恭世・満野千加子・平賀やよい

29P 24　超球概念の多変量解析への適用　3　超球クラスタリングの開発（富士通）○湯田浩太郎・井関京子・中山唯男

29P 25　EWSによる分子動力学計算結果表示システムの開発－水の蒸発現象の表示－（住友電工・東大工）○阪田由加・

鍛冶幹雄・田島暢夫・平野恒夫

29P26　新規香料分子設計支援のためのデータベース（花王文理研）山下　修・○辰田信章・太田好人・美濃順亮

29P27　シフト検定法の判別分析法への適用（阪大薬）○高木達也・北条典子・野田昭宏・松村謙一・藤原英明・佐々木喜男

第2日（11月29日）　—（14時20分～16時20分）—

特別ポスターセッション

科学技術振興調整費試験研究

「化学物質の設計等支援のための知識ベースシステムに関する研究」成果発表

29P28　活性物質の構造設計トータルシステムの開発（豊橋技科大）○高橋由雅・佐々木慎一

29P29　薬物リード構造展開知識ベースシステムＥＭＩＬの構築（京大農化）藤田稔夫

29P30　分子計算特性予測知識ベースシステムの開発（花王文理研・豊橋技科大）○山下　修・辰田信章・太田好人・高橋由雅・美濃順亮

29P31　Log P 推算システムの開発（京大化研・京大農）○西岡孝明・中川好秋・藤田稔夫

29P32　毒性予測知識ベースシステムの開発（国立衛試・日本総合技研）○中舘正弘・林　真・祖父尼俊雄・鎌田栄一・長田孝治・石部　保・坂村由紀子

29P33　発癌性予測システムの開発（国立衛試）○神沼二真・大上徳子・森本和滋・五十嵐貴子

29P34　生体内動態予測知識ベースシステムの開発（北里大薬）○森口郁生・広野修一・松下泰雄・中川崇子・吉井文子

29P35　化学物質設計等支援のための知識ベースシステムに関する研究　－反応経路選定知識ベースシステム－（ミドリ十字・三井東圧・藤沢薬品・大正製薬・出光石油・吉富製薬・ＮＴＴ・クラレ・萬有製薬・リクルート・中外製薬・田辺製薬・東芝・神奈川大・図書館情報大・筑波大）井上佳久・小

田研悟・加藤一孝・川島　豊・清水恵次郎・白木政巳・菅原駿吾・高島浩幸・西岡　亮・原　典行・松浦育敏・宮城島利一・可児利佳子・中山　尭・石塚英弘・○藤原　譲・大保信夫・北川博之・山口和紀

29P 36　合成経路探索知識ベースシステムの開発（化技研・富士通）○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・林　輝幸・矢幡史子・橋本敏徳・菅谷昭雄

29P 37　共通基盤としての基礎化学知識ベースの開発（関学大情報セ・東海大開発技研）○岡田　孝・河井俊一・木下悦子・米田幸夫

29P 38　不均一系触媒反応知識ベースシステムの開発（愛知工大・名大工・東海大開発技研）○鬼頭繁治・服部　忠・村上雄一・米田幸夫

29P 39　セラミックス系物質合成支援のための知識ベースシステム化に関する研究（東大工・無機材研・東大生産技研・東工大工・秩父セメント）○牧島亮男・三友　護・門間英毅・安井　至・水谷惟恭・二上俊郎

特別講演Ⅱ　　　　　　―（16時30分～17時30分）―

生命体の調和と破綻を探る（岡崎国立共同研究機構）岡田節人

第３日（11月30日）　　　―（9時10分から）―

一般講演

30Ｉ22　有機化合物の融点と化学構造の関係について（矢野宮崎研）矢野邦彦

30Ｉ23　最大完全部分グラフを用いた化学式のブロック化マッチング　（石原産業中研）赤木俊夫

30Ｉ24　決定木を用いた甘味物質の設計支援（阪大基礎工）山下治雄

30Ｉ25　Labileな錯体生成を解析するための多変量解析法の適用　－酢酸－マグネシウム系のラマンスペクトルの場合－（兵庫教育大）尾関　徹

30Ｉ26　シンプレックス最適化法による混合物ＧＣデータの分

離・再構成（キッコーマン）相島鐵郎

30Ｉ27　ニューラルネットによる二成分系酸化物の酸強度推算（愛知工大・名大工）○鬼頭繁治・服部　忠・村上雄一

―（13時から）―

30Ｉ28　蛋白質の立体的疎水性パラメータとしての球内残基数（旭化成）○戸澗一孔

30Ｉ29　立体構造ホモロジー検索法（キリンビール基盤技研）○飯島　洋・岩城孝則

30Ｉ30　ニューラルネットワークを用いたタンパク質三次構造予測の可能性の検討（図書館情報大）○中山伸一・吉田政幸

30Ｉ31　蛋白質二次構造へリックス生成と協同現象（北里大薬）○菰岡仁志・梅山秀明

30Ｉ32　ＡＮＡＬＯＧＳのニューラル・システムによるリセプター・マッピング（Ⅱ）（東京農工大工・大正製薬総研・阪薬大）○佐藤克則・安川民男・角谷重幸・北村一泰・石田寿昌

30Ｉ33　核酸分子の高次構造特性の計算と表示（Ⅱ）分子の形状（阪大薬）藤井　敏

懇親会　11月29日（木）18時より、豊橋ホリデイ・イン桜の間にて第18回構造活性相関シンポジウムと合同で開催します。

参加登録費（要旨集を含む）構造活性相関シンポジウムと共通

予約　5,000 円、当日　6,000 円

懇親会費　5,000 円

予約申込方法　郵便にて、住所・氏名・勤務先をご記入の上、下記宛お送り下さい。尚、懇親会ご出席希望の方は併せてお申し込み下さる様お願いします。

予約申し込みの方は締切日までに下記銀行口座へ所定の金額をお振り込み下さい。振り込み確認後、要旨集引換券及び懇親会入場券をお送り致します。

申込先　〒441　豊橋市天伯町字雲雀ケ丘　1－1

豊橋技術科学大学　情報化学討論会

佐々木慎一

（問い合せ先）0532-47-0111　内線 849，850，860
銀行口座　住友銀行豊橋支店　普通預金
口座番号　７３１１２８
口座名　　ＣＩＣＳ・ＳＡＲ実行委員会、
　　　　　代表　佐々木慎一

宿泊について　豊橋駅から会場までの交通の便は必ずしも良くありませんので、ホテル側に学会参加者のための宿泊割引をお願いしてあります。ご利用下さい。宿泊料金は下記の通りです。

料金　一泊朝食付　一人当料金（サービス料・消費税込）

ｽﾀﾝﾀﾞｰﾄﾞﾂｲﾝ	（１室２名使用）	7,000 円
ﾃﾞﾗｯｸｽﾂｲﾝ	（　〃　）	9,000 円
ｽﾀﾝﾀﾞｰﾄﾞｼﾝｸﾞﾙ	（１室１名使用）	8,000 円
ﾃﾞﾗｯｸｽｼﾝｸﾞﾙ	（　〃　）	10,000 円

尚、宿泊の予約は直接ホテルにお申し込み下さい。

「第３回情報化学夏期セミナー」報告

立正大学教養　今井　賢
化学情報協会　佐藤明子

情報化学部会の夏の催しである本セミナーも今年で３回目を迎え，情報化学の底辺拡大という当初の目的を果たしつつ，どうやら行事として定着した感がある。今回は例年と同じく１泊２日（８月２９・３０日）の日程であったが，会場を初めて関東（湯河原）に移し，内容も過去２回の実績を参考に情報化学部会の学問領域を強く意識して魅力ある構成にしたつもりである（表１参照）。特に２日目にＡＩ関連の講演２題を配し昨今の情報化学の新しい流れを積極的に先取りしてみた。また，企業サイドの方々が参加しやすいようにとの配慮から，これまでの副題「情報化学入門」を「情報化学・基礎と応用」と改めた。

表１　情報化学夏期セミナーの講演内容

Ｏ印がそれぞれの回の講演内容を示す

	第１回	第２回	第３回
表現法・化学データベース	Ｏ	Ｏ	Ｏ
分子設計・合成設計	Ｏ		
自動構造推定		Ｏ	
構造活性相関		Ｏ	
分子計算　　分子メカニクス	Ｏ		Ｏ
分子ダイナミクス			Ｏ
分子軌道法	Ｏ	Ｏ	
分子グラフィックス			Ｏ
ＡＩ関連			Ｏ

今年度の講師の先生方と演題については次頁のプログラムをご覧頂きたい。各講演ともテーマの基本的事柄から歴史的背景，最近のトピックスに至るまで興味深いお話を伺うことができた。事務局として反省する点は，質問時間があまり取れなかったため質疑応答がやや単調であったことである。それでも夕食後のフリートーキングでは，講師の先生を囲む輪が幾つもでき，それぞれ活発な意見交換がなされていた。その後，各部屋に戻ってからも夜遅くまで話が弾み，有意義な時を過ごせたように思う。

参加者の年齢層は１０代から６０代までと実に幅広く，特に５０代以上の方が５名参加されていた。また今回は女性の参加者も６名と前回・前々回と比べ多かった。

夕食時の自己紹介の席で，ご年輩の管理職の方々が参加理由として次のように異口同音におっしゃていた。「私たちは新しい分野の内容が良く分からない。部下から研究申請を受けても果たして予算を付けて良いのかどうか判断できない。だから，このような場で最新の情報化学の基本を学び，理解を深めたいのです。」

情報化学においては入門者とは若い人だけではない。若手の研究者も，管理職に携わる年輩の方も共に学び，研さんを積む場として本セミナーが少しでも役立てれば幸いである。

最後に，講師の先生方にはご多忙中にもかかわらず２日間に渡って講師をお引き受け頂き心から感謝申し上げたい。また，不慣れな事務局にご協力を賜った参加者の皆様を始め，関係各位に本紙面を借りて厚く御礼申し上げたい。

第３回情報化学夏期セミナー　＜　情報化学・基礎と応用　＞　プログラム

第１日（８月２９日）

	12:00-13:00	受付
	講演および討論	
①	13:10-14:10	化合物の構造表現とデータベース （富士写真フィルム）　花井荘輔
②	14:10-15:10	これからの分子力学 （藤沢薬品）　今井啓祐
*	15:10-15:30	Coffee break
③	15:30-16:30	分子動力学入門 （京大理）　片岡洋右
④	16:30-17:30	分子グラフィックス （システム）　伊賀祐一
	18:30-	夕食
	夜の部	フリートーキング（情報化学のここが聞きたい）

第２日（８月３０日）

	7:00-8:30	朝食
	講演および討論	
①	9:00-10:00	ニューラルネットワークの化学への応用 （富士通）　湯田浩太郎
②	10:00-11:00	コンピュータ化学の応用展開（ファジィ理論とエキスパートシステム） （旭硝子）　石田嘉明

以上

参加費：部会員18,000円　学生 10,000 円　一般25,000円

※本セミナーで使用したテキスト（予稿集）が若干余っておりますので、一部3,000 円（送料込）でお譲りします。ご希望の方は下記へ、葉書又はＦＡＸにてお知らせ下さい。請求書をつけてお送りします。尚、品切れの際はご容赦下さい。

申込先：〒101 千代田区神田須田町1-9 教信木田ビルビル6F　日本化学会情報化学部会　事務局
☎03-258-9813　FAX 03-258-9810

関 連 行 事

第１８回構造活性相関シンポジウム

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、構造活性相関懇話会

日　時　11月28日（水）―30日（金）

会　場　ホリデイ・イン豊橋（ホリデイ・インシアター）

〒441　豊橋市藤沢町 141　TEL 0532-48-3131
FAX 0532-46-6672

交通　新幹線豊橋駅西口よりタクシー約10分

尚、本シンポジウムは第13回情報化学討論会と併催されます。

参加登録予約締切　10月31日（水）

［講演時間25分（講演18分、討論7分）］

第１日（11月28日）　―（10時から）―

28S01　多置換ベンゼン誘導体のσs^0とμ^2/αの推算（阪大名誉・阪大薬・近畿大薬）佐々木喜男・○高木達也・川木秀子

28S02　GLCにおける溶質－固定相間の相互作用エネルギーの分割について（近畿大薬・阪大薬）○川木秀子・佐々木喜男

28S03　リポソーム／水系における分配特性の熱化学的解析―アルコールについて（阪大薬）○伊藤勝彦・吉川浩史・藤原英明

28S04　Chou-Fasman βーターン傾向性指数とアミノ酸側鎖パラメータとの相関関係およびオリゴペプチドの疎水性パラメータ解析への応用（京大農化）○赤松美紀・藤田稔夫

―（13時～14時）―

特別講演Ⅰ　大学・化学・コンピュータ（豊橋技科大）佐々木慎一

―（14時20分から）―

28S05　多置換ジフェニルアミン類及び多置換フェニルピリジルアミン類の酸解離定数の解析（京大農化）○郭沢建・三芳秀人・藤田稔夫

28S06　PLS法によるエラスターゼ基質の構造一活性相関Ⅱ（豊橋技科大・キリンビール・大鵬薬品・住友化学）○宮下芳勝・大隈信之・野水基義・多田幸雄・高山千代蔵・佐々木慎一

28S07　甘味蛋白質Monellinの耐熱化（キリンビール基盤技研）○飯島　洋・曽根秀隆・山田洋子・丸山香代子

28S08　Gramicidin Sの新規構造活性相関（九大理・九大歯）○坂本　寛・下東康幸・吉富晴子・脇　道典・大野素徳・河野敬一

28S09　生理活性物質の動的構造と活性発現（徳島大薬・徳島大工・徳島文理大薬）○後藤　了・堀　均・平良全栄・寺田弘

28S10　薬物の標的高分子との複合時の配座と、単独での安定配座の比較（東大薬）○杉森正道・富岡伸夫・板井昭子

28S11　合成エンケファリンによる受容体サブタイプの認識（九大理）下東康幸

28S12　昆虫幼若ホルモン活性物質の立体静電的性質とレセプターフィット（京大農化）○林　哲良・岩村　俶・藤田稔夫

第2日（11月29日）　—（9時10分から）—

29S13　置換ベンジル菊酸エステル類の殺虫活性およびナトリウム電流活性における定量的構造活性相関（京大農化）○西村勁一郎・藤田稔夫

29S14　カテコール誘導体の5—リポキシゲナーゼ阻害活性に関する定量的構造活性相関（京大農・ミドリ十字中研）○内藤洋一郎・中川好秋・藤田稔夫・山浦康成・杉浦正典・深谷力・横山和正

29S15　カテコールアミン再取り込み阻害剤の構造活性相関の包括的解析（名城大薬）○寺田幸正・冨田辰也・居波慶春

29S16　新規アミン殺菌剤：その構造活性相関と作用機作（住友化学）○目木直人・高野仁孝・栗田靖之・高山千代蔵

29S17　構造活性相関を用いた新規殺虫剤のデザイン（三井東圧ライフサイエンス研）○中屋道彦・小田研悟・洲崎典子・

白石史郎・沼田　智

29S18　リードジェネレーションへのアプローチ．2－オキソ－ベンゾチアゾール類のドラッグデザイン、合成および構造活性相関（阪大産研）植田育男

―（13時から）―

29S19　化学物質の生物濃縮性予測　―分子の疎水性および立体効果に着目した検討―（住友化学安全性研）○斉藤昇二・田上昭・山田宏彦

29S20　Cytochrome c, c_2, c_{550}分子内部における電子伝達経路の推定（関学大理・関学大情報セ）○中川博之・小山　泰・岡田　孝

29S21　複数のグラフの類似部分の抽出法（宇都宮大・神戸大）前原秀明・○田中栄一・池田　満

―（16時30分～17時30分）―

特別講演Ⅱ　生命体の調和と破綻を探る（岡崎国立共同研究機構）岡田節人

第３日（11月30日）　―（9時10分から）―

30S22　血液凝固系関連酵素の立体構造の推定と抗血栓症薬の構造活性相関的検討（北里大薬・日本電気）○梅山秀明・曽根田雄一

30S23　分子動力学／自由エネルギー摂動法によるリボヌクレアーゼＴ１阻害剤の結合自由エネルギー計算（北里大薬・カリフォルニア大薬）○広野修一・P.A. Kollman

30S24　薬物―受容体の動的相互作用の解析法の開発：リボヌクレアーゼＴ１－２'－ＧＭＰ複合体（北里大薬）○倉持浩・梅山秀明

30S25　スロンビン阻害剤（アルガトロバン）とトリプシン阻害剤（ナファモスタット）の作用機構（三菱化成総合研）○久保寺英男・佐々木千津子・奥村千英子・松崎尹雄

30S26　A QSAR Analysis of Anti-Tumor Potency of Some Antrapyrazoles Using Molecular Dynamics（エーザイ筑波研・イリノイ大）○川上善之・A.J. Hopfinger

30S27　受容体構造に基づいた活性構造自動生成プログラムＬＥＧＥＮＤの開発（東大薬）○西端芳彦・板井昭子

—（13時から）—

30S28　小動物の急性毒性と構造の関係について（矢野宮崎研）矢野邦彦

30S29　構造活性相関へのニューラルネットワークの適用　Ⅲ　要因解析を意識したネットワーク構造を持つニューラルネットワークの開発及び構造活性相関への適用（富士通）○湯田浩太郎・井関京子・中山唯男

30S30　FUNCTIONAL-LINK NETのＱＳＡＲへの応用（北里大薬）○劉　謙・広野修一・森口郁生

30S31　Neural Networkの構造活性相関研究への応用　Ｉ　——基本的分類特性および fitting特性——（星薬科大・日立ＣＥ）○市川　紘・青山智夫

30S32　Neural Networkの構造活性相関研究への応用　Ⅱ　——薬物活性の等級分類およびＱＳＡＲ——（星薬科大・日立ＣＥ）○市川　紘・鈴木雄二・青山智夫

30S33　Neural Networkの構造活性相関研究への応用　Ⅲ　——データに含まれる実験誤差の除去——（日立ＣＥ・星薬科大）○青山智夫・市川　紘

懇親会　11月29日（木）18時より、豊橋ホリデイ・イン桜の間にて第13回情報化学討論会と合同で開催します。

参加登録費（要旨集を含む）　情報化学討論会と共通

予約　5,000 円、　当日　6,000 円

懇親会費　5,000 円

予約申込方法　郵便にて、住所・氏名・勤務先をご記入の上、下記宛お送り下さい。尚、懇親会ご出席希望の方は併せてお申し込み下さる様お願いします。

予約申し込みの方は締切日までに下記銀行口座へ所定の金額をお振り込み下さい。振り込み確認後、要旨集引換券及び懇親会入場券をお送り致します。

申込先　〒441　豊橋市天伯町字雲雀ヶ丘　1－1
豊橋技術科学大学　構造活性相関シンポジウム
佐々木慎一
（問い合せ先）0532-47-0111　内線 849, 850, 860
銀行口座　住友銀行豊橋支店　普通預金
口座番号　７３１１２８
口座名　　ＣＩＣＳ・ＳＡＲ実行委員会、
代表　佐々木慎一

宿泊について　豊橋駅から会場までの交通の便は必ずしも良くありませんので、ホテル側に学会参加者のための宿泊割引をお願いしてあります。ご利用下さい。宿泊料金は下記の通りです。

料金　一泊朝食付　一人当料金（サービス料・消費税込）

ｽﾀﾝﾀﾞｰﾄﾞﾂｲﾝ	（１室２名使用）	7,000 円
ﾃﾞﾗｯｸｽﾂｲﾝ	（　〃　）	9,000 円
ｽﾀﾝﾀﾞｰﾄﾞｼﾝｸﾞﾙ	（１室１名使用）	8,000 円
ﾃﾞﾗｯｸｽｼﾝｸﾞﾙ	（　〃　）	10,000 円

尚、宿泊の予約は直接ホテルにお申し込み下さい。

第５回化学ＰＣソフトウエア研究討論会

主題	化学の研究・教育におけるパソコンの利用
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、日本分析化学会
後援	ＮＥＣ
日時	１１月７日（水）午後、８日（木）
会場	お茶の水女子大学一般教育２号館２０１教室 所在：〒１１２　東京都文京区大塚２－１－１ 交通：営団地下鉄丸の内線　茗荷谷駅下車　徒歩７分

会費　参加登録費

参加登録費	化学ＰＣ研究会会員	３０００円
	共催学・部会会員	３５００円
	一般	４０００円
	学生	１５００円
懇親会費		３５００円

参加申込　１０月１０日締切（会費は当日受付にて）
郵便またはファクシミリで、氏名、勤務先、住所、電話をご記入の上、下記宛にお送り下さい。なお懇親会に出席ご希望の方も併せてお申し込み下さい。

連絡先　〒１１２　東京都文京区大塚２－１－１
お茶の水女子大学　理学部　化学教室
第５回化学ＰＣソフトウエア研究討論会実行委員会
世話人：藤枝修子
電話　０３－９４３－３１５１　内線５６２
ファクシミリ　０３－９４２－２８１５（藤枝宛を明記して下さい）

講演発表プログラム

第１日　［１１月７日（水）］　午後１時２５分～５時１０分

実行委員長挨拶　　細矢　治夫　（お茶大・理）（13:25～13:30）

＜座長＞　　矢野　敬幸　（一橋大）

一般発表　　７分間概要説明（口頭発表）　（13:30～14:26）
　　　　　　デモンストレーション　（14:26～15:40）

101　化学教育の改善のためのソフトウエアの開発（５）
元素・単体の物性データベースを利用したＣＡＬプログラム
（埼玉大・理）○黒石佳伸、下沢隆

102　電気泳動ゲル上に展開されたタンパク質バンドの画像データベース
　　（オリンパス光学工業㈱）○牧野徹、小島清嗣、宮川厚夫
103　脂質情報データベースの構築
　　（重井医学研、近畿大・理工、帝京大・医）○渡辺清博、林陽、植田伸夫
104　ＰＣによる^{1}Ｈ－ＮＭＲデータの大量蓄積と未知スペクトルの情報検索システム
　　（国立衛試,三洋情報システム㈱,三菱レイヨン㈱）○叶多謙蔵,松倉利通,片桐禅
105　ＥＰＭＡのＢＡ補正プログラム
　　（早稲田大・教育）木ノ内嗣郎
106　ＲＩＳＭ式解法プログラム（ＱＣＰＥ３０６）のパソコン移植について
　　（函館高専）長尾輝夫
107　匂いセンシングシステムの開発（その２）
　　（福井高専、日華化学㈱）○加藤浩二、斉藤政晴、吉村忠与志
108　混色の原理
　　（埼玉大・工）時田澄男、○杉山孝雄

＜座長＞　　細矢　治夫　（お茶大・理）

特別講演　　　　　　　　　　　　　　　　　　　（15:40～17:10）

ニューラルネットワークとパーソナルニューロコンピュータ（仮題）
（ＮＥＣ　Ｃ＆Ｃ情報研究所所長）　飯沼一元

懇親会　お茶の水女子大学生協内マルシェにて　　　（17:15～19:00）

第２日　［１１月８日（水）］　午前９時３０分～午後５時１０分

＜座長＞　　吉村　忠与志　（福井高専）

一般発表　　　７分間概要説明（口頭発表）　　　（ 9:30～10:33）
　　　　　　　デモンストレーション　　　　　　（10:33～12:00）

201　化学構造式作画ソフトウエア　Ｃｈｅｍ－Ｋｉｔの拡張
　　（国際基督教大）吉野輝雄
202　光線追跡法による分子表示のためのデータファイル作成プログラム
　　（三菱化成生命科学研）永井右近
203　Ｃ言語による分子軌道法，ＣＮＤＯ／Ｓ，ＩＮＤＯ／Ｓ，ＭＮＤＯ，ＡＭ１
　　（アデカ・アーガス化学㈱）冨永信秀
204　3D-Molmaster：コンピュータ支援による有機化合物の構造決定（その１）
　　（山形大・教育）阿部昭吉
205　立体視法による分子設計支援システム”ＭＭＳＳＳ”（２）
　　（大阪市立大・工）真野倖一

206　計算機としてのＭａｃｉｎｔｏｓｈ－分子科学計算支援ソフトウエア
（兵庫教育大）木原寛
207　フローインジェクション分析用データ処理プログラム
（姫路工大・工）熊谷哲、西岡洋、○佐井規雄、上杉勝弥
208　味蕾センサシステムの開発
（福井高専）○杉谷強志、高山勝巳、高岡和則、吉村忠与志
209　衣服素材の熱水分移動特性評価のためのプログラム
（大阪工業技術試験所）○石川俊英、大槻荘一

休　憩　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　(12:00～13:10)

＜座長＞　　　木原　寛　（兵庫教育大）
一般発表　　　７分間概要説明（口頭発表）　　　　　(13:10～14:13)
デモンストレーション　　　　　　　　(14:13～15:30)
210　Ｎ８８ ＢＡＳＩＣソースコードをＱｕｉｃｋ ＢＡＳＩＣコードに変換するためのファイルコンバータ「ＮＴＯＱ」
（大阪市立大・工）真野倖一
211　関数（ｚ＝ｆ（ｘ，ｙ））における３次元データ自動グラフ化プログラム
（一橋大）矢野敬幸、吉村康子、尾崎成子
212　化学式や化学グラフからの分子模型自動作成方法
（日本ＩＢＭ東京基礎研）小出昭夫
213　化学教育ソフト「分子の図鑑」
（香川医科大）○獅々堀彊、山地智子、倉橋研吾
214　パソコンによる物理化学実験演習（その３）
（福井高専）○深草久美子、吉村忠与志
215　グラフィック機能を利用した赤外線吸収スペクトル帰属演習システム
（福島医大）大波哲雄
216　分子構造とＮＭＲスペクトルの表示による有機化合物の視覚学習システムの開発
（福井高専）○寺岡真一、吉村忠与志
217　化学啓蒙ソフトの開発
（一橋大、東京高専、埼玉大・理、埼玉大・教育、お茶大・理、埼玉大・工）
○矢野敬幸、西宮辰明、黒石佳伸、吉田俊久、藤枝修子、時田澄男
218　データ処理プログラム
（千葉県立衛生短大）林誠人

＜座長＞　　　時田　澄男　（埼玉大・工）
＜表彰＞　　　下沢　　隆　（埼玉大・理、化学ｿﾌﾄｳｴｱ頒布委員会委員長）
無償利用ソフトにおける表彰式と受賞講演　　　　　(15:40～17:10)

国際会議

2nd Beilstein workshop
-Computer Reaction Management in Organic Chemistry-

豊橋技術科学大学　船津　公人

ドイツ化学会の総本山 Beilstein instituteが主催する第２回Beilstein workshopが北イタリアの小さな町 Bolzano（旧ドイツ領で Bozenとも言う）の古城（SchloB Korb）に参加者全員が寝食を共にしながら本年５月２８日～６月１日の５日間開催された。参加者は Beilstein instituteが事前に選んだ５０名程度に限られ、しかも参加者の約半数が別に示したプログラムに従って研究発表を行なうという密度の高い会議として構成されていた。参加者の内訳は大学・研究所関係が８割、企業関係２割で、日本からは住友化学（欧州）駐在員　幸　一美氏と私の２名が参加し、私は研究発表も行なった。会議の主題が上の題目にも示した通り有機反応のコンピュータ処理と限定されていたこと、参加者がその方面の研究者に限定されていたことから参加者全員が積極的かつ徹底的に討論に関わる事ができた。したがって、ほとんどの講演が討論時間を大幅に超過し timetableはあってなきが如しの状態であった。

さて今回の会議の中で特に注目された話題は個別反応データからの反応知識ベースの誘導とその活用に関するもので、これに関連した研究発表は７～８件あった。知識ベース内でのデータ項目とその記述法は運用プログラムも含めた知識ベースシステムの設計とも大きく関連するため、ひときわ熱い議論が交わされた。私も関連発表を行なった関係上この議論には深く関わったが、今後の有機合成設計システムを考える上で、個別反応データから知識ベースを自動的に誘導することの重要性は多くの参加者の一致した意見として確認された。この会議のProceedingはJ.Chem.Inf.Comput.Sci.上に発表されることになっている。

Tuesday 29th

9.30	Opening Remarks and Greetings.	C. Jochum
9.40	The New Specialized Information Program. Future Perspectives for Chemical Information.	J. M. Czermak
9.50	Reaction in the Beilstein Information System.	M. Hicks
10.30	A Users´s View of Chemical Reaction Information Sources.	E. Zass
11.00	Tea	
11.30	Can We Predict Reactivity using MO-Calculations?	T. Clark
12.00	Computer Predicted Reaction.	R. Herges
13.00	Lunch	
15.00	Status and Future Developments of Reaction Databases and Online Retrieval Systems.	A. Barth
15.30	CASREACT - More than a Million Reactions.	R. C. Dana
16.00	CHEMINFORM - An Integrated Information System on Chemical Reactions.	A. Parlow
16.30	Coffee	
17.00	Recent Developments in Reaction Indexing and Searching.	A. P. Johnson
17.30	Reaction Indexing in Synthesis Design.	J.B. Hendrickson
18.00	Set-valued Mappings as a Mathmatical Basis of Computer-Assistance in Stereochemistry.	I. Ugi
18.30	Close	
19.00	Dinner	

Wednesday 30th

9.30	Synthetic Simulation by Synthon Substitution.	A. Weise
10.00	Stereochemical Decoding and Synthesis Planing using the Chiron Program.	S. Hanessian
10.30	Computer Aided Synthesis Design at RISC-LINZ: Automatic Extraction and Use of Reaction Classes.	E. S. Blurock
11.00	Tea	
11.30	Multi-Step Reactions: The Rabbit Approach.	A. J. Lawson
12.00	Similarity Searching in REACCS. A New Tool for the Synthetic Chemist.	G. Grethe
12.30	Recent Developments Analogical Reasoning about Reactions.	W. T. Wipke
13.00	Lunch	
14.30	Excursion	
20.00	Banquet	

Thursday 31th

9.30	REACCS in the Chemical Development Enviroment. 3. Graphically Non-equivalent Representations of Molecules and Reactions.	J. E. Mills
10.00	Reaction Management and Synthesis Planning in AIPHOS.	K. Funatsu
10.30	The Performance of a Non-interactive Synthesis Program.	M. Bersohn
11.00	Tea	
11.30	Modeling Aromatic Nitration Reactions Using Graph Theoretic Transforms.	M. Johnson
12.00	Geometric Requirements for Reactivity: The Simulation of Access to Reaction Centers and The Influence of Atomic Deformation on it.	G. Sello
12.30	Computer Assisted Analysis of Reactions Involving Organic Free Radicals and Diradicals.	E. R. Laird
13.00	Lunch	
15.00	Models for the Representation of Knowledge on Chemical Reactions.	J. Gasteiger
15.30	Building and Refining a Knowledge Base for Synthetic Organic Chemistry via the Methodology of Inductive and Deductive Machine Learning.	H. Gelernter
16.00	Applications of Neutral Networks in Chemistry. 1. Prediction of Electrophilic Aromatic Substitution Reactions.	G. M. Maggiora
16.30	Store or Infer? Problems of the Database Scope and Structure vs. Data Inference Capabilities in Reaction/ Compound Intelligent Retrieval System.	G. E. Vladutz
17.00	Coffee	
17.30	Conference Summary and Close	
19.00	Dinner	

海外動向

MEETINGS

30 September-2 October 1990.
Molecular Graphics Society/Alliant Computer Workshop on Free Energy Calculations in Chemical and Biological Systems.
York, England.
Contact: A. J. Wilkinson, ICI Pharmaceuticals, Plc, Mereside, Research Dept., Alderley Park, Macclesfield, Cheshire SK10 4TG. ENGLAND.

10-12 October 1990.
Parallel and Distributed Computers, and Systems.
New York, NY.
Contact: Dr. R. Ammar, PDCS '90, U155, Computer Science and Engineering Dept., University of Conneticut, Storrs, CT 06268 (FAX: 203-486-0318).

10-12 October 1990.
Machine Learning and Neural Networks.
New York, NY.
Contact: Dr. C. A. Vassiliadis, ECE Dept., Ohio University, Athens, OH 45701 (FAX: 614-593-0007).

15-20 October 1990.
ELMAU 3: Computational Methods in Chemical Design.
Schlo β Elmau, WEST GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a.d. Ruhr, WEST GERMANY.(49-208-30-64-88 ; FAX: 49-208-30-46-07).

1-4 November 1990.
Molecular Modelling in Drug and Protein Design (part of International Conference of IEEE Engineering in Medicine and Biology Society).
Philadelphia, PA.
Contact: Dr. Janardan S. Yadav, Dept. of Information Services and Technologies, University of Medicine and Dentistry of New Jersey, 185 S. Orange Ave., Newark, NJ 07103 (201-456-3657).

12-16 November 1990.
SUPERCOMPUTING 1990.
New York, NY.
Contact: Dr. Joanne Martin, IBM, T. J. Watson Research Center, P. O. Box 218, Yorktown Heights, NY 10598 (914-945-3285)

16 November 1990.
Computer-Aided Genetic and Protein Engineering. An ACS Satellite Television Seminar.
Contact: ACS Satellite TV Seminars, Room 809, 1155 Sixteenth St., NW, Washington, DC 20036 (800-227-5558, x31 or 202-872-8728; FAX: 202-872-6336).

26 November 1-December 1990.
Materials Research Society Meeting.
Boston, MA.
Contact: David Sours, Materials Research Society, 9800 McKinght Rd. —Ste. 327, Pittsburgh, PA 15237 (412-367-3003; FAX: 412-367-4373).

6-7 December 1990.
Visualization In Quantum Chemistry.
San Diego, CA.
Contact: Mick Savage, Stardent Computer, 880 W. Maude, Sunnyvale, CA 94086 (408-732-

0400; FAX: 408-732-2806).

28-29 January 1991.
Sixth Biennial Workshop on Computer-Assisted Chemistry.
Orlando, FL.
Contact: Babu Venkataraghavan, Lederle Laboratories, Middletown Rd., Pearl River, NY 10965 (914-732-3406) or Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

14-19 February 1991.
1991 AAAS Annual Meeting.
Washington, DC.
Contact: AAAS Meetings Office, 1333 H St., NW, Washington, DC 20005 (202-326-6450).

4-8 March 1991.
The 41st International Pittsburgh Conference & Exposition on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy.
Chicago, IL.
Contact: The Pittsburgh Conference, Inc., Dept. Bro, 300 Penn Center Blvd., Ste. 332, Pittsburgh, PA 15235.

13-20 March 1991.
Hannover Fair CeBIT '91.
Hannover, WEST GERMANY.
Contact: Hannover Fairs USA Inc., 103 Carnegie Center, Princeton, NJ 08540 (609-987-1202).

18-22 March 1991.
Americal Physical Society National Meeting.
Cincinnati, OH.
Contact: Michael Scanlan, American PhysicaL Soceity, 335 E. 45th St., New York, NY 10017 (212-682-7341).

8-14 April 1991.
UCLA Symposium on Protein Folding and Design.
Keystone, CO.
Contact: UCLA Symposia, 2032 Armacost Ave., Los Angeles, CA 90025 (213-207-5042; FAX: 213-207-2397).

14-19 April 1991.
201st ACS National Meeting.
Atlanta, GA.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

7-8 May 1991.
Fifth Molecular Modelling Workshop.
Darmstadt, WEST GERMANY.
Contact: Dr. Hans Joachim Böhm, BASF AG, ZHV/W-A30, D-6700 Ludwigshafen, WEST GERMANY (49-621-60-49338; FAX: 49-621-60-20440).

13-17 May 1991.
Eleventh International Meeting of the Molecular Graphics Society.
Chapel Hill, NC.
Contact: Dr. Fred Brooks, Jr., Dept. of Computer Science, University of North Carolina, Chapel Hill, NC 27599 (919-962-1931).

21-23 May 1991.
Computational Aspects of Inorganic Chemistry in Biological Systems (as part of the Mid-Atlantic Regional ACS Meeting).

Newark, DE.
Contact: George Famini, SMCCR-RSP-C, U.S. Army CRDEC, Aberdeen Proving Ground, MD 21010 (301 671-2670) or Alfred Lowrey, Laboratory for the Structure of Matter, Naval Research, Washington, DC 20375 (202-767-6381).

30 May-9 June 1991.
Static, Kinematic and Dynamic Aspects of Crystal and Molecular Structure.
Erice. Trapani, ITALY.
Contact: Prof. L. Riva Di Sanseverino, Diparimento de Scienze Mineralogiche, Piazza Porta San Donato 1, 40126 Bologna, ITALY.

3-5 June 1991.
ACS Polymer Technology Workshop.
Philadelphia, PA.
Contact: Dlane M. Morrill, Division of Polymer Chemistry, inc. 1103 Chemistry Research Bldg., Virginia Polytechnic Institute, Blacksburg, VA 24061-0212 (703-231-3029).

17-20 June 1991.
27th Annual Meeting of the Drug Information Association.
Washington, DC.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

14-19 July 1991.
10th International Conference on Computers in Chemical Research and Education (ICCCRE).
Jerusalem, ISRAEL.
Conract: the Conference Secretariat, 10th ICCCRE, P. O. Box 71102, Jerusalem 91079, Israel (972-2-662989, 668070, TELEX: 26577 OMGIS IL, FAX: 972-2-6656689). 詳細は８巻３号の国際会議欄参照。

21-26 July 1991.
American Crystallographic Association Annual Meeting.
Toledo, OH.
Contact: Alan Pinkerton, Dept. of Chemistry, Univ. of Toledo, Toledo, OH 43606 (419-537-4568).

25-30 August 1991.
201st ACS National Meeting and 4th Chemical Congress of North America.
New York, NY.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

18-22 November 1991.
SUPERCOMPUTING 1991.
Albuquerque, NM.
Contact: Raymond L. Elliott, MS B-260. P. O. Box 1663, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545 (505-667-1449).

8-11 June 1992.
28th Annual Meeting of the Drug Information Association.
San Diego, CA.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

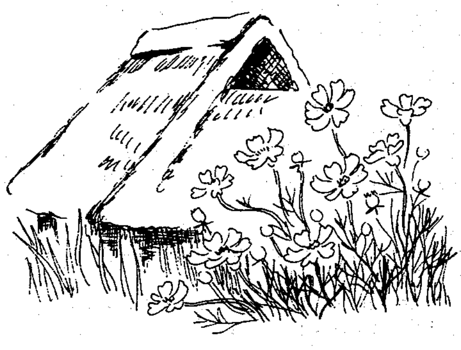
9-16 August 1992.
Americal Crystallographic Association Meeting.
Pittsburgh, PA.
Contact: Bryan Craven, Dept. of Crystallography, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260.

16-20 November 1992.
SUPERCOMPUTING 1992.
Minneapolis, MN.
Contact: Bill Buzbee, National Center for Atmospheric Research, 1850 Table Mesa Dr., Boulder, CO 80307 (303-497-1204).

28-29 November 1992.
SUPERCOMPUTING 1992.
Paris, France.
Contact: Charles Omana, U.S.Embassy, 4 avenue Gabriel, 75382 Paris Cedex 08 FRANCE (3-1-42-96-12-02; FAX: 33-1-42-66-48-27) or in the U.S.: Don Dowd Communicatins, Inc., P. O. Box 1059, Belmont, CA 94002 (415-593-9899; FAX: 415-593-0937).

1 December 1992.
SUPERCOMPUTING 1992.
Stockholm, SWEDEN.
Contact: Robert Connan, Commercial Counselor, Embassy of the United States, Stockholm, SWEDEN (46-8-783-53-00; FAX: 46-8-660-91-81) or in the U.S.: Don Dowd Communicatins, Inc., P. O. Box 1059, Belmont, CA 94002 (415-593-9899; FAX: 415-593-0937).

4 December 1992.
SUPERCOMPUTING 1992.
London, ENGLAND.
Contact: Jere M. Dabbs, Commercial Attaché, Embassy of the United States, London, ENGLAND (44-1-499-9000; FAX: 44-1-491-4022) or in the U.S.: Don Dowd Communications, Inc., P. O. Box 1059, Belmont, CA 94002 (415-593-9899; FAX: 415-593-0937).



文献紹介

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1990年第30巻3号（8月） 論文題目、著者、頁

1989年第2巻5号 論文題目、著者、頁

Contents of Disks 19 to 24

Disk 19: IBM Format
CONTENTS.ASC describes contents of hardcopy and READ.ME files from all disks; *.ASC, ASCII text files of papers; CARLSEN.DOC, ChemText document file of COST paper; EXAMPLES directory, input/output files for M.O.SCRF paper.

Disk 20: IBM Format
READ.ME, describes files, *.DOC, ChemText format: BAUER.DOC, IGOR2 paper; BAUER2.DOC, IGOR2 manual; KATRIT.DOC, M.O.SCRF paper.

Disk 21: IBM Format
IGOR2.ARC, compressed archive of IGOR2 executable program and sample data files; READ.ME, describes contents of IGOR2.ARC and installation procedure; INSTALL.BAT, procedure to dearchive and install IGOR2; ARC.EXE, archive program used by INSTALL.BAT.

Disk 22: IBM Format
COST.ARC, compressed archive of COST synthesis evaluation program; READ.ME describes contents of COST.ARC and installation procedure; INSTALL.BAT, command procedure to dearchive and install COST program; CARLSEN2.DOC, manual for COST in ChemText format.

Disk 23: IBM Format
The files on this disk pertain to the M.O. SCRF paper. The AMPAC and MOPAC directories contain the changed FORTRAN routines for the AMPAC and MOPAC programs, respectively; INSTALL.ASC briefly describes how to use the files, READ.ME lists the contents of the directories. The EXAMPLES directory on disk 19 is also part of the M.O. SCRF paper.

Disk 24: Macintosh Format
*.ASC files, ASCII files described for Disk 19. M.O.SCRF folder contains program files for paper by Karelson, Tamm, Katritzky, Cato, and Zerner.

AMPAC subfolder: changed FORTRAN files for AMPAC program
MOPAC subfolder: changed FORTRAN files for MOPAC program
EXAMPLES subfolder: input/output files from examples.
INSTALL.ASC briefly describes how to use the above files.

Note: Computers that can not read IBM or Mac format disks can download files from TCM-Online.

Contents of Disks 25 to 28

Disk 25: CONTENTS.ASC contains all READ.ME files of all disks describing each file in detail; *.ASC, ASCII text files of each paper; PROUS directory, 100 compound sample database (ChemBase® format) that is part of the software review: Richard C. Allen "CIPSLINE PC, Prous Science Publishers".

Disk 26: *.DOC files are ChemText® document files for the respective papers; DUNN1.ARC, Word Perfect® 5.1 Dunn paper in compressed archive format; READ.ME, describes these files.

Disk 27: UNIPALS program by Glen and Dunn: PCA.EXE, Principal Components Analysis program; PLS.EXE, Partial Least Squares program; PREP.EXE, Data Conversion Program; PLOTVEC.EXE, Plotting program; PREDICT.EXE, Predicting program; PEPTID.DAT and LOGP20.DAT, sample SIMCA format data files used in the UNIPALS paper, *.REF, *.RAN, *.ONA, PREP format files produced from *.DAT file by PREP save command; DUNN2.ARC, compressed archive of Word Perfect 5.1 document file of UNIPALS paper; READ.ME, describes these files.

Disk 28: Macintosh® format contains CONTENTS.ASC, the complete contents of all disks in this issue; *.ASC, the ASCII version of all papers; PEPTID.DAT and LOGP20.DAT, sample SIMCA format data files for the UNIPALS program used in the UNIPALS paper

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

Journal of Computational Chemistry

Volume 11 Number 3 April 1990

Volume 11/Number 4/May 1990

Volume 11/Number 5/June 1990

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Vol. 221, 1990

Short communication

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1990年第5巻2号（6月） 論文題目、著者、頁

ISSN 0913-3747

CICSJ Bulletin

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

ワークステーション 特集号

日本化学会
情報化学部会

Volume 8, Number 6
November 1990

目　　次

特集：ワークステーション

「ワークステーション特集」にあたって

＝編集委員会より＝

小出昭夫（日本ＩＢＭ東京基礎研）

最近、化学系研究者の間でワークステーションが急速に使われだしている。また、その上での分子設計システム（分子モデリングやドラッグデザイン）を専門に開発するソフトウェア会社が、米国、イギリス、日本でこの数年間に多数生まれた。これは単なるブームなのか、それとも、ワークステーションが化学の研究や教育に新しいコンピュータの利用形態を本当に切り開いているからだろうか。本特集では、情報化学部会員の討論資料になればと考え、コンピュータ専門家、既に利用している現場の研究者、メーカなどの方に異なる視点からワークステーションについての素直な意見を書いていただいた。

まず、初めにくる疑問は、ワークステーションがパーソナルコンピュータや従来の大型計算機とどこがどう違うのかである。これには、グラフィックスやメモリ（内部，外部）や計算速度などのハードウェア機能と価格帯の違いもあるが、運用形態や基本ソフト（UNIX、X-Windows、ネットワーク関係など）や歴史的背景の違いもある。従って、石田晴久先生（東京大学）に総説として「ワークステーションの現状と展望」を特別にご寄稿いただいた。また、各ワークステーションメーカの方からもご寄稿いただいた。

さらに興味のあるのは、ワークステーションが化学研究の現場で現在どう使われ、どう役立っているのかである。情報化学部会員を初めととする多数の方のご協力により、薬品／分子設計や実験データの分散処理やデータ・ベースやネットワークでの使用例や現状のワークステーションの問題点を紹介できた。これらは、運用形態や入手可能な適用ソフトウェア群やソフトウェア開発ツールなどと多方面の問題点に関係するので、今後、機会を改めて討論を具体的に深めて行く価値があるだろう。

また、残念なのは、紙面上なので、ワークステーション上で動くソフトウェアの実例をお見せできないことである。これらのソフトウェアは、画面直接操作、オブジェクト志向、マルチウインドウ、人工現実感（Virtual Reality）などの新しい考え方を生みだし、薬品／分子設計関係のソフトウェアがその最先端を走っている。

最後に、本企画にご賛同しお忙しい中で執筆していただいた方々に厚く御礼申し上げる。

総　論

ワークステーションの現状と展望

東京大学大型計算機センター　石田晴久

1. ワークステーションとパソコンの違い

ワークステーション(WS)は、わが国では1988年頃から本格的に発売されるようになった比較的新しい小型コンピュータである。表1にパソコンと似た形をした卓上型の低価格WSの例を、表2にラップトップ型WSの例を示す。ディスプレイはいずれもモノクロである。これらの例からも察せられるように、WSは一般に（パソコンにはない）次のような特徴を持つ。

①ディスプレイが17インチ程度と大型で、解像度は1,000×1,000ドット程度に高い。表示は安いものはモノクロだが、NeXT社のWSでは4レベルに濃淡が変えられる。

②ネットワーク（イーサネット）に対するインターフェースを標準的にもつ。このためイーサネット方式のLAN（構内ネットワーク）にはすぐつなげるし、LAN経由で他のWSや後述のXウィンドウ端末からそれを使うことも可能である。

③OSがUNIXである。UNIXは1969年以来ベル研究所を中心に開発強化が続けられてきたOSで、マルチタスキングすなわち複数のプログラムの同時並行処理が可能などといった特徴をもつ。 また2台以上の端末機をつないで、2人以上のユーザが同時に使うこともできる。

④マルチウィンドウ・システムがほぼ標準的に用意されている。画面に多くのウィンドウを表示して、その中で別々のプログラムを同時に走らせることも可能である。

⑤処理が高速で、全体に高性能である。表1,2にみるように、下位機でも10MIPS (Million Instructions Per Second)を上回るものがあり、上位機になると大型機並みの数10MIPSの能力をもつものがある。後者をマイクロ・メインフレームと呼ぶ人もいる。

⑥メモリは8MB（メガバイト）以上と大きい。

⑦大容量のハードディスクがほぼ標準的についている。しかしディスクレス型でも、ネットワークにつないで、NFS（ネットワーク・ファイル・システム）などの機能を使えば、他のシステムのディスク上のファイルを自分のファイルのように使うことが可能である。

⑧ネットワーク上でサーバー（他のコンピュータにサービスを提供するマシン）としても使える。ファイル・サーバーやプリント・サーバーや通信サーバー

表1　低価格ワークステーションの例

機　種	SPARCステーション	NeXTステーション
公称性能	12.5	15MIPS
プロセッサ	SPARC (RISC)	68040
クロック	20MHz	25
ディスプレイ	(17″) 1152×900点	(17″) 1120×832点
メモリ	8～16MB	8～32MB
ディスク	(ディスクレス)	105MB
フロッピー	——	3.5″ (2.88MB) 1台
価　格	99.5万円～	108万円～

表2　ラップトップ型ワークステーションの例

機　種	ソニー(NWS-1200)	東芝 (SPARC－LT)
公称性能	3.9MIPS	13.2MIPS
プロセッサ	68030	SPARC
クロック	25MHz	20MHz
ディスプレイ	1120×780点	(12″) 1152×900点
メモリ	8～12MB	8～40MB
ディスク	240MB	180MB
フロッピー	3.5″ (1.44MB) 1台	3.5″ (1.44MB)
価　格	155万円	198万円

（ゲートウェイ）はその例である。

⑨ハードウェアは今や性能の割には安い。コスト性能比はパソコンより上である。

⑩しかし応用プログラムはまだ高価である。ただ幸いにして、UNIX用にはほとんど無料で使えるPDS(Public Domain Software)があり、NSFなどを通してネットワーク上でソフトウェアを共同利用することもできる。

⑪パソコンに比べると、高性能なだけに、OSも複雑で、使いこなすにはかなりの手間を要する。ネットワークの利用も考えると、UNIXの専門家を養成して、身近に置くことが望まれる。

2. ワークステーションの利用目的

前述のように、WSはコスト性能比はパソコンより高いが、価格、とくに応用ソフトウェアを含めた価格はまだ高いから、一般には付加価値の高い仕事に使うべきものである。そうした仕事の例を次にあげてみよう。

①ソフトウェア開発。WS用のUNIXには高機能エディタや言語Cのコンパイラを始めとして、このためのツールがいろいろ揃っているので、ソフトウェア開発は能率よくできる。

②文書処理。WSでは文字のサイズやフォントは画面を見ながらかなり自由に変えられ、画面でみた通りのものをプリンタに出力するWYSIWYG(What you see is what you get)式の編集が容易である。

③コンピュータ・グラフィックスやCAD。カラーボードおよびカラーディスプレイをつければ、3次元の回転を含む本格的なグラフィックスができる。まだ高価だがCAD(Computer Aided Design)用のソフトも増えつつある。WSはシミュレーションの結果などの視覚化表示(Scientific Visualization)にも向いている。

④マルチメディア情報の利用。カラー写真、音声、音楽、ビデオ画像（動画）の利用はパソコンでよりもWSでの方がやり易い。これらは電子メールにも取り込みが可能になりつつあるが、それには入力用マイク、カラー画像スキャナ、ビデオ回路などの付加が必要となる。

⑤ネットワーク機能の利用。メイル、ニュース、NSF、各種サーバーの利用による分散処理など。

3. UNIXの標準化とGUI

次の2つの団体が競合して標準化を行っている。

UII(UNIX International)---AT&T, SUN, 富士通, 東芝, NEC, ソニー, オムロン, 沖, リコー, ゼロックスなど

OSF(Open Software Foundation)---IBM, DEC, HP, 日立, 三菱, ソニー, オムロン, キャノン, リコーなど

ただいずれのUNIXもAT&TのSystem Vとバークレー版を合わせたものになっており、両団体の上に立つX/OPEN社が両方の統一の努力をしているから、大差はないとみてよい。異なるのはGUI(Graphic User Interface)で、UIIはOpen Look(SUNではOpenWindows), OSFはMotifを開発しているが、いずれもMITで開発されたXウィンドウ・システムをベースにしている

から、相互に利用が可能である。Motifはパソコン用のWindowsやOS2/PMと操作法が似ているので人気がある。

しかし実際には、SUNのSunOS+OpenWindowsを採用しているSUNマイクロ、富士通、東芝などのグループと、OSF/Motifを採用しているOSFグループとNEC（UII側だがMotifも使用）およびソニーなどとの競争になっている。このほか今のところ独自路線を行くNeXTやオムロンのようなメーカーもある。

4. RISC戦争

UNIX-WSではCPUとしてモトローラの68030/68040やインテルの80386/486チップも使われているが、今後シェアの拡大競争が激化しそうなのは、次のようなRISC(Reduced Instruction Set Computer)チップである。これはもちろんRISCの方が高性能が出せるからである。

SPARC --- SUN，富士通，東芝，沖

MIPS（R3000，R6000）--- DEC，NEC，ソニー

88000（モトローラ）--- オムロン，データジェネラル

HP-PA --- HP，日立

独自 --- IBM RS/6000（Powerステーション）

パソコンの場合はCPUは8086か80286/80386で、応用プログラムにはほぼ2進（マシン語）レベルで互換性があるが、上記の異種RISCチップ間では互換性がない。これはソフトウェア流通の上からは大問題である。この解決のために、応用プログラムを中間言語の形で配布し、インストール時にそれを各RISCマシン語に変換する方法が研究されている。しかしまだ成案はない。

5. マルチプロセッサ

近い将来、1個のLSIにさえ複数のCPUがのるようになるから、UNIXでもマルチプロセッサのサポートが必要になる。そこでカーネギーメロン大学で開発されたその目的のMachが注目されて、NeXTやOSFで採用されている。オムロンも88000を4台のせたWSでMachを採用している。

6. Xウィンドウ端末

各社から製品が出ていて、カラー・モデルもある。パソコンをX端末にするハードウェアやソフトウェアもExcelanなどから発売されている。X端末はディスクを持たないため、UNIXホストとネットワークが動いていないと使えないが、安く、静かで、UNIXソフトウェアをユーザが管理する必要がなく、ファイルのバックアップがホスト（サーバ）まかせにできるという利点をもつ。

7. ネットワーク機能および分散機能の強化

UNIXでよくサポートされているイーサネットは、太い（直径10ミリ）同軸ケーブルを使うthick wire(10BASE5)方式、細い（直径5ミリ）同軸ケーブルを使うthin wire(10BASE2)方式、ツイストペア電話線（それでも10Mbpsで10BASE-Tと呼ばれる）方式の三つに多様化した。より高速の通信用にはトークン・リング方式で100MbpsのFDDI(Fiber Distributed

Data Interface)も使われ始めている。

こうしたLANを使うソフトウェアとしてはNFS(Network File System)や前記のXウィンドウが広く使われている。さらにこれから重要となる分散環境実現のためのシステムとしては、HP社（含アポロ系WS）のTeam Computing(NCS=Network Computing SystemやTask Brokerを含む）やSUNの同様な方式が提案されている。これらがどう標準化されるかは今後の問題である。次のバークレー版(BSD4.4)にはOSIベースのネットワーク機能が入ることになっている。 大学・研究所関係では、64KbpsのデイジタルN専用線やISDN回線でUNIXマシンをTCP/IPプロトコルでつなぐJUNET/WIDEが広がりつつある。これは東大・慶応大・ハワイ大学を経由してアメリカのネットワークと結ぶ国際的なインターネットの一部であり、電子メイル交換や電子ニュース交換(BBS)やファイル転送に使われている。

8．オブジェクト指向プログラミング・ツール

NeXT-WS上のNextStepで動くインターフェースビルダーやパーソナルメディアのSunView用AutoCODEはその例である。こうしたソフトウェアは今後非常に重要になると考えられる。

9．応用ソフトウェアの低価格化傾向

WSの出荷台数がまだ少ないために、UNIX用の応用ソフトウェアは高価であったが、パソコン用ソフトウェアの移植などにより、安いものも登場し始めている。パソコンと分散処理できるソフトウェアとしては、SAS（統計解析）、Unify（データベース）、Informix（データベース）などがある。問題としては、異プロセッサやカートリッジ・テープの間に２進互換性がないことである。今後の交換媒体としては、3″（8センチ）型のCD-ROMに期待したい。

10．MS-DOS on UNIX

アメリカではXDOSなどが使われているが、日本ではUNIX上でMS-DOSの利用を可能にしようという動きはまだ余りない。

11．インストール・OS更新・バックアップの容易化

現在のUNIXの管理は、普通のパソコン・ユーザでできるほど簡単にはなっていない。メーカーで出荷時にあらかじめUNIXをインストールしておくことは行われるようにはなった。しかしネットワークへの接続にはネットワーク管理者の助けが必要である。

12．UNIX-WS普及のための条件

①WSとくにラップトップ型が安くなること。
②ソフトウェア記録媒体（カートリッジ・テープ、8ミリ・テープ、DAT、光磁気ディスク、CD-ROMなど）を標準化すること。
③プリンタの標準化をはかること。
④異機種に対するソフトウェアの共通配布方式を確立すること。
⑤日本語機能の強化をはかって、応用ソフトウェアを増やし、また安くすること。
⑥LANを普及させること。
⑦各種ソフトウェアのインストールやOS更新や環境設定を容易にすること。

ワークステーションのDBMS

筑波大学 電子情報工学系 山口和紀

本論では、ワークステーションに特徴的なデータベース管理システム（DBMS）の話題について述べる。以下に例として挙げているシステムは、筆者の属している筑波大学電子情報工学系のデータベース研究室で研究・開発しているものである。筆者のところでは、ワークステーションといえばUNIXというオペレーティング・システムが使用されており、ワークステーションといいながら、実はUNIXの特徴であることも多い事をあらかじめお断りしておく。

1） グラフィックス応用

ワークステーションでは、グラフィックス・プロセッサとCPUが密接な関係にあるためグラフィックスの強力な利用が可能となっている。これにより、データベースに複雑なデータを格納したり、表示したりする事が可能となってきた。また、存在するデータをそのまま表示するだけでなく、いろいろ加工して表示する事が実用的に可能となり、応用がひろがってきた。

例えば、化合物のDBMSとして開発中のCHARMでは、化合物の情報として、化学構造式を扱えるようにデータベースのモデルが拡張されているが、これを表示するにはグラフィックスの機能が必要である。そのためのインターフェース部分をワークステーションのXウィンドー・システムで実現する実験をしている。このようなメニューの処理を含むグラフィックスのプログラムは長いプログラムとなりがちであるが、Xウィンドーにおけるオブジェクト指向のライブラリを利用する事により２０００行程度で実現している。ワークステーションでは、このようなXウインドーやそのライブラリがソースコードも含めて公開されており、無償のソフトウェアである点は大きなメリットである。このように複雑なライブラリとなると、仕様の記述も不完全になりがちで、また、仕様は完璧であるとしても使い方が難しくなる。Xウィンドーでは、ソースコードが公開されているため、手軽に改良したり、ドキュメントに記述されていない細部を知る事ができ、ソフトウェアが大変利用しやすい。

化合物の合成方法などを検討するには、膨大な量の実験情報から関係のある内容を検索し、内容を検討する必要がある。このような実験情報は相互に複雑に関係しあっているため、情報をグラフで柔軟に表現するモデル（ハイパーテキスト）が必要となるが、一方、多量の情報全体がグラフでモデル化されていると、必要な情報を見つけることが難しくなり使用する人に逆に負荷がかかるという問題がある。そこで、関係型モデルとグラフを組む合わせる事によりほどよい柔軟性をもつモデルをつくりOrganic Synthesesなどの文献の情報をDB化する作業を行なっている。ここでも、Organic Synthesesにあらわれる図や情報、そしてその相互関係を表現するグラフを表示するためにグラフィックスが多用されている。また、技術用の文献には、テキストの部分にも、特殊な記号や表記が現れる。例えば、α, βなどのギリシャ文字、、文献の番号 [1] を肩につけたり、化学式にも$(C_6H_5)CHCO_2H$のような添え字があらわれる。これらも、ワークステーションにおける文書作成のプログラムにより比較的容易に実現できる。これらの情報は単に数字が上に

つくというようなものではなく、文献番号というような意味が付随している。それを応用のプログラムが状況に応じて、表示の場合は既存の文書作成のプログラムを利用するなどして処理していく。UNIX では、このようにプログラムを組合せることが比較的容易にできる。

2） アプリケーションとの統合

1）の項目でも述べたように技術情報などのＤＢを作ると、通常の数値や文字以外の応用向けのデータを扱う必要が出てくる。そのようなデータに対して有効な検索手段を提供する為にはＤＢＭＳを応用向けに作り変えていく必要がある。しかし、いままでのように、必要となる可能性のある全ての機能を取り込んだＤＢＭＳを作っていてはＤＢＭＳが巨大になりすぎ、ワークステーションでは実現できなくなる。そこで、ＤＢＭＳ構築の方法として拡張可能ＤＢＭＳの考え方が出てきた。拡張可能ＤＢＭＳは、ＤＢＭＳを部品化しておき、応用に必要な機能の部品を組み合わせてシステムを実現する方法である。この方法は、従来のＤＢＭＳに比べて柔軟かつ効率的なシステムを実現できるので注目されている。ＭＯＤＵＳプロジェクトでは、拡張可能ＤＢＭＳの考え方に沿って、どのようにして既存のＤＢＭＳを部品化し、必要に応じて再構築が可能であるかを実験しながら、検討している。特に技術系のＤＢＭＳでは、1）でも述べたように従来にないデータを扱う必要があるため、そのデータに対する処理機構を組む込み効率的なシステムの実現が可能になるため、拡張可能ＤＢＭＳの技術の確立が重要な課題となってきている。

3） メモリ・レジデントＤＢＭＳ

ワークステーションでは１００Ｍ近い主記憶を持つものも出現している。勿論、汎用機では、さらに高速で大容量な主記憶を有しているが、ワークステーションは、一人で占有して使用するので、相対的に使用できるメモリの量が多い。いままでのＤＢＭＳでは入出力の速度が問題になっていたが、頻繁に使用するデータのかなりの部分をメモリに常駐させる事が可能となってきている。これにより、ディスクなどの２次記憶と主記憶の間のデータのやりとりよりも、処理の速度などが問題となる場合がでてきた。例えば、化合物の構造式である化学グラフの同型性の判定は化学グラフのノードの番号づけに任意性があるため、組合せ的な処理を行うため時間がかかる。従って、このようなデータを扱う場合、あらかじめデータをスクリーニングして候補を減らす必要がある。そのためにＤＢＭＳの問い合わせの最適化の方法にも再検討の必要がでてきた。

まとめ

以上、３つの項目に対して、ワークステーションに特徴的なＤＢＭＳの問題を述べた。ワークステーション自体は特に新しい技術ではない。しかし、ワークステーションにより比較的手軽にＤＢＭＳを構築するような実験ができるようになってきたという点において、その貢献度は大きい。1）でも述べたように、このようなワークステーションのソフトウェアは、そもそもの UNIX の影響もあって無償で提供されるものが多い。ＤＢＭＳでも postgres などの実験システムは無償で提供されている。このようにワークステーションでは再利用可能な財産が蓄積されているのが大きな特徴である。われわれも単にそれを利用するだけでなく、なにがしかの貢献をしたいと考えている。

ユーザーの視点から

ワークステーションと分子力学計算

大澤映二（豊橋技術科学大学）

ここ数年来我々の仕事はほぼ完全にワークステーションに依存して進行してきたし、これからしばらくこの情況が続くと思われる。この意味では我々にとってワークステーションは本当に役だっている。ところが使い方は甚だ原始的で、その意味ではあまり他の人の役に立つようなことは書けない。まるで展示場のようにさまざまなメーカーのワークステーションが混在している上に、ネットワークは皆無に近いのでＯＳもばらばら、ディスクの共用も殆ど出来ていない。モニターは全てモノクロ、アプリケーションソフトも買うゆとりはないので、プログラムはエディターを除いては殆ど全て自家製である。研究室内では一人当たり少なくとも一台のワークステーション（および一台のラップトップパソコン）を持つことを目標にして台数を増やす事に努めた結果、この目的はどうやら達成した。しかし、なにしろワークステーションの性能があまりにも早く向上し続けるので古い機種と新しい機種の間の性能差が目立ち、最高速機種に常にユーザーが集中し、全体としては作業の能率はあまり良くない。

しかし、仮にたまたま大きな研究費でも頂く事が出来て、機種を統一してＬＡＮで結び、夢のようなワークステーションシステムを作り上げたところで、一時的に能率は上がるかも知れないが、一、二年もすればまた一層速くて優れた新機種が現れるから、システム構成をそっくりやり変えなければ相対的に能率が落ちることになる。これでは研究費がいくらあっても足りないから、ハードウエア構成については結局は今のような付け焼き刃的やり方をしてゆくしかないと考えられる。考えてみると、この事情はどこでも似たりよったりで、そのとき時で最良の選択を重ねていくしかないだろう。

ところで、分子力学の研究を行っていると、この計算手法がいかにもワークステーションに向いている事が解る。かつては中程度の大きさを持つ単一分子が分子力学計算の主な対象であったが、今ではこのような計算は誰でもパソコンで行うようになったのでもはや我々の研究テーマにはならない。むしろ非常にフレキシブルな分子や分子集合体の処理などが興味の中心になりつつある。このような系は、他の手法であればどうしても超大型あるいはスーパーコンピュータを必要とするような大規模計算になるが、分子力学法を使えばどこにでもあるワークステーションで数時間から数日で片づける事が出来るはずである。

「出来るはずである」と言ったのは、これから越さなければならない問題点が三つあるからである。一つはタンパク質、合成高分子などの分野で古来から悩まされてきた障害、つまり無限に近い配座の中からいかにして化学的に意味のある配座を作り出すかという問題、もう一つは溶媒効果をいかに扱うかと言う問題、最後に慢性的な分子力学パラメータ不足の問題である。幸いな事にこの三大問題に対して解決の兆しが少しづつ見えだした。うまく行くと近い将来にワークステーション上で行う計算化学の守備範囲が大幅に広がる可能性が高い。　（平成２年１０月４日）

化学技術研究所におけるワークステーションの利用状況

化学技術研究所　電子計算機室長　杉江　正昭

工業技術院筑波研究センターは昭和５４年に設立され、通商産業省工業技術院傘下の在京の９研究所が移転して来た。計量研究所、機械技術研究所、化学技術研究所、微生物工業技術研究所、繊維高分子材料研究所、地質調査所、電子技術総合研究所、製品科学研究所、公害資源研究所である。工業技術院にはその他に、北海道工業開発試験所、東北工業技術試験所、名古屋工業技術試験所、大阪工業技術試験所、中国工業技術試験所、四国工業技術試験所、九州工業技術試験所の７試験所が属している。昭和５６年にこれら１６研究所の共同利用施設として、情報計算センター（Research Information Processing Systemの頭文字を取ってＲＩＰＳと呼んでいる）が設立された。ＦＡＣＯＭ　Ｍ２００を中心にし、筑波の９研究所を光ファイバーケーブルで結んだ先進的なネットワークを持ったものであった。これを第１期ＲＩＰＳと呼んでいる。その後、このＲＩＰＳは３、４年ごとの見直し作業を経て、現在では第３期ＲＩＰＳが稼働している。第２期では中央のＣＰＵがＦＡＣＯＭ　Ｍ２００からＭ３８０へと更新され、新たにＩＢＭ　３０８１Ｋが加わった。さらに第３期ではそれぞれＦＡＣＯＭ　Ｍ７８０／２０およびＩＢＭ　３０９０／１８Ｅへと更新されるとともに、スーパーコンピュータＣＲＡＹ　ＸＭＰ／２１６が新規導入された。ＲＩＰＳではこのようにＣＰＵに対する需要の増大に対応してＣＰＵ能力を拡大するとともに、ネットワーク環境の整備も行って来た。

昭和６３年に運用を開始した第３期ＲＩＰＳでは、ＣＲＡＹのスーパーコンピュータの導入とともに、ネットワーク環境の充実が目玉であった。ＣＲＡＹ　ＸＭＰのＯＳにはＵＮＩＸ（ＵＮＩＣＯＳ）を採用し、ＦＡＣＯＭ　Ｍ７８０にも仮想計算機を導入し、その上で従来のＯＳ（ＭＳＰ）とＵＮＩＸ（ＵＴＳ）を並存させている。同時に多数のワークステーションがスーパーコンピュータの端末として、あるいは前処理、後処理を行うコンピュータとして導入された。それらのワークステーションや各所のパソコンは、イーサネットの同軸あるいは光ケーブルによってＲＩＰＳのコンピュータに接続されている。そのケーブルの総延長は約４０ｋｍにも及び、ＵＮＩＸとＴＣＰ／ＩＰの組合せのネットワークとして我が国でも最大規模のものであろう。（なお前記の７地域試験所はＮＴＴの専用あるいは公衆回線でＲＩＰＳを利用している。）ＵＮＩＸおよびそれに基づいたネットワークの整備により、同じプログラムをパソコンからスーパーコンピュータにいたるあらゆる計算機の上で、ほぼ同じような操作で利用することが可能になった。パソコンと汎用大型コンピュータのデータ転送も格段に改善され、今や利用者は計算の負荷に応じて、その仕事にふさわしい計算機を使い分けることが可能となった。

筑波研究センターには電子技術総合研究所、製品科学研究所など第３期ＲＩＰＳ以前からワークステーションになじんで来た研究所もあるが、化学技術研究所の場合にはそれ以前にワークステーションは皆無に近い状態であった。また昭和６３年当時導入されたワークステーションの計算能力は数ＭＩＰＳ程度であったので、その多くはウィンドウ環境が利用できる端末として利用されている。当所の大型計算機の利用は分子計算、流体解析などＣＰＵパワーを要求するものと、大量の補助記憶装置を必要とするデータベースに大別される。後者は従来ＦＡＣＯＭ　ＭＳＰ上のデータベース管理システムを用いて開発されてきたため、現在でもＵＮＩＸではない旧来のシステムでの利用が中心となっている。流体解析の分野では「視覚化」が避けられない過程であり、スーパーコンピュータ上の計算プログラムおよびワークステーション上の図形処理プログラムが日常的に利用されている。タンパク質など大きな分子の構造シミュレーションに用いられている分子動力学計算でもやはり「視覚化」が重要であり、グラフィックスワークステーションが利用されている。しかし分子軌道計算では、最近の傾向としてより信頼性の高い非経験的分子軌道法を使う場合が多く、ワークステーションの出番はあまりないようである。もちろんウィンドウ機能を有する端末としてはよく利用されている。

しかし昨年来の１０～３０ＭＩＰＳのワークステーションの出現により事態は変化の兆しがみられる。このクラスのワークステーションは１研究室で買える程度の価格で、しかも汎用機なみのＣＰＵパワーを持つということで、ワークステーションの利用法を根底から変える可能性を秘めていると言える。ただ一般的な化学の研究者の計算機に対する要求を考えると、ＣＰＵパワーとしてはこれまでのパソコンやワークステーションでも充分という場合が多い。むしろすぐれたアプリケーション、使いやすいソフトウェアの充実が必要であろう。こういう観点からすると、これからの研究現場ではすぐれたユーザーインターフェースを持ったマッキントッシュなどのパソコンの広がりが無視できないであろう。マックは他のパソコンと比較すると割高であり、最近のデスクトップあるいはラップトップ型のワークステーションの価格とそう違わない。しかしソフトウェアのコストパフォーマンス、ソフトウェアの充実という点で、現時点ではマックに軍配を上げざるを得ない。今後のワークステーションの普及にはアプリケーションの充実が不可欠であろう。特に強調しておきたいことは、マックのように必要にしてかつ充分な機能を持った低価格のソフトウェアがどれぐらい登場して来るかが鍵を握っているということである。もちろんＣＰＵパワーが必要な人やプログラムを開発する人には、現在でもワークステーションは「買い」である。メモリ、ディスク装置などの周辺機器の価格は今後も低下して行くであろう。特にプログラム開発には、共用の大型コンピュータを利用するより、柔軟な運用が可能なワークステーションの方がふさわしいであろう。

ワークステーション雑考

旭硝子・中央研究所
石田　嘉明

ワークステーションに限らず化学研究にコンピュータを導入しようとする時には、ひとりでそれを専用できる状況にある時は別として、多くの場合その研究者の置かれている周囲の環境というか、コンピュータを受容する人々の風土がどんなものであるかが、大きくかかわっているいるように思っています。

ここで「風土」と言うのは簡単に‘コンピュータ事情’と解されてしまう事が普通で、メーカーの方々には大変分かり難いことのようです。例えば当研究所のようにＩＢＭの大型汎用コンピュータが稼働している既設の環境があるとしますと、ワークステーションやミニスーパーコンピューターのメーカーの方はＩＢＭのマシンと接続出来たり、ＩＢＭのソフト資産がそのまま使えること、などをポイントにして現行マシンの延長線上で色々なグレードの案を持って来ます。また、逆に現行マシンの出来ないことを捜し出して来て、ハードウェアの性能とか特徴的なソフトとかを強調して、入り込む余地を求めて来る事が多い様です。

化学の研究者にとっては『どちらの論法も違うなぁ』と感じられてしょうがないのです。つまり化学研究にとっては単純な‘コンピュータ事情’の改善が研究を加速するものなのか否か、直観的には分かりにくいことなのです。

他方、ワークステーションの化学研究への導入は、実験データを優先しがちな実験科学者の世界にコンピュータを身近なものにしようとする点で、風土改革の要素を持っています。理論計算や理想モデルの結果のみでは実験データとなかなか一致しないことの多いのが化学の世界ですから、『大型コンピュータでもなかなか満足な計算をしてくれないのにワークステーションでどんなことが出来るのだろう』と言う素朴な疑問が有っても当然です。これにはメーカーの方々と同じ論法でハード性能の良さをいくら説明しても研究者の理解は難しいと思うのです。

筆者がワークステーション導入に動いたのは次のような研究風土を見いだしたからと言えるでしょう。まず、いろいろな発想で『コンピュータ化学が使えないか？』と考えている研究者がけっこう周囲に居ることがベースです。

(1) 研究者はどんなことでコンピュータ化学を利用したいと思っているか?
(2) コンピュータを利用したいのに、どんなことで不便に思っているのか?

いろいろな答えが有りましたが、ポイントは『実験で出来ないことをコンピュータで出来るならまずやってみたい』あるいは『実験したいけれども現状では出来ないのでコンピュータで予め試して見たい』というものです。つまり計算機実験・化学的現象のシミュレーションがコンピュータ利用上の目的です。『実験台の脇で、別の実験でもしながら時々覗ける場所で計算させたい』という強い希望も有りますが、これは環境整備や手段の部類でしょう。さらに『大型コンピュータはコンピュータの専門家がいつも使っていて入り込み難い』ともいうのです。確かにコンピュータを専門とする研究者は大容量の高速計算を仕事としていますから、どんなスーパーコンピュータを持ってしても時間と勝負の仕事を仕立てて使用するでしょう。

このような風土が見えて来ると、ワークステーションを受け入れ易い状況にあると考えても良いでしょう。風土は人が造っているものですから、一朝一夕に出来上がるものではないのですが、前頁の『』のようなＱ＆Ａを重ねていると、パソコンの計算スピードでは満足できない合成化学者もひとりやふたりは出て来るから不思議です。

ワークステーションのグラフィックス機能に目を見張る者，分子モデリングソフトの機能を比較する者，ＭＭの理論や性能を調べる者，大型コンピュータ上に置いたＭＯプログラムをワークステーションに移植することを考える者，そして導入後には、化学反応を考える者，立体構造を考える者・・・人の輪が広がって来る。

上記のように風土を前提にしてワークステーションの機種を検討する、即ちニーズを優先すると、ハードとソフトの組合せはかなりの数（おそらく１０～３０？）に昇り、決断しにくいことになります。充分な時間の無い中で考えたポイントを経験を振り返ってあえて述べれば、次の様です。

① ソフトウェア　：　研究者の利用したいことをまとめてみると対応できるソフトは限られる。
化学の対象領域によってはカバー出来ないことが多いが、メーカーとニーズの様子を見よう。
独自のプログラムは移植しよう。

② ハードウェア　：　演算スピードよりもハード故障のすくなそうな設計と製造体制が窺えること。
メンテナンスサービスに安心感の得られること。
簡単なトレーニングでＯＳのモニタリング・異状診断程度が利用者側で出来るようになる（これも風土の一部）こと。

③ ネットワーク　：　異機種間のネットワーク（大型コンピュータともパソコンとの接続も）すでに実績が見られるもの。
ＥＴＨＥＲネットを中心に考えて見よう。

④ 設置場所　：　実験台の脇とはいかない！研究者が考えたり２～３人でディスカッションできるスペースに置いて、共用ながら管理者を決めよう。

定性的で曖昧な表現ではありましたが、このような形でＩＢＭの大型コンピュータのブランチでＳＵＮ４，ＴＡＩＴＡＮ３０００，ＮＥＣ９８０１数台をネットワークしています。実際に化学研究者がワークステーションのみを意識しない分散型のコンピュータ環境を実感しはじめたというのが実状です。効果は出始めていると言えるでしょう。

ワークステーションを中心とした研究開発支援システム

昭和電工（株）
工務部
河内山勝晴

1．はじめに

エレクトロニクス・バイオなど先端技術の分野での展開は目覚ましいものがあります。化学業界においても競争に勝ち抜くためにも研究開発がますます重要になってきています。研究開発とは、情報という観点から見ますと、付加価値のある情報を創造する活動と考えられます。データ・情報を迅速、的確、容易に処理できるコンピュータ環境を整備することが研究開発の効率化の必須の要件です。

2．パソコンからワークステーションへ

当社の研究所では、パソコンを用いて実験データの自動収集、磁気メディアへのデータの保存、データの整理・解析、文書作成に積極的に取り組んでおりました。研究者間の知識・情報の共有化、情報処理・伝達の生産性を向上させる要望が高まって来ましたので、ワークステーションを導入してシステムを構築することを計画しました。ワークステーションがパソコンと異なるところはマルチタスクができることです。１台のワークステーションで研究者の一連の仕事である情報収集・データ蓄積・解析・報告書作成等の作業を同時に画面に出して相互に参照しながら並行処理でき、作業性の向上が期待できます。

3．研究開発支援システム(ＤＲシステム)の概要

ワークステーションによる分散処理を基本としています。実験データの自動収集、データ解析、データベース登録・検索、報告書作成等の支援機能を統合したシステムです。電子メールなどによる研究者間の情報伝達を活性化する環境を整えるとともに、情報の共有化を実現するために質の高いデータベースを構築することを目標としています。またネットワークを通じてワークステーションから技術計算専用機を使用することが可能です。

手初めとして合成樹脂分野を対象としました。本社にセンターホストコンピュータ（富士通Ａ４００）を置き、大分研究所、川崎樹脂研究所にワークステーション（ＳＵＮ３）をローカルホストコンピュータとして設置し、イーサネットによるＬＡＮにワークステーション（Ｇ１５０）・パソコン（ＰＣ９８）・光ディスク（ＨＩＴＦＩＬＥ）を接続し、異機種接続を実現していています。各地区のＬＡＮは高速ディジタル回線でセンターホストと結合し、広域ネットワークを構成しています。ＯＳはＵＮＩＸですが操作性を考慮して、日本語表示のメニュー方式を採用しました。マルチウィンドウとしてＸウィンドウを採用しています。データベースはＡ４００およびＳＵＮ３上に構築することとし、ＤＢＭＳはＯＲＡＣＬＥを採用しています。

アプリケーションのサブシステムとしては次のものがあります。

①実験データ管理
②樹脂材料データ管理
③データ解析

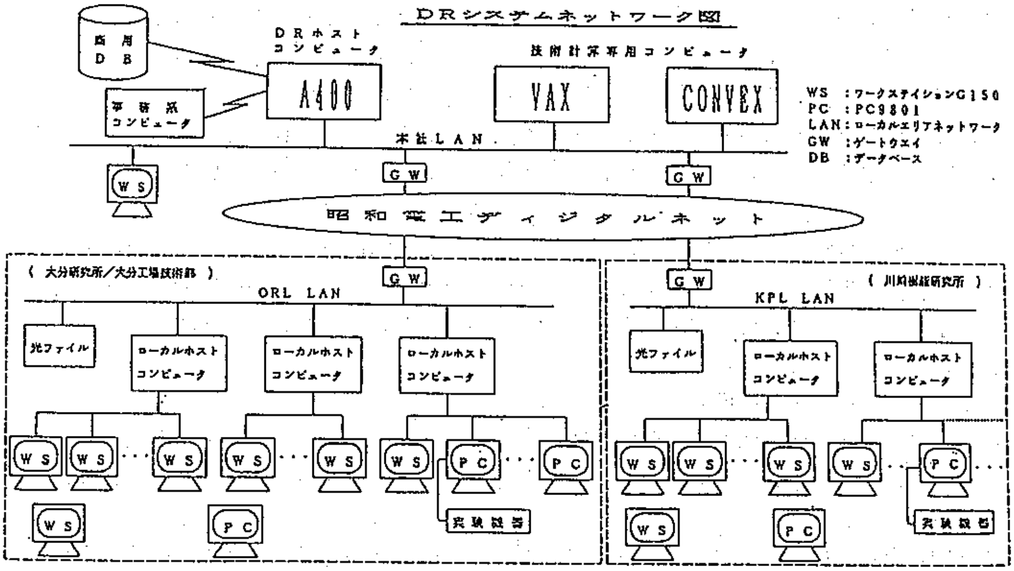
④報告書管理
⑤電子メール／掲示板
⑥商用情報接続
⑦技術文書作成・編集

実験で得られるデータをデータ処理装置からオンライン（自動収集）で、またはデータ処理装置のないものはオフライン（手入力）によりデータベースに蓄積します。蓄積されたデータは必要に応じて取り出され、解析や報告書作成に利用することができます。

ワークステーションＧ１５０のＯＡソフトウエアを利用して、文章、図表、グラフ、イメージ等を編集してマルチメディア文書を作成することができます。これにより研究報告書を効率よく作成することが出来ます。データ解析は汎用解析ソフトＲＳ／１をＳＵＮ３に移植しメニュー方式で使用します。電子メールはユーザがワークステーションで作成したマルチメディア文書を送信・受信する機能をもっています。

４．むすび

ワークステーションの分野では、高性能で低価格の機種が次々と開発されていますので、一層使い易くなってくると思います。しかしパソコンに比べますとまだアプリケーションソフトが少ないようです。ユーザーはワークステーションの上で何ができるかに関心があります。ワークステーション向けのソフトが数多く開発されれば、更にワークステーションの普及が加速されるでしょう。またユーザーの立場に立った標準化の推進が望まれます。例えば異機種結合といっても現在のところそれほど簡単ではありません。２系統あるＵＮＩＸも早く統合して欲しいものです。



研究のデスクワークをワークステーションで

住友化学工業㈱千葉研究所
柏谷　宏之

ワークステーションの魅力は、ホストオンライン処理に匹敵する処理容量の大きさの一方で、ホストオンライン処理に比べ迅速なレスポンスとパソコンにも負けない気軽な操作性を兼ね備えている点にあるのではないでしょうか。私どもは研究検討の効率化を支援するシステム化を進めており、そのためのハードウェア環境としてはワークステーションが最適であろうと考えております。

企業は今、業種を問わず、商品の多様化、差別化に加え、ますます加速される商品サイクルの短命化の時代に直面しています。高分子の世界においても、複合化、アロイ化によって、プラスチックがゴムの世界との境界に脚を踏み出したり、金属の代替を目指したり、高機能化への意気込みが盛んです。その一方では、環境汚染対策の問題に関連して、生分解性プラスチックの開発など、生物学との接点も求められるようになってきています。既存の汎用プラスチックの歴史を踏まえつつ、新しい世界の創造が求められていると言えるでしょう。過去蓄積されたデータの山から知見を探し出し、同時に異分野における情報を的確に引き出すことのできる力が求められています。

また、多様化する商品の差別化を果たすには、データ間のわずかな差を見抜くことのできる試料評価技術に加えて、それらのデータの精緻なデータ解析により特性相関を解明し、普遍的な技術として適応範囲を広げていくことが強く望まれます。さらに、時期を誤らない迅速さ（高速性）も兼ね備える必要があります。

ところで、企業における研究者のデスクワークの主な作業要素としては、調査、データ処理、資料作成の３つが挙げられます。それらの中でも、資料作成がかなりの比重を占めているのが実状です。企業活動の原点として、「より早く答を出す」ことが求められるわけですが、資料作成の勢い余って、調査の質やデータ解析の質が切り落とされてしまっている例を何度か耳にします。もちろん、調査やデータ解析の効率化が望まれるのはもちろんですが、本来的に必要悪である資料作成はできるだけ簡便にできなければならないと思います。

これらの、分野を越えた広範な情報活用、効率的な評価技術、高度なデータ解析能力、簡易な資料作成手段を研究者の日常作業において実現することが研究開発を飛躍させる大きな鍵になっているのではないでしょうか。そのために欠かせないシステム機能として次のようなものが考えられます。

①統合的データベースの構築と検索
これまでの研究事例に関する書誌的情報、ネガティブデータも含めたファクト情報、そして研究成果としての図表を、分野を越えて統合したデータベースの構築と簡易な検索操作

②簡便なデータ解析
試行錯誤を容易にする簡便なグラフ作成やそれらの統計的処理による知見の普遍化を可能にし、さらに研究者独自の解析手法の組込みや３次元クロマトグラフの解析も可能にする。

③資料作成編集
資料のワープロ（電子）化の是非については議論のあるところかと思われますが、編集の簡便さ、転用活用の拡大など研究開発においても欠かせないものになっています。実際の資料においては、グラフだけにとどまらず写真といった多様なイメージ資料の切り貼りもしており、種々のメディアの統合編集が望まれます。
④統合的作業環境
研究者が机の上にファイルやデータシート、計算機を広げて作業しているように、ディスプレー上でデータ解析しながら足りないデータをその都度検索し追加したり、解析データの一部を切りとってコピーするなどができるように、全ての機能が自在かつ重ねて呼び出せるようにしなければなりません。また、研究の経過と共に実験項目が増えたり、条件を変えながら繰り返し測定したりする事が多々ありますが、作業途中でも環境や定義情報の変えられるものであるべきです。

構想の実現に向かって、順次取り組んできましたが、パソコン上での試みは処理能力不足に阻まれてきました。機能的に実現したもののレスポンスが大幅に低下してしまい、また、統合化やマルチメディア化は技術的な面においても多大な困難を伴っています。こうした困難を解決しうるのはワークステーションにおいて他はないと考えています。

しかし、高度のパフォーマンスが得られるとは言え、問題がないわけではありません。従来の特定業務のシステム化としてのワークステーションの導入と違い、研究者の日常的な支援ツールとする点において、１つに価格、２つに運用管理の問題を挙げたいと思います。もっとも価格については最近低廉化に拍車がかかってきたようにも思われ、大いにメーカーの努力に期待するところですが、運用管理については専門知識なしに行うのはかなり困難なのではないでしょうか。情報を共有する上でセキュリティが欠かせないのは理解できるものの、化学研究者にとって負担にならないパソコン並の簡素化を切に望みます。

三菱化成(株)総合研究所における EWS の利用

三菱化成(株)総合研究所
システム数理研究室
佐藤 信行

1 はじめに

三菱化成(株)総合研究所は、約1000人の研究者を抱える当社の研究開発の中心である。その研究分野は機能材や医農薬開発まで多岐にわたっており、計算機の利用に関しても、分子科学計算や CAE などのスーパーコンピュータを利用する大規模なものから、パソコンによるワープロや実験データ処理などの小規模なものまで様々である。

2 EWS の利用形態

当研究所における EWS の利用形態をまとめると

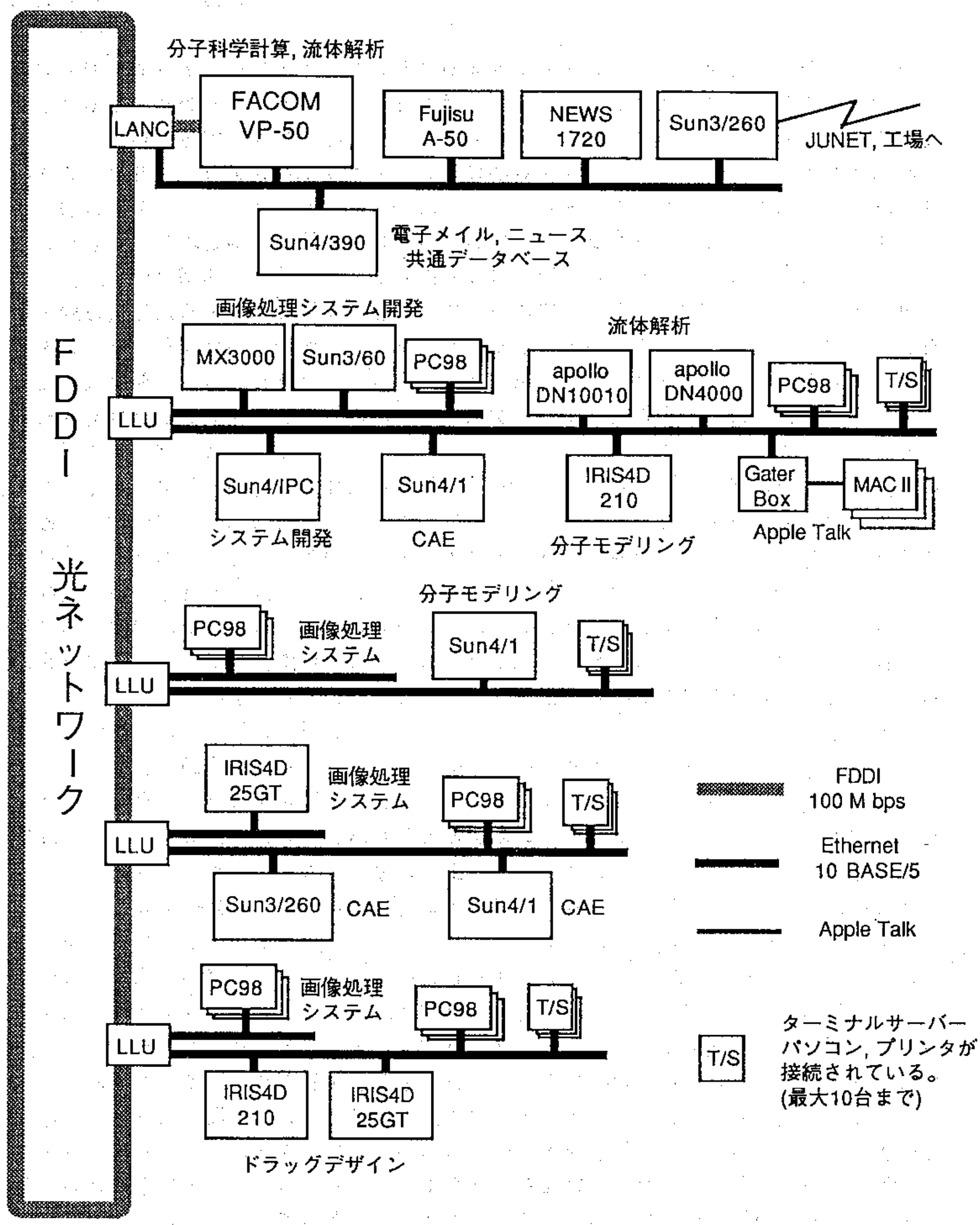
1. 高性能グラフィックスを利用した分子科学計算、CAE のプリポスト処理。
2. 小規模計算、実験データ処理。
3. 報告書作成、プレゼンテーション資料作成。
4. 電子メイル・電子ニュースなどのコミュニケーション。

などがある。1 に関しては、EWS で行なうことにより従来では考えられなかったような複雑なモデリングが可能になり、また結果も容易に視覚化することができるようになり、スーパーコンピュータを一層効果的に使用できるようになった。2 に関しては、EWS の OS である UNIX が MS-DOS に近いため、これまでパソコンで処理を行なっていた利用者が容易に移行できるようである。また実験データ処理はデータベース構築に発展しつつある。3 に関しては EWS 上の DTP システムだけでなく、TEX という優れた組版システムがパソコン端末で気軽に利用できるため着実に利用者を増やしている。4 に関しては日本の広域ネットワークである JUNET のシステムを所内でもそのまま利用しており、社内外との連絡に非常に良く使われている。

3 今後の展開

EWS および LAN の導入は、所内に多数導入されていたパソコンを結合し利用者を拡大させた(現時点でパソコン端末は 150 台、登録ユーザーは 700 人を越えている。)という点で非常な成功を治めた。コンピュータに不慣れな利用者でも電子メイルなどの利用などから始め、徐々に高度な利用を始めている。10月末には、利用の拡大に対応するため FDDI 規格の光 LAN を導入し、ネットワークは所内全域に広がった。低価格 EWS の登場や X-window などの標準化は、EWS の本格的導入の環境を整えつつあり、近い将来研究者の大半が EWS を利用するようになると予想している。

三菱化成総合研究所 LAN



コンピューターシステムの進歩の中のワークステーション

山之内製薬（株）中央研究所 第二探索研究所
分子設計室　　古谷 利夫

ワークステーション（ここではＩＲＩＳ４Ｄ／２２０ＧＴＸ）をドラッグデザインのための道具として現在使用し、また、２０年近く種々のコンピューターのハードやソフトを利用してきた立場から、ワークステーションについて感想を述べてみたい。

私のこれまでのハードウエアの使用経験はＩＢＭ１１３０に始まり、ＩＢＭ３６０、３７０、日立Ｍ１６０、ＶＡＸ７８０、μ-ＶＡＸ-II&ＰＳ３９０、そして、冒頭のＩＲＩＳである。ＶＡＸ７８０までは、いわゆるシステム屋さんが管理していたが、μ-ＶＡＸ-IIとＩＲＩＳは手元において自ら管理している。現在の利用目的は一言でいえば、ドラッグデザインである。過去においては、分子軌道計算やＸ線結晶構造解析の計算でいずれも大規模な計算であった。しかも、計算の後処理も手間がかかり、膨大なアウトプットから、必要な情報を取り出す作業があった。プログラムを一部手直しして、自分の欲しい情報だけをまとめるような事はしたものの、グラフ化することはできなかった。私のようなプログラミングの素人にとっては、グラフィックスのプログラミングは難しく、また、移植性も悪いためである。分子模型に変わるものとして、ディスプレイ上で３次元的に分子を見ることができるシステムとして、1985年にμ-ＶＡＸ-II&ＰＳ３９０を導入した。この組み合せは、ＩＲＩＳと類似の機能を持っており、コンポーネント型のワークステーションとも、ワークステーションの前身とも言えるのではないだろうか。それはともかく、分子模型を手にしているかのように、目の前で対話的に分子を構築し、思いどうりに分子を眺めることができたことは画期的であった。視覚的に見えることがどれほど様々な思考を掻き立ててくれるかと思ったものである。

さて、本題のワークステーションを導入したのは、それから３年後の1988年である。計算が速くてグラフィックスの性能が良く、使いたいソフトウエアが動き、既存のシステムとの通信ができれば良かった。ワークステーションを導入するという意識はなかった。実際のところ、ワークステーションの定義はと聞かれても私には分からない。事務屋さんが書類を作る際に、文字とグラフをうまく編集し、奇麗にアウトプットできるものぐらいに思っていた。最近になって、業界の専門誌を見てＳＧＩ社のＩＲＩＳはワークステーションの一つだと知ったのである。ＩＲＩＳ４Ｄ／２２０ＧＴＸを従来使っていたシステムであるμ-ＶＡＸ-II&ＰＳ３９０と比べると、格段に良い。比較の対象とすること自体が間違っているくらいである。計算速度およびグラフィックスの表示速度は速く、また、表示機能は多彩である。（プログラムの作り方も勿論関係しているが。）ＶＭＳとＵＮＩＸというＯＳの違いもあるのだろうが、ＩＲＩＳ１台でＶＡＸの端末数台の働きをしてくれる。タンパク質のような高分子を扱っていると従来のシステムとの差はさらに大きく感じる。計算、表示速度とも速い。とても従来のシステムを使う気になれない。いま、予算があれば、躊躇なくＩＲＩＳを導入する。”いま”とことわったのは、この業界の進歩は速いからであるが、１ユーザーとして、ワークステーションなるものが過去のものとなる時にはどのようなものが登場してくるのか楽しみである。

メーカーの視点から

ワークステーションとグラフィックス

旭化成情報システム株式会社

0．はじめに

ワークステーションはグラフィックス機能を備えることにより、研究者、技術者の身近な道具としての地位を確保しつつあるように思われます。 その背景をいくつかのキーワードとともに、簡単に考察してみます。

1．サイエンティフィック・ビジュアライゼーション

「新たな発見と理解のための道具」として、また「コミュニケーションと教えるための道具」として、グラフィックスは、科学技術分野のコンピュータアプリケーションの中で、大いに注目され利用されています。

コンピュータによる計算結果を、数字の羅列ではなく、もっと我々に直感的で理解し易い形にして見せてくれる技術がサイエンティフィック・ビジュアライゼーションです。

最近のワークステーションは、MIPSあるいはMFLOPSといった数値計算性能に加え、ベクター／秒、ポリゴン／秒、何万色表示可能といったグラフィック性能を必ずカタログに載せています。 さらに、グラフィックスを身近な、誰でも容易に利用できる技術とするための、便利なソフトウェア（グラフィック・インターフェース）も各種発表されています。

計算化学の分野でも、分子の構造をわかりやすい形（例えばball and stick）で３次元表示したり、分子を構成する各原子の動きをアニメーションによって動画表示したりして、研究者の理解を深めたり、説明をし易くするために、サイエンティフィック・ビジュアライゼーションが使われています。

2．グラフィック・スーパーコンピュータ

計算化学のアプリケーションは膨大な計算量を必要とします。 その結果のビシュアル化のためには高機能・高性能のグラフィックス機構が必要となります。

従来は、スーパーコンピュータとグラフィック端末の組み合わせでしか実行できなかった計算と結果のグラフィック表示が、グラフィック・ワークステーションの実現により、研究者、技術者の手元で身近に行えるようになりました。

それ等グラフィック・ワークステーションの頂点に位置するのがグラフィック・スーパーコンピュータです。

グラフィック・スーパーコンピュータＴＩＴＡＮシリーズの場合、パラレル計算機能ベクター計算機能により最高128MIPS 、128MFLOPS の数値計算能力を持つとともに、斯界最高機能、最高性能の３次元グラフィックスを備えています。 グラフィックソフトウェアについては、利用者が特別なプログラムを組まなくても、計算結果をビジュアライズすることが可能なグラフィック・インターフェース、ＡＶＳ（Application Visualization system）があります。

3．グラフィック・ワークステーションとネットワーク

ワークステーションは研究者、技術者が１人１台ずつ使用するのを原則とするので、他の研究者、技術者との情報交換、大規模計算のためのスーパーコンピュータの利用、データベースの利用などのために、.通信の機能は不可欠となります。

一方1990年代はグラフィックのの利用が一般化し、ビジュアライゼーションの時代が来るとも言われています。　グラフィック情報は通常の文字・数値情報に比べ、情報量が飛躍的に多く、現在一般に使われているEthernetのLAN ではたちまち能力不足になります。。

米国のロスアラモス研究所、ローレンスリバモア研究所、National Center of Super-computing Research、NASA Ames 研究所、海軍研究所などでは、ビジュアライゼーション時代のコンピュータ、ワークステーション、ネットワークのあるべき姿について、「視覚によるコミュニケーション」、「インタラクティブ・ビジュアルコンピューティング」の実現を目標に、プロジェクトを作って研究をしていると言われています。

4．おわりに

コンピュータの能力を研究開発に利用するための道具として、ワークステーションは我々に新たな１ページを開いてくれました。

Down sizing 、Open system 、Cliant-server computing など、いずれもワークステーションと関わりのあるキーワードが、コンピュータメーカーからも聞かれコンピュータ関連誌にも毎号現れています。　ここ当分はワークステーションの時代が続きそうです。

ワークステーションはその名の通り研究者、技術者がそこで仕事をする場所であるわけです。　必要な研究設備、実験設備を工夫したように、どのようなワークステーションが自分にとって望ましいのか、メーカーに任せきりにするのではなく、自分で考えてみることも必要ではないでしょうか。

参考文献

（１）　特集　ビジュアライゼーション
日経エレクトロニクス　1989 3-6
（２）　“ビジュアライゼーション”　90年代へのインパクト
中前栄八郎
PIXEL No.96 pp.157-165
（３）　Scientific Visualization
IEEE COMPUTER　August 1989

連絡先：〒100 東京都千代田区内幸町1-1-1 インペリアルタワー17F/C-3
旭化成情報システム㈱　第四事業部マーケティング部　☎03(507)2316

ＣＣＳ分野におけるワークステーションの利用

ダイキン工業株式会社
電子機器事業部企画部
杉　水　孝　次

＜ワークステーションの利用価値＞

近年、コンピューター市場の中で、ワークステーションの利用範囲が急速に拡大化している。この背景には、ワークステーションの性能、機能、価格等が各ユーザに注目され始めたのが大きな要因として挙げられる。

特に、ＣＣＳ分野でのコンピュータ利用は分子設計のシュミレーションにより急激に普及し始めてきており、分子設計のシュミレーションの大きな目的は化合物の活性や物性をあらかじめ予測することにより、研究者の研究プロセスを効率よく進めることにある。

このように分子設計のシュミレーションを実行する環境として、近年、汎用機並の計算能力を装備した３次元グラフィックワークステーションが出現したことにより、研究者はホストコンピューターのさまざまな制約から解放され、効率よく利用できるパーソナル環境を構築できるようになった。そして、研究プロセスの中では即時の計算結果や精度の高いデータを基にビジュアル化が行えるため、３次元グラフィックワークステーションの利用価値がでてきている。

また、もう一つの大きい要因としてはワークステーションの低価格化に伴ない、研究室単位での導入が可能となり、さらには理想的な環境を提供できるようにワークステーションのもつネットワーク機能を活用し共通のデータベースを部門間で利用できることがあげられる。

＜ワークステーションの需要動向＞

従来よりＣＣＳ分野においては先進的な医薬・農薬・食品分野の企業を中心としてワークステーションの導入が始まり、現在では一企業の中で複数システムの導入が顕在化している。また、新しい傾向としては素材分野の企業にも新規導入が進んでおり、ＣＣＳ分野における需要は継続的に増加していくと思われる。

また、今後のワークステーションに対するニーズはユーザの利用目的により、ハイエンド傾向とローエンド傾向に２分化されていくだろうと考えられる。これにより、ワークステーションは汎用機とパソコンのマーケットまで幅広くカバーしていくものと予想される。

＜ワークステーションの性能、機能＞

ワークステーションのＣＰＵプロセッサはＲＩＳＣチップの利用により２０ＭＩＰＳ以上の性能が実現してきており、上位機種ではマルチＣＰＵ対応で１００ＭＩＰＳ以上の性能をもっている。また、グラフィックスは表示速度の向上によりリアルタイムな表示が可能となった。これにより、ＣＣＳ分野では分子の構造や動的性質の研究に必要とされている分子力学（ＭＭ）や分子動力学（ＭＤ）などの膨大なデータ量の計算もある程度ワークステーションレベルでも対応が可能となってきている。そして、計算結果のビジュアル化も強力なグラフィック性能によりスムーズに実行できる。

この実行環境を実現するために、ワークステーションはハードウェアの機能強化として、ＣＰＵメモリーやディスク容量の拡張を図り、実際のユーザ業務に最適な環境を提供している。

連絡先　　〒１６３　東京都新宿区西新宿２－６－１　新宿住友ビル　３０Ｆ
TEL 03-344-8118

ＩＢＭ　ＲＩＳＣシステム／６０００ファミリー（ＰＯＷＥＲステーション）

日本ＩＢＭ株式会社
東京ＮＩＣセンター
野村宣生

ＩＢＭ　ＲＩＳＣシステム／６０００（ＰＯＷＥＲステーション）は、ＲＩＳＣ（Ｒｅｄｕｃｅｄ　Ｉｎｓｔｒｕｃｔｉｏｎ　Ｓｅｔ　Ｃｏｍｐｕｔｅｒ：縮小命令セット・コンピューター）テクノロジーに改良を重ね、高度な最適化を加えたＰＯＷＥＲ（Ｐｅｒｆｏｒｍａｎｃｅ　Ｏｐｔｉｍｉｚａｔｉｏｎ　Ｗｉｔｈ　Ｅｎｈａｎｃｅｄ　ＲＩＳＣ）アーキテクチャーと呼ぶ、新世代のＲＩＳＣ設計思想に基づいて開発された高性能ワークステーションです。
ＰＯＷＥＲステーションは以下のハードウェアとしての特長を有しています。

－高速な演算処理装置
　－最大４種類の命令の同時実行（スーパー・スカラー）
　－固定小数点乗除算の命令化
　－３２個の３２ビット汎用レジスター
　－浮動小数点演算プロセッサーの一体化
　－１サイクル毎の６４ビット浮動小数点演算命令（乗・加算命令）の実行
　－３２個の６４ビット浮動小数点レジスター
－広い仮想アドレス空間（２＊＊５２バイト　－－　４ペタ・バイト）
－最大２５６メガ・バイトの主記憶装置
－各種グラフィック・アダプターのサポート
－ストリーミング・データ転送方式によるＭｉｃｒｏ　Ｃｈａｎｎｅｌ＊経由の
　Ｉ／Ｏデバイス・サポート（最大４０メガバイト／秒）

このためＰＯＷＥＲステーションはマシン・クロックの速さに比べて非常に高速な処理を行います。　表－１は固定小数点演算（ＤＨＲＹＳＴＯＮＥ）及び浮動小数点演算（ＬＩＮＰＡＣＫ　１００＊１００　Ｄｏｕｂｌｅ　Ｐｒｅｃｉｓｉｏｎ）ベンチマークの結果です。　ＤＨＲＹＳＴＯＮＥ値、ＬＩＮＰＡＣＫ値とも値が高いほど高速に処理されたことを示します。　このようにＰＯＷＥＲステーションは大型計算機並の演算処理能力を有しながら、非常に経済的な価格が設定されているのも大きな特長です。

ＰＯＷＥＲステーションは、卓上型からラック・マウント型までの６種類のシステム装置（３２０－－卓上型、５２０／５３０／５４０－－床置き型、７３０－－床置き型スーパーグラフィック、９３０－－ラック・マウント型）で構成されています。　又、Ｘステーション１２０と組み合わせることにより、複数ユーザーでのシステム環境を作成できます。

＊はＩＢＭ　Ｃｏｒｐ．（米国）の商標です。

ＰＯＷＥＲステーションは、オペレーティング・システムとして日本語版および英語版のＡＩＸ* バージョン３を採用しています。 ＡＩＸバージョン３は、ＵＮＩＸ（**1）の国際標準に準拠し、さらに日本語サポート、ディスク・スペース管理，リアルタイム処理、仮想記憶域管理の拡張などをはじめ、さまざまな機能拡張を行っています。 ユーザー・インターフェイスとして、Ｘ−Ｗｉｎｄｏｗ Ｖ１１．３をベースにＯＳＦ（オープン・ソフトウェア財団）のＯＳＦ／Ｍｏｔｉｆ（**3）を取り入れたＡＩＸＷＩＮＤＯＷＳ*／６０００をサポートします。 コンパイラーとしては、Ｃ、ＦＯＲＴＲＡＮ、ＰＡＳＣＡＬ、ＣＯＢＯＬがサポートされています。 ＰＯＷＥＲステーションは科学・技術計算の分野にとどまらず、企業全体の情報システムの重要な構成要素として活用することも容易に可能となります。 ＩＢＭから提供されるアプリケーションに加えて、ソフトウェア各社より多数のアプリケーションが提供され、ＰＯＷＥＲステーションでご利用いただける予定です。

（**1）ＡＴ＆Ｔ社の開発・許諾製品
（**2）ＯＳＦ Ｉｎｃ．の商標

＜表−１＞

	DHRYSTONE値 (K／秒)	LINPACK値 (Megaflops)
ＰＳ／２* モデル８０ (８０３８６／３８７ ５０ナノ秒)	７．５	０．１６
ＰＯＷＥＲステーション３２０ ＰＯＷＥＲステーション５２０ (５０ナノ秒)	４８	７．４
ＰＳ／２モデル７０−４８６ (８０４８６ ４０ナノ秒)	２２．７	０．９４
ＰＯＷＥＲステーション５３０ ＰＯＷＥＲステーション７３０ ＰＯＷＥＲステーション９３０ (４０ナノ秒)	６０	１０．９
ＰＯＷＥＲステーション５４０ (３３ナノ秒)	７２	１３．０
ＩＢＭ ＥＳ／３０９０−１８０Ｊ (１４．５ナノ秒)		１０．０
ＩＢＭ ＥＳ／３０９０−１８０Ｊ ＶＦ (１４．５ナノ秒)		１６．０

連絡先：〒104 東京都中央区築地7-18-24　日本アイ・ビー・エム㈱ 東京ＮＩＣセンター
☎03(546)4279

FUJI XEROX ネットワーク・ワークステーションのご紹介

富士ゼロックス株式会社
ワークステーション事業部
吾 妻 和 泉

1. はじめに

現在、研究開発業務におけるコンピューター化は加速度的に進んでいると言っても過言ではないといえます。それは、コンピューター技術の発達により、コストの低下、筐体の小型化、処理スピードの向上等が実際のものとなったからです。そのことにより従来は大型汎用機でのみ処理されていたもの、あるいは大型汎用機でしか処理出来なかったものが、業務内容、研究内容等それぞれの目的に合わせた形で専門化されスーパーコンピューター、ミニコン、そしてエンジニアリングワークステーションへと分散させることを可能にしたわけです。これにより、システムそのものの柔軟性は高くなりソフトウエア開発を含めエンドユーザーによって手を加えることも、システムを拡張することも比較的簡単に実施出来るようになりました。さらにLANの構築により生産性は飛躍的に向上しているのです。

2.さらなる効率化

しかし、LANの構築により全ての問題点を解決したかというとそうではなく、物理的なネットワークはあっても作業を共有化するネットワークは確立しておらず、さらに依然として取り残されているのがユーザーインターフェースの向上と研究開発業務の最終工程であり、最も重要である結果報告、つまりドキュメンテーション効率化/標準化の部分です。システムの分散化、専門化により、ユーザーは様々な機械の操作を修得する必要が発生し、またドキュメントに集約する工程においては従来に比べ逆に工数が増加すると言った現象につながっているのです。

3.問題解決へのアプローチ

私ども富士ゼロックスは、前述しました問題を解決するためにイーサネット技術の開発と同時に情報の統合化、一元化を目指し8000INS総合ネットワークシステム及びワークステーションの先駆けとして1982年にJ-STARを市場導入いたしました。J-Starは17インチという大型のビットマップディスプレイ、ポインティングデバイスとしてマウスを採用、アイコン、マルチウインドウと画期的なLANワークステーションとして初めて世に出ました。当初は、ネットワーク上の各種サーバー、電子メール等を利用頂きドキュメントデーターベースの構築、LAN間接続、あるいはドキュメントプロセッシングとして版下作成などの分野でご導入を頂きました。当時はホストコンピューターのネットワークが中心であり、エミュレーターを中心に情報の一元化を実現してまいりました。これにより、ドキュメントは紙でしか残らずデーターはコンピューターとワープロ、図表に関しては手書きの原図といった多重管理を一元化することを実現しドキュメントデーターベースの構築を可能にしたわけです。

しかし、コンピューター技術の発達はめまぐるしく、カラー化、グラフィックへの対応、そして通信プロトコルの発達とUNIXの統合に見られるようにOSの標準化など世界的なうごきになってきております。さらに、エンドユーザーは前述いたしましたように各種情報が種々のコンピューターに分散管理されていることにより、最終成果物としてのドキュメントの作成、及びその管理に無用の工数がさかれるような状況になってまいりました。

そこで、私どもではこの解決策としてTCP/IPゲートウエイの開発などネットワークへの対応に合わせ、MDI(Multi-object Multi-lingual Document Intermediary)といった文書交換用フォーマットを開発、他社マシンで生成される文書情報(文字、グラフ、図形等)とJ-SATR文書とのデーター交換を可能にいたしました。生成されるマシンがホストコンピューターからミニコンそしてエンジニアリングワークステーション等多岐に渡ってもこのMDIフォーマットとイーサネット技術を利用することによりJ-Starワークステーション上で、統合的に同一の操作性のもとでドキュメンテーションが可能になりました。

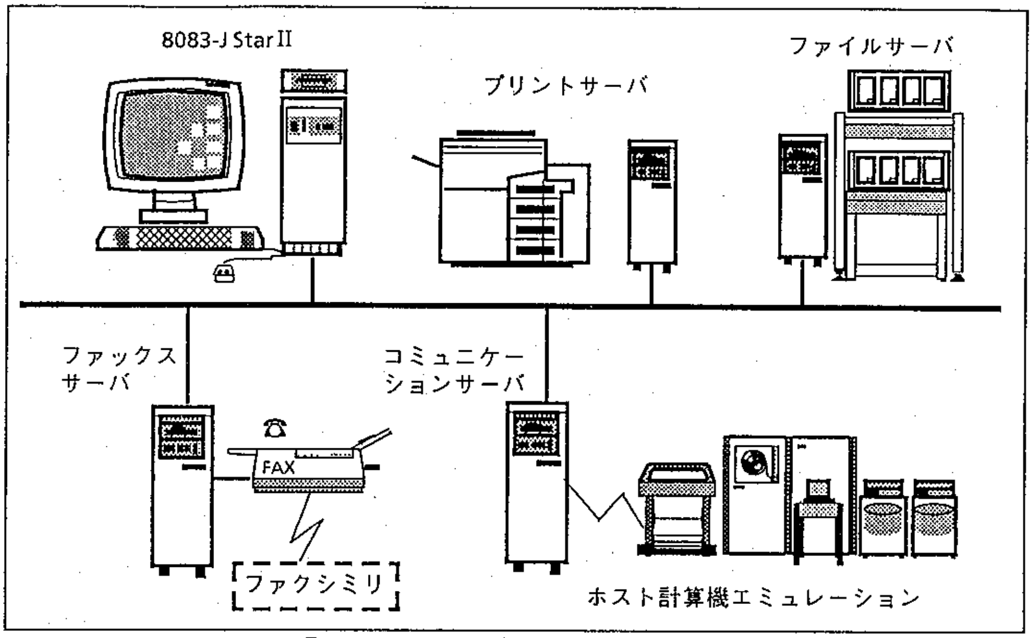


図1. 8000INSおよび8083-J Star IIの構成

さて、弊社でとらえるワークステーションの今後としてJ-Starワークステーションのドキュメント処理、およびユーザーインターフェースを100%継承したうえで、よりエンジニアリングワークステーションとしてご利用範囲をひろげていただく為に、J-StarソフトウエアのUNIXワークステーションへの移植、高速プロセッサの採用を計画しております。これにより、ユーザーにさらに統合化された環境とともに開発環境の提供を実現したいと考えております。

参考文献

(1) 「J-Starワークステーション」　丸善ワークステーションシリーズ(1986.4)

(2) 「ローカルエリアネットワーク」　丸善ワークステーションシリーズ(1986.4)

連絡先　〒339 岩槻市府内3-7-1

富士ゼロックス株式会社　ワークステーション事業部計画部(☎048-798-5111)

部会行事

第2回ケモメトリックス・ワークショップ

主催　日本化学会情報化学部会　協賛　日本化学会、日本分析化学会

日時　２月１５日（金）　１３時～１７時

会場　豊橋技術科学大学　語学センター大講義室

参加申込締切　１月３１日（木）

内容　ケモメトリックスは数学、統計学、情報理論、コンピュータ科学などの各種手法を総合的に組み合せて活用する新しい化学の領域です。今回は化学パターン認識、実験計画、生理活性物質の設計等のテーマを中心にしたワークショップを企画しました。

講演

１．　挨拶　（豊橋技科大）佐々木慎一

２．　化学パターン認識と計量化学　（豊橋技科大）宮下芳勝

３．　機器分析データのパターン認識による食品の客観的な識別、評価　（キッコーマン）相島鐵郎

４．　タンパク質の高次構造予測へのパターン認識の応用　（豊橋技科大）高橋由雅

５．　実験デザインと最適化問題のための新しい計量化学的アプローチ　（住友化学）勝見広幸

６．　医農薬の分子設計における統計的手法の利用　（塩野義製薬）山川真透

懇親会　１７時１０分～１８時３０分　談話室　（会費２０００円）

参加費　無料

参加申込方法　葉書またはＦＡＸで「第２回ケモメトリックス・ワークショップ」参加申込と題記し①氏名、②所属、③連絡先（郵便番号、電話も）、④懇親会参加・不参加を明記のうえ下記あてにお申し込み下さい。

申込先 441 豊橋市天伯町字雲雀ケ丘1-1　豊橋技術科学大学　知識情報工学系　宮下芳勝(電話 (0532) 47-0111, FAX(0532) 45-0480)

国内の動き

最新コンピューターケミストリーシステム一覧 (平成２年10月現在)

＊この表は平成２年10月16日（火）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	ソフト価格	出荷年月	販売実績
ACACS	日本電気	日本電気、住友化学工業	データベースから３次元グラフィックス、理論計算までの統合型分子設計支援システム	ACOS－4系	6,500万円	85年12月	
BIOCES	〃	日本電気、住友化学工業、キッセイ薬品工業など	未知のたん白質のモデリングと、ACACSと連動した薬物ー受容体の相関研究が可能	〃	2,000万円	86年10月	
BIOCES(E)	〃	〃	薬物ー受容体理論にもとづくたん白工学と医農薬設計のコンピューター支援システム。EWS4800シリーズと３次元グラフィックス端末（PS390）をイーサネット接続、安価なシステム構築可能	EWS4800シリーズ＋PS390（E＆S社）	1,000万～1,600万円	89年２月	
AMOSS	〃	日本電気	非経験分子軌道計算に基づく汎用計算化学システム。スーパーコンピューターSXシリーズに最適なアルゴリズムの採用により超高速性能を有し、100原子以上の分子の物理化学的性質を解析、予測可能	SX-Aシリーズ ３次元ディスプレーN6975	月間レンタル50万円	90年９月	
ACACS(E)	〃	日本電気	医農薬設計や材料科学研究を支援する分子設計システム。３つのシステムから構成されており、分子モデリング、分子形状比較解析、エネルギー状態表示の機能をEWS4800シリーズ上でマルチウィンドウにより提供する	EWS4800シリーズ	150万～500万円	90年５月	
micro-RESEARCHER	〃	〃	実験データの管理、加工、技術から研究レポート作成まで一貫処理する	PC－9801シリーズ N5200シリーズ	35万円 35万円	86年７月 85年４月	} 約1,000本
micro-RESEARCHERⅡ	〃	〃	分析試験室での実験データの管理から加工、解析さらにレポート作成までの一連の処理を行う研究開発支援システム。UNIX上のマルチウィンドウ機能を利用して、大幅な操作性の改善を実現	EWS4800シリーズ	75万～150万円	89年10月	
ANCHOR	富士通	富士通、呉羽化学工業	理論化学計算をベースにした分子設計支援システム	FACOM VP、M、Aシリーズ、Sファミリ、	800万～ 2,900万円	86年６月 89年10月	
MACCSⅡ	〃	米モレキュラーデザイン	分子情報データベースシステム。オプションでMACCS-3D（３次元構造検索）が利用可能	FACOM VP、M、Aシリーズ	2,500万円～	83年11月	
REACCS	〃	〃	反応情報データベースシステム。目的別に６種、合計13万件以上の反応データベースをサポート	〃	1,600万円～	85年５月	
ADAPT	〃	〃	構造活性相関（QSAR）研究支援システム	〃	840万円～	86年７月	
CHEMTERM/MM-MO	〃	富士通	ANCHORの機能をパソコンに凝縮した分子設計支援システムの入門ソフト	FMR－60、70	30万円	89年11月	
G³term/FM	〃	富士通ビーエスシー	パソコンをANCHOR、MACCSなどの端末として利用するエミュレーションソフト	FMR-30,50,60,70	25万円	89年10月	
MOLBESS-F	富士通、富士ファコム制御	富士通、富士ファコム制御	分子生物学実験支援システム、DNA情報の解析や遺伝子組換実験のシミュレーション	FMR-60,70	180万円	89年11月	
KAMELO	富士通	富士通	スプレットシート型で化学構造式を容易に扱える化学研究者向けOAツール	Sファミリ（SUN）	300万円	91年４月	
MODELMATE ホスト形	日立製作所	日立製作所、クラレ	汎用型分子設計支援システム。高度なデータベースを利用してあらゆる材料設計に対応。データベースの構築から解析、評価まで一貫した処理ができる	HITAC Sシリーズ M－640以上のMシリーズ2050G、2050/32ワークステーション	約2,000万円～	87年12月	13システム
EWS形	〃	〃	３次元グラフィクスのEWSと大型ホストコンピューターと組み合わせる事により、分散処理システムの構築が実現できる	2050Gシリーズ	800万円	89年３月	48システム
MolWorld	日本アイ・ビー・エム	日本アイ・ビー・エム	３次元分子構造作成プログラム。化学式などの入力で立体構造を自動生成し、ディスプレー上で分子モデルの操作・加工できる	PS/55シリーズ	８万円	87年11月	
MDSS	〃	〃	分子の立体構造を中心とした化合物情報を効率よく生成・解析・管理する分子設計支援システム	IBM3090、308X、438X、9370シリーズ	2,780万円	85年11月	

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
MOL-GRAPH/MF 〃 MA 〃 BA 〃 FA	ダイキン工業	ダイキン工業	低分子、素材、合成高分子、生体高分子解析にパッケージ化したシステムを提供。エントリーから総合的な解析までニーズ別に選択可能	COMTEC 4Dシリーズ、IRIS-4D/GTシリーズ、VAXシリーズ、FACOM、IBM、HITACの汎用コンピューター	700万円～	87年7月	
UNICHEM	日本クレイ	米クレイ・リサーチ	クレイ・スーパーコンピューターの演算パワーとワークステーションのグラフィック機能を一体化した分子設計総合支援システム	クレイ+IRIS	13万ドル	90年12月	
INTERMOL	分子	分子	QSAR、分子軌道法、分子力場法および分子動力学法を背景とした汎用型理論分子設計支援システム。酵素阻害剤、プロテイン、非線形物質、液晶などの設計に最適。対話型3次元グラフィックスによるソリッドモデリングや電子軌道表示のリアルタイム操作を実現	SUNシリーズ、HP Apollo9000シリーズ、DG、PRIME、VAX、IBM、Apollo DN 10000	600万～2,000万円	87年7月	
CHEM−X	理経	英ケミカルデザイン	有機低分子から生体高分子、ポリマー等まで対応出来る汎用型分子設計支援システム。扱い可能な原子、分子、ボンドの数に制限がなく、各種エネルギー計算と表示機能に優れる	VAXシリーズ、PS300、MAC、IRIS−4Dシリーズ	1,100万円～	86年3月	
BIOGRAF	〃	米バイオデザイン	生体高分子を主とし、分子動力学計算による分子設計支援システム。たん白の一部や核酸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非常に便利	VAXシリーズ、SUN−3,4、ALLIANT FXシリーズ、IRIS 4D、IBM−POWERステーション	750万円～	86年2月	
POLYGRAF	〃	〃	ポリマー、アモルファス、結晶性物質等の合成高分子設計支援システム。分子動力学計算及び計算結果のアニメーション解析も可能	〃	750万円～		
MACCS−II	シーティーシー・ラボラトリーシステムズ	米モレキュラーデザイン	統合化合物情報管理システム	ホスト…VAXおよびIBM ディスプレー…テクトロニクス、PC−9801	2,200万円～ソフト価格で大幅に異なる	85年7月	
REACCS	〃	〃	反応情報データベース管理システム				
CHEMLAB−II	〃	〃	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				
ADAPT	〃	〃	構造活性解析システム。自動的に3次元配座計算。パターン認識によるQSAR				
MM2/MMP2	〃	〃	代表的分子力学プログラム				
CHEMBASE	〃	〃	パソコン用化合物及び反応情報データ管理システム	IBM PC及び互換機	100万円	88年10月	
CHEMTEXT	〃	〃	パソコン用化学研究用ワープロソフト	〃	40万円	〃	
CHEMTALK	〃	〃	パソコン用MACCS、REACCSなどの端末エミュレーション	〃	27万円	〃	
IGSUITE	〃	米インテリジェネティック	遺伝子情報解析システム。ワークステーションはミニコンベースの高機能が特徴	VAXシリーズ、SUNシリーズ	約600万円～(ソフト価格)	85年1月	
RS/1	〃	米BBN	研究実験データの管理、解析システム	〃		86年4月	
CHARMm	〃	米ポリジェン	分子動力学法を用いたたん白用分子設計支援システム	IRIS−シリーズ、クレイ、ステラ、コンベックス	2,600万円～(ハード含むシステム価格)	87年3月	
X-PLOR	〃	〃	結晶構造解析支援システム	〃		88年2月	
QUANTA	〃	〃	3次元表示グラフィックソフト	IRISシリーズ、ステラシリーズ		87年3月	
BioGraf	クボタコンピュータ	米バイオデザイン	低分子、たん白、DNA、炭水化物、脂質について専用ビルダーを持つ表示&解析一体型の分子設計システム。グラフィックスーパーコンピューターTITANとの組み合わせで、計算&表示のリアルタイムなシミュレーション環境を提供する。その他各種データベース、QCPEプログラムへのインターフェイスを完備	TITAN500 TITAN750 TITAN3000 TITAN3000V	1,500万円～(ハード含む)	88年9月	

PolyGraf	〃	〃	ポリマー専用ビルダー（アモルファス、スターバースト、ブロック状ポリマー等）を備えた表示&解析一体型の分子設計システム。その他周期境界条件を用いた解析、一定圧力下での運動シミュレーションが可能			89年4月	
NMRgraf	〃	〃	NMRの測定データをもとに各種分子の立体構造を予測			90年4月	
MolSkop	日本電子	日本電子	NMRスペクトロメーターとネットワークで結び直接測定した生の2次元NMRデータを解析し、たん白質の立体構造を解析。分子構造のグラフィックス表示および解析構造から2次元NMRデータのシミュレーションを行い結果をスペクトルとして表示する総合システム。	TITAN－Ⅲ	5,000万円～（システム）	90年4月	
SYBYL Basicモジュール Advanced Computation モジュール Biopolymerモジュール QSARモジュール Polymerモジュール	三井物産	米トリポス	基本的な分子モデリング、データベース、エネルギー計算等 立体配座解析、量子力学計算、分子動力学計算等 たん白質、核酸等の生体高分子操作 定量的構造活性相関操作 合成ポリマー専用モデリング操作	VAXシリーズ、IRIS4D/GTシリーズ、Sun－4、コンベックス、クレイなど	各 約800万円～(1ユーザー限定)	88年5月 〃 〃 89年2月 〃	14システム 11システム 9システム 3システム 1システム
NITRO	〃	〃	パソコンをSYBYLの3次元グラフィックス端末として使う通信ソフト	IBM PC/AT、PS2、マッキントッシュⅡ	35万円	88年5月	20システム
ALCHEMYⅡ	〃	〃	パソコン用分子設計支援システム	〃	30万円（大学向け15万円）	88年10月	約50システム
CONCORD	〃	〃	変更スマイル表記法を利用した簡易三次元分子組立システム	VAXシリーズ、IRIS4D/GTシリーズ、Sun-4	約650万円（SYBYLユーザー）、約810万円（非SYBYLユーザー）	88年2月	1システム
DISCOVER	三菱商事、菱化システム	米バイオシム	エネルギー極小化、ダイナミックス手法を用いた分子設計シミュレーションプログラム。コンソーシアムで吟味した独自の力場パラメータを採用	IRIS、VAX、CRAY、CONVEX、ALLIANT、IBM、MULTIFLOW、	1,870万～3,370万円（INSIGHTとセット）	87年9月	
DelPhi	〃	〃	生体高分子の内部及び周辺外部の静電ポテンシャル計算プログラム。分子・溶媒のイオン強度、誘電率を考慮した計算が可能	IRIS、VAX、CONVEX	640万～1,250万円	89年4月	
DMol	〃	〃	局所密度汎関数法によるab－initio分子軌道法プログラム。有機物だけでなく金属クラスター・無機物にも適用可能。	CRAY、IRIS、VAX、CONVEX、MULTIFLOW	1,040万～2,490万円	89年3月	
INSIGHTE	〃	〃	生体高分子から一般有機分子を対象とする分子設計用3次元グラフィックスプログラム。分子の構築、表示、解析のための機能を提供	IRIS、VAX	1,870万～3,370万円（DISCOVERとセット）	87年9月	
Homology	〃	〃	すでにX線結晶構造解析された相同たん白質の3次元構造に基づき、一次シーケンスのみ既知のたん白質のモデリングを行うプログラム			90年4月	
Polymer コンソシアム	〃	〃	ポリマー用の実用的な分子設計支援ソフトの開発を目的とするコンソシアム。会員には、ソフトの入手権のほか種々の利点が与えられる。現在会員募集中			89年7月	
Catalysis コンソシアム	〃	〃	触媒用の実用的な分子設計支援ソフトの開発を目的とするコンソシアム。会員には、ソフトの入手権のほか、種々の利点が与えられる。現在会員募集中			90年10月	
EXPOD	—	三菱総研	EXPODは、新規高分子材料開発の効率化を目的として開発され、実測データベースを中心としたデータベース利用システムの面と、特性を推算するための知識利用システム（エキスパートシステム）の両面を持つエンドユーザ志向のシステム	HP、NEWS、SUN	マルチクライアント方式	90年9月	昭和電工、住友化学、東レ、三菱化成、クライアント40社

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
BIO-EXPLORE	バイオメディクス	仏バイオストラクチャ	分子モデリング・パッケージ	IRIS-4D、SUN SPARC、IBM RISC/6000、DEC	1,200万円～	90年6月	
BIO-GROMOS	〃	〃	分子構造のエネルギー最小化および分子の動的シミュレーション用プログラムで、GROMOSのアルゴリズムに基づき、いかなる分子構造の分子動的解析のシミュレーションも実行	IRIS-4D、SUN SPARC、IBM RISC/6000、DEC	1,000万円	90年6月	
MAD	〃	米コンセプト・データ・リソース	3次元リアルタイム分子モデリング・システム－PHIGSグラフィック端末からアクセス可能。GRIDおよび他のモデリング・ソフトウエアとのインターフェースをサポート	IBM RISC/6000、IRIS-4D、SUN SPARC、DEC	要問い合わせ	90年9月	
GRID	〃	英モレキュラー・ディスカバリー	分子グラフィックソフト	IRIS-4D、DEC VAX/VMS	1,500万円	90年9月	
SYNLIB	長瀬産業	米ディストリビューテッド・ケミカルグラフィックス	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。70,000件の反応を収録	VAXシリーズ	1,400万円	87年	
CHEMICS	〃	電子科学 テクノシステム	NMR、IR等のデータや研究者の知識を入力することにより、化合物の化学構造を推定するシステム	VAXシリーズ、IBM PS/55(OS/2)SUN等		89年	
CHEMIPAC	日本・データゼネラル、長瀬産業	豊橋技術科学大学	分子構造のモデリング、解析、MM/MO、I/F機能を提供するモデリング・サブシステムと化合物の情報を管理するデータベース管理システムを提供	AV300、AV400シリーズ	570万円～(ハード含む)	90年7月	
SPARTAN	センチュリリサーチセンタ	カリフォルニア大学アーバイン校、イリノイ州立大学	非経験的分子軌道法GAUSSIAN85のグレードアップ版。化学者が手元で活用できるよう、対話型のデータ入力環境と計算結果のグラフィック表示機能を備えた。マッキントッシュ版は現在プリ処理のみ対応	マッキントッシュ IRIS－4D	30万円 280万円	90年7月 90年7月	
P/COMPOSITE	サイバネットシステム	米PDAエンジニアリング	3次元複合材の材料と構造の詳細な定義、温度依存性を持つ複合材構造特性の線形、非線形解析、各層ごとの破壊評価を行う有限要素法プログラム	APOLLO、CRAY、VAX、IBM、SUN等	380万円～(年間ライセンス料)	87年	
SAVVY/FT－IR	日経情報システム	米エクスカリバー・テクノロジー	ニューラルネットを応用し、赤外線スペクトルのデータベースから未知試料の類似スペクトルを高速に検索。スピードは10,000件データから約10秒	VAX/VMSシリーズ	約500万円	88年8月	
MOL-GRAPH	旭化成情報システム	ダイキン工業	低分子、素材、合成高分子、生体高分子解析にパッケージ化したシステムを提供。エントリーから総合的解析までニーズ別に選択可能	TITAN2000GS	700万円	89年10月	
SPARTAN	〃	カリフォルニア大学アーバイン校、イリノイ州立大学	非経験的分子軌道法計算プログラムで、GAUSSIANよりはるかに高速であることが特徴。化学者が手元で活用できるよう対話型のデータ入力環境と計算結果のグラフィック表示機能を備えた	〃 その他ベクトルコンピューター	300万円	90年6月	
ESPROT	ノヴァ、新日鐵エレクトロニクス・情報通信事業本部	ノヴァ	たん白質の一次構造を解析することにより、立体構造を知るための手掛かりを様々な情報として提供。独自アルゴリズムで予測精度が高く、大規模シミュレーションにはスーパーコンも利用可能	ソニーNEWS サンSPARC アライアントFXシリーズ	98万8千～350万円 (アライントFX予価700万円)	89年12月	
FRODO	住商電子システム	カリフォルニア大学サンディエゴ校	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	87年	
MMS	〃	〃	汎用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	87年	
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から、三次元の分子モデルを作成する	ホスト各機種＋自社製グラフィックディスプレーI、Mシリーズ	60万円	83年	
サイエンスグラフ	ソフトサイエンス	日産化学工業	化学構造式をはじめ、様々な作図ができるグラフィックエディター。マウスをサポート。データフォーマットを公開	PC－9801シリーズ他	7万5千円	85年2月	1,500本
パソコン統計解析	〃	筑波大学 加藤克己 慈恵医大 縣 俊彦	医学・生物学・化学・薬学などの分野で多用されるプログラム16本を収録	〃	5万円	85年3月	320本
化学マイコン入門	〃	岡山大学 田中善正	統計処理から元素含有率算定、重量分析、吸光光度定法などの応用プログラム28本	〃	5万円	84年12月	100本
薬物速度論入門	〃	京都大学 山岡清、谷川原祐介	薬物濃度の時間変化と体内動態をプロットプログラム、非線型最小二乗、モーメント解析法などに分けて、27本のプログラムで説明	〃	5万円	85年10月	140本

薬物体内動態解析法	〃	京都大学　山岡　清	検量線の定量、反復投与時間のシミュレーション、体内動態パラメーターの推定、薬物の特性分類などプログラム32本収録	〃	7万円	84年4月	280本
ラボグラフ	〃	ソフトサイエンス	実験室で得られたデータを解析して統計処理。処理は回帰分析、t検定	PC9801シリーズ	6万3千円	90年2月	10本
MOLDA&GRIMM Ver5.1/5.1J	サイエンスハウス	東京大学　吉田弘ほか	パソコン用分子設計支援システム。1985年以来の高い実績。ディスプレー上で簡単に分子式を組み立て、MM2とのリンクも可能。FMR版も発売	PC−9800シリーズ	5万2千円(5.1)、5万8千円(5.1J)	89年2月	220本
3D-Molmaster	〃	山形大学 阿部昭吉	化学者が使い慣れたZマトリックス座標系を用いて入力。原子数の多い分子向きの分子設計支援システム。MM2とのリンク可能	〃	7万8千円	89年8月	20本
MODRAST−E	〃	姫路工業大学 中野英彦	上記2種の分子設計支援システムをもとに、高精細な分子グラフィックスを行う。上位システム並みのスペースフィル図表示可能。3次元ソリッドモデラー	〃	5万8千円	87年8月	90本
MODRAST−P	〃	〃	PDBの3次元データを読み込み、たん白質をグラフィック表示する。ソリッドモデラーなので、たん白質を任意断面で切断できる。多彩な表示機能をもつ。PDBを収録した専用データファイル(別売)が提供される	〃	7万8千円	87年11月	25本
PC版MM2	〃	東京大学 吉村伸	パソコン用MM2計算プログラム。MOLDA&GRIMMおよび3D−Molmasterから利用できる	〃	2万8千円(民間)、9千8百円(公共)	86年6月	120本
MOLDA−S	〃	東京大学　吉田弘、サイエンスハウス	簡易版の分子モデリングソフト。高校、高専向け教育用ソフトとして最適	〃	1万8千円	89年6月	
MOLDA&MM2	〃	〃	原子の3次元座標、結合情報をメニュー選択、コピー機能等により対話形式で作成し、分子力場計算(MM2)で分子構造の最適化および構造情報を簡便に計算し、結果を得ることができる	日立2050G	78万円	89年10月	
Chem File	〃	原田武夫、サイエンスハウス	有機化合物の構造式、分子量などの膨大なデータを効率的にメモして整理するミニデータシステム。対話形式による出力・検索が行える（印字）	PC−9800シリーズ	5万8千円	90年10月	
MM2PPキット	東レシステムセンター	東レシステムセンター	大沢映二豊橋技術科学大学教授開発のプログラムMM2をベースに、共役π電子系を含む分子も扱えるよう機能を拡張した	PC−9801、FMR、PS/55、IBM、FACOMメインフレーム、VAX	6万円〜 25万円〜 50万円〜	88年7月	
3D−MOL(V2.5)	〃	〃	パソコン用の3次元分子モデリングシステム。MM2PPキット、パソコンMOPAC、パソコンMOPAC／386他の理論計算プログラムとの組み合わせで、パソコンで本格的な分子設計が可能	PC−9801シリーズ PC−98XL²／XA PC−H98m70	19万円	90年6月	
パソコンMOPAC	〃	〃	半経験的分子軌道計算プログラムとして世界的に有名なMOPAC(V3.1)を、16ビットパソコンに移植したプログラム	PC−9801、FMR、PC286シリーズ、PC386シリーズ	9万円	88年10月	
パソコンMOPAC/386 (基本プログラム)	〃	〃	32ビット機対応のパソコンMOPACで現行品に比べ扱える原子数が65へと倍増、処理速度は4倍増	PC-9801(32ビット機) PC−H98m70、PC386シリーズ	19万円	89年11月	
パソコンMOPAC/386 (拡張モジュールV)	〃	〃	基本プログラムとの組み合わせでMOPAC(V5.0)の全機能に対応、扱える原子数は最大70	〃	9万円	90年6月	
Cameleon	〃	オクスフォードモレキュラー社	たん白質連鎖のホモロジーモデリングのための新しいアプローチを提供 対話的グラフィック機能により結果を可視化	TRIS4Dシリーズ	150万円	90年10月	
Constrictor	〃	〃	実験(NMR、NOE)による原子間の距離情報から分子の3次元構造を生成するディスタンスジェオメトリ法のプログラム	IRIS4Dシリーズ VAXシリーズ	150万円	90年10月	
ASP	〃	〃	異なる2分子の類似性を定量的に求め、どのような化合物を優先的に合成すべきかの指針を与える	〃	150万円	90年10月	
Cobra	〃	〃	知識データベースを利用し分子の2次元構造から複数の安定な3次元構造を生成する エネルギー計算にはCOSMIC力場を利用	VAXシリーズ	200万円	90年10月	
Nemesis	〃	〃	3次元分子モデリングシステム。力場計算、部分電荷計算の解析プログラムを内蔵	Mac.IIシリーズ	25万円	90年10月	
Pimms	〃	〃	低分子からたん白質までの3次元分子モデリングシステム。結晶も可。各種解析プログラム(Asp, Cobra, Constrictor)とのインターフェース完備	IRIS4Dシリーズ	未定	90年12月	

商品名	国内販売会社	開発会社	機能・特徴	システム構成	ソフト価格	出荷年月	販売実績
GDPS98Mini GDPS98 GDPS98pro	日興通信 〃 〃	東京大学 磯晃二郎 〃 〃	パソコンを使用して、低分子有機化合物からたん白質・核酸までの立体構造を自由に表示する分子グラフィックソフトウエア。プロテインデータバンク(PDB)の登録座標データ、または同形式のデータをもとに、種々の表示方式で分子の全体、部分、骨格、側鎖、α炭素の流れを自在に彩色、あらゆる方向から観察できる	PC−9801シリーズ 〃 〃	5万8千円 17万円 35万円	89年4月 86年5月 87年11月	
MOLTSX	日本電子計算	日本電子計算	視覚的理解をバックアップする強力グラフィック機能を持った低分子力場支援ツール。力場計算MM2 PRIMEを組み込む	PC−9801シリーズ	9万8千円	89年1月	
MM2KIT	帝人システムテクノロジー	帝人システムテクノロジー	PC版MM2インターフェース。分子の三次元構造を作成してMM2の入力ファイルに自動変換。パラメータ欠落チェックあり。単独でスペースフィル描画までサポート	PC−9801シリーズ	12万円	86年8月	440本
PC版MM2	〃	原著者 N. L. ALLINGER PC9801移植者 大沢映二	エネルギー極小化過程のアニメーション表示あり。極小化途中の結果をファイルに保管することが可能	〃	3万6千円	88年4月	100本
PPPKIT(機能材料設計支援システム)	〃	帝人システムテクノロジー	PPPMO法インターフェース。構造作成が他ソフトに比較して特に容易。結合距離、結合角の正確な設定が可能。吸収スペクトル、電子密度、分子分極率等を表示。機能材料向け	〃	15万円	89年7月	100本
MATERIA	〃	〃	EWS用の分子設計支援システム。容易な3次元モデリング、MM、MOインターフェース及びエネルギー図、分子軌道図、スペクトル図等豊富な機能を低価格で実現	NEWS YHP9000 SUN	500万円〜	88年11月	25本
PREMAT/POSTMAT	くいんと	くいんと	複合材などの等価なDマトリックスを算出し、ポスト処理として細部の状態を見ることができる	スーパーコン、汎用機、ミニコン、EWS	400万円〜	89年6月	
LABSWARE	フジシステムリソース	ハンガリー・コンピュードラッグ	パソコン上で稼働するCCSソフトウエアシリーズ。有機・無機化学、定量ドラッグデザインなど9分野約56本のソフトで構成される	J−3100シリーズ	78万円	85年4月	
METABOLEXPERT	〃	〃	最新の人工知能技術により特定の化合物がどの様に代謝されるかを予測する。化合物の構造式を入力するのみで代謝物質のリストを出力する	〃 IBM XT/AT、AX	350万円	89年10月	
Pro-logP	〃	〃	最新の人工知能技術により化合物のlogP値-1オクタノール/水系における分配係数の対数-を計算する。医薬品/農薬などの開発、環境汚染の研究に最適	〃	21万円	89年4月	
DRUGIDEA	〃	〃	定量的に行われる分子構造の変換過程を分析するため様々なステップを実行する。ステップにはデータ入力、変換・修正、1変換・多変数統計分析まで含む	〃	20万円	89年4月	
MOLIDEA	〃	〃	分子モデルの作成・表示、分子力学及び量子化学に係わる各種計算などを行う事ができる	〃	24万7千円	89年4月	
MEDUSA	〃	〃	医薬品等の化学品の薬理学的および薬物動態論的挙動を測定及び評価する研究者を支援できる	〃	20万円		
PC−MOL	システム	システム	PDBのデータを読み込み、たん白質の3次元構造を表示するとともに、液晶シャッターメガネでリアルに立体視できる。CD−ROMによる、たん白質立体図鑑も提供予定	PC−9801	15万円 立体視ハードは8万5千円	90年1月	
分子構造可視化システム	アンス・コンサルタンツ	アンスコンサルタンツ	分子をレイトレーシング法で描くグラフィックソフト。数万単位の原子数を表示でき、描画速度はワークステーション並み	PC−9801	80万〜90万円	90年度(予定)	
MOL	ミタスタジオ	ミタスタジオ	XYZ座標、球の大きさ、球の色、球の結合をテキストファイルに記述すると、リアルなフルカラー表示の空間充填モデル、球棒モデル画像を出力	PC−9801シリーズ	5万円	89年4月	100本
化学ライブラリー1〜13	IBC	IBC		PC−9801シリーズ	1万円		
BIOCHEM	大久保マイコン	大久保マイコン	生化学用ソフト	PC−9801シリーズ	12万8千円		
サーチマック	データマック	データマック	化学情報ファイリングシステム	PC−9801シリーズ	9万8千円		

GENETYX遺伝情報処理ソフトウエア	ソフトウエア開発	ソフトウエア開発	パソコンで核酸配列データ、たん白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、ペプチド・たん白質構造解析	PC−9801シリーズ マッキントッシュ	38万円	83年1月	1,200本
GENETYX-CD	〃	〃	光ディスク装置データベース。核酸、たん白質データベースの利用。		42万円(ハード含む)		約450台
GENETYX-VOICE	〃	〃	核酸、たん白質読み合わせソフト。核酸配列、A・T・G・Cの音声出力。		45万円(ハード含む)		80台
GENETYX-IN	〃	〃	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像パターンを自動的に核酸塩基情報として入力		48万円(ハード含む)		160台
GENETYX-PLOT	〃	〃	遺伝情報図形処理。DNA、アミノ酸配列解析で必要なKbp単位の結果を一紙面に出力		30万円(ハード含む)		65台
GENETYX-ATSQ	〃	〃	DNAシーケンサーや核酸配列入力装置で決定したDNAフラグメントの自動結合・編集が可能		28万円(ハード含む)		50台
DNASIS	宝酒造、日製産業	日立ソフトウェアエンジニアリング	パソコン用遺伝子入力解析システム。国内はもとより海外でトップクラスの実績	日立B−16EXシリーズ、NEC PC−9801シリーズ、IBM PC/AT、PS2シリーズ	160万円	84年10月	国内700本 海外1,200本
DNAEDIT	〃	〃	DNAシーケンスデータの編集。簡易な入力方式とデータ確認方法(特許出願中)		10万円		
DNAS	〃	〃	DNAシーケンスデータの解析。カラーグラフィックス表示を用いた豊富な解析ソフト		50万円		
CONNECT	〃	〃	DNAシーケンスデータの連結。ショットガン法によるフラグメントの自動連結を実現		25万円		
REMAP	〃	〃	切断点地図の作成。二重切断法により制限酵素地図を自動作成		25万円		
AMIEDIT	〃	〃	たん白質シーケンスデータの編集。簡易な入力方式とデータ確認方法(特許出願中)		5万円		
PROTES	〃	〃	たん白質シーケンスデータの解析。2次構造の予測など豊富な解析ソフトウエア		45万円		
BIOGRAPH	〃	〃	解析結果の編集。解析結果をマウス1つで自由自在に編集しX-Yプロッターにカラー出力		18万円	88年8月	
DBREF50	〃	〃	遺伝子データベース検索システム。遺伝子データベースをCD−ROMに格納し、専用アルゴリズムの採用で高速検索を容易に実現	〃	49万5千円	85年10月	国内200台 海外300台
DNASCAN	〃	〃	DNAシーケンスフィルム自動認識装置。フィルムをスキャナー上に置くだけで、自動的に塩基配列の読み取りを実現(特許出願中)	〃	490万円	87年9月	国内10台
PAPERBANK	日立ソフトウェアエンジニアリング、日製産業	〃	文献および実験データ収納検索システム。大量なデータを光ディスクに格納し、目的のデータを簡単に取り出し複写も可能	専用ハードウエア (1)A4入出力タイプ (2)A3入出力タイプ	460万円 647万円	88年1月	25台
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。ホモロジー検索が豊富。7年の実績	PC-9801シリーズ	32万円	82年	約200セット
GRASE	〃	〃	DNA結合編集プログラム。MBショットガン法などのフラグメントを自動結合	〃	15万円	84年	
PRINAS	〃	〃	ペプチド・たん白質一次構造解析ソフトおよびアミノ酸配列データベース	ソフト一式+データベース	42万円	84年12月	
EKAS	〃	〃	酵素反応解析ソフト。Km、Vmax、Kiなどを決定するためのプロット解析	PC-9801シリーズ	6万円	86年6月	
GEMS	〃	〃	フィジカルマップ作成プログラム。ダブルダイジェスチョン法による計算	〃	4万8千円	86年1月	
BIODIS	〃	〃	生体高分子の立体表示プログラム。たん白質などの三次元グラフィックス表示	〃	6万円	86年3月	
GENAR	〃	〃	核酸配列入力システム。デジタイザー利用。ライトパネル、音声確認	ソフト一式+デジタイザー	(A)32万5千5百円(B)56万円	84年12月	
GEFRAS	〃	〃	フラグメントサイズ決定プログラム。デジタイザー利用	〃	(A)23万5千5百円(B)47万円	86年3月	
MicroGenie	ベックマン	米ベックマン	パソコン用総合遺伝子たん白質情報解析システム。核酸・たん白質のシーケンスに関するデータバンク、またはデータの様々な管理・解析が一つのソフトで可能	IBM PC/AT、PS2、NEC PC−9801シリーズ	78万円	78年7月	

関　連　行　事

１９９１情報学シンポジウム
知的情報の資源化とその高次処理をめざして

背　　景：
本シンポジウムは、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・情報・知識に関する基本的問題を論じる場として、１９８４年以来毎年開催されている。これまで、データ・情報・知識の獲得・蓄積・利用の問題について、自然科学から人文科学まで多様な専門分野から発表が行なわれている。

共同主催（予定も含む）：
日本学術会議（情報学研究連絡委員会、学術文献情報研究連絡委員会、学術データ情報研究連絡委員会、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（予定も含む）：
学術情報センター、計測自動制御学会、国際電信電話（株）、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、日本生化学学会、日本電信電話（株）、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

日　　時：　１９９１年1月8日（火）～9日（水）　9：００～１７：００

場　　所：　日本学術会議講堂（地下鉄千代田線、及木坂駅下車）

参加申し込み：
氏名、連絡先、資料必要の有無を葉書に記入し１２月２０日までに申し込む。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。

申し込み先：　情報処理学会　情報学シンポジウム担当　木村保明
〒１０６　東京都港区麻布台２－４－２　保科ビル３Ｆ
電話　０３（５０５）０５０５

参加費（資料代として）：

共催学協会員	５、０００円
学生	１、５００円
一般	７、０００円

第1日　1月8日（火）
バイオデータベース／ゲノムデータベース、全文テキスト処理

開　会	9:00 - 9:10	菅原秀明（実行委員長）

セッション1　バイオデータベース（1）　　座長　菅原秀明（理研）

1AI-1: 招待講演「バイオインダストリーのＣＩＭ化とデータベース」	長棟輝行、遠藤勲（理研）	9:10 - 9:50
1AI-2:「グルタミン酸発酵におけるファジー制御」	岸本通雅（理科大・基礎工）	9:50 - 10:15
1AI-3:「発酵プロセス診断用エキスパートシステム」	浅間　一（理研）	10:15 - 10:40

セッション2　バイオデータベース（2）　　座長　藤原　譲（筑波大）

1AII-1: 招待講演「蛋白工学研究とデータベース」	八尾　徹（蛋白研）	10:40 - 11:20
1AII-2:「蛋白質一次構造の概念的クラスタリングシステムの開発とcytochrome分子内電子伝達経路の推定」	中川博之、小山　泰、河井俊一、岡田　孝（関学大理・情報処理センター）	11:20 - 11:45
1AII-3:「大腸菌遺伝子におけるプロモーター部位の認識に関する研究」	金谷重彦、工藤喜弘（山形大・工）	11:45 - 12:10

セッション3　ゲノムデータベース　　座長　次田　皓（理科大）

1BI-1: 特別講演「ヒトゲノム計画と新しい生物情報科学の展望」	金久　實（京大）	13:10 - 14:10
1BI-2: 招待講演「線虫Ｃ．エレガンスのゲノムデータベースとその応用」	小原雄治（遺伝研）	14:10 - 14:50

セッション4　全文テキスト処理　　座長　有川節夫（九大・理）

1BII-1: 招待講演「トランスメディアによる全文処理」	田中　譲、割石浩一（北大・工）	15:00 - 15:40
1BII-2: 招待講演「全文テキスト処理のための高速パターン照合アルゴリズム」	竹田正幸（九大・工）	15:40 - 16:20
1BII-3: 特別講演「大規模文書データベース用テキストサーチマシンの開発」	加藤寛次、藤澤浩道、大山光男、川口久光、畠山　敦、兼岡　則幸、秋沢　充（日立製作所中央研究所）	16:20 - 17:10

第2日　1月9日（水）
ハイパーテキスト・ハイパーメディア

セッション5　ハイパーメディアのモデル・理論・技術　　座長　吉田郁三（日立）

2AI-1:「階層モデル管理方式概念の仮店舗管理システム　9:00 - 9:25
GMB（グローバル・モデルビルダー）応用事例」
沢　恒雄（日本アイ・ビー・エム）

2AI-2:「マルチメディア・ドキュメントアーキテクチャー、　9:25 - 9:50
MDA、の考察」
亀山　渉、花村　剛、富永英義（早稲田大学）

2AI-3:「航行めがね：RARの記述と背景となる情報環境」　9:50 - 10:15
大座畑　重光（マッキンテリジェンス）

セッション6　高度利用者インターフェース・マルチメディアデータベースの構築
座長　根岸　正光（学情セ）

2AII-1:「ハイパーテキストの拡張によるオフィスシステム　10:20 - 10:45
への応用」
小沢英昭、安西祐一郎、相磯秀夫（慶応大）

2AII-2:「シンセティクメディアシステムIntelligentPad」　10:45 - 11:10
長崎　洋、弓崎　潔、田中　譲（北大）

セッション7　ハイパーテキストシステムの応用例　　座長　岩田修一（東大）

2AIII-1:「計算機利用者支援ソフトウエアに望むこと　11: 25 - 11:50
ーハイパーマニュアル構想ー」
増田耕一（東大・理）

2AIII-2:「オンライン情報サービスとハイパーテキスト」　11:50 - 12:15
菊池俊一（日本科学技術情報センター）

セッション8　ウインドウシステムとアプリケーション（招待講演）
座長　尹　博道（富士通）

2B-1:「MS－Windowsとハイパーメディア環境」　13:30 - 14:10
山崎俊一（ジークリサーチ＆デベロップメント）

2B-2:「ハイパーメディアとOPENLOOK・XView」 14:10 - 14:50
和田健一郎（日本サン・マイクロ）

2B-3:「Presentation Manager　15:00 - 15:40
（OS／2）とそのアプリケーション」
小林吉夫（マイクロソフト）

2B-4:「OSF／Motifとハイパーメディア・システム　15:40 - 16:30
「電脳机」」
木下凌一、本田克己
（横河・ヒューレット・パッカード）

2B-5: ウインドウシステムとアプリケーションのまとめ　16:30 - 17:00

総　括　　坂井利之（組織委員長）

MEETINGS

3-6 December 1990.
Third Australian Supercomputer Conference.
Melbourne, AUSTRALIA.
Contact: Kim Sweeny (61-03-663-3077).

6-7 December 1990.
Visualization In Quantum Chemistry.
San Diego, CA.
Contact: Mick Savage, Stardent Computer, 880 W. Maude, Sunnyvale, CA 94086 (408-732-0400; FAX: 408-732-2806).

28-29 January 1991.
Sixth Biennial Workshop on Computer-Assisted Chemistry.
Orlando, FL.
Contact: Babu Venkataraghavan, Lederle Laboratories, Middletown Rd., Pearl River, NY 10965 (914-732-3406) or Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

February, 1991.
Molecular Graphics Society Meetings on 3D Databases.
Location to be decided.
Contact: Mike Hann, Glaxo Group Research, Greenford Rd., Greenford, Middlesex, UK (44-81-422-3434, x2413).

14-19 February 1991.
1991 AAAS Annual Meeting.
Washington, DC.
Contact: AAAS Meetings Office, 1333 H St., NW, Washington, DC 20005 (202-326-6450).

4-8 March 1991.
The 41st International Pittsburgh Conference & Exposition on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy.
Chicago, IL.
Contact: The Pittsburgh Conference, Inc., Dept. Bro, 300 Penn Center Blvd., Ste. 332, Pittsburgh, PA 15235.

13-20 March 1991.
Hannover Fair CeBIT '91.
Hannover, F. R. G.
Contact: Hannover Fairs USA Inc., 103 Carnegie Center, Princeton, NJ 08540 (609-987-1202).

18-22 March 1991.
Americal Physical Society National Meeting.
Cincinnati, OH.
Contact: Michael Scanlan, American PhysicaL Society, 335 E. 45th St., New York, NY 10017 (212-682-7341).

8-14 April 1991.
UCLA Symposium on Protein Folding, Structure and Function.
Keystone, CO.
Contact: UCLA Symposia, 2032 Armacost Ave., Los Angeles, CA 90025 (213-207-5042; FAX: 213-207-2397).

8-14 April 1991.
Frontiers of NMR in Molecular Biology —II.
Keystone, CO.
Contact: UCLA Symposia, 2032 Armacost Ave., Los Angels, CA 90025 (213-207-5042; FAX: 213-207-2397).

14-19 April 1991.
201st ACS National Meeting.
Atlanta, GA.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036.(202-872-4396).

21-24 April 1991.
SUPER! (Supercomputing by University Peole for Education and Research).
Salt Lake City, UT.
Contact: Dr. Julio Facelli or Ms. DeeAnn Raynor, Utah Supercomputing Institute, 3330 MEB, The University of Utah, Salt Lake City, UT 84112 (801-581-5253; FAX: 801-581-8692; Bitnet: Super@VM.USI.UTAH.EDU).

21-25 April 1991.
American Society for Biochemistry and Molecular Biology Annual Meeting (in conjunction with FASEB).
Atlanta, GA.
Contact: Office of Scientific Meetings, FASEB, 9650 Rockville Pike, Rockville, MD 20814 (301-530-7010).

29 April-4 May 1991.
Materials Research Society Meeting.
Anaheim, CA.
Contact: David Sours, Materials Research Society, 9800 McKnight Rd. —Ste. 327, Pittsburgh, PA 15237 (412-367-3003; FAX: 412-367-4373).

7-8 May 1991.
Fifth Molecular Modelling Workshop.
Darmstadt, F. R. G.
Contact: Dr. Hans Joachim Böhm, BASF AG, ZHV/W-A30, D-6700 Ludwigshafen, F. R. G. (49-621-60-49338; FAX: 49-621-60-20440).

13-17 May 1991.
Eleventh International Meeting of the Molecular Graphics Society.
Chapel Hill, NC.
Contact: Dr. Fred Brooks, Jr., Dept. of Computer Science, University of North Carolina, Chapel Hill, NC 27599 (919-962-1931).

21-23 May 1991.
Computational Aspects of Inorganic Chemistry in Biological Systems (as part of the Mid-Atlantic Regional ACS Meeting).
Newark, DE.
Contact: George Famini, SMCCR-RSP-C, U.S. Army CRDEC, Aberdeen Proving Ground, MD 21010 (301-671-2670) or Alfred Lowrey, Laboratory for the Structure of Matter, Naval Research, Washington, DC 20375 (202-767-6381).

30 May-9 June 1991.
Static, Kinematic and Dynamic Aspects of Crystal and Molecular Structure.
Erice. Trapani, ITALY.
Contact: Prof. L. Riva Di Sanseverino, Diparimento de Scienze Mineralogiche, Piazza Porta San Donato 1, 40126 Bologna, ITALY.

3-5 June 1991.
ACS Polymer Technology Workshop.
Philadelphia, PA.

Contact: Diane M. Morrill, Division of Polymer Chemistry, Inc. 1103 Chemistry Research Bldg., Virginia Polytechnic Institute, Blacksburg, VA 24061-0212 (703-231-3029).

10-14 June 1991.
The Peptide-Protein Bridge.
Toronto, CANADA.
Contact: Prof. C. M. Deber, Research Institute-Biochemistry, Hospital for Sick Children, 555 University Ave., Toronto, Ontario M5G 1X8, CANADA (416-598-5924; FAX: 416-598-7505).

16-21 June 1991.
Twelfth American Peptide Symposium.
Cambridge, MA.
Contact: John A. Smith, Dept. of Molecular Biology, Massachusetts General Hospital, Boston, MA 02114-2696.

17-20 June 1991.
27th Annual Meeting of the Drug Information Association.
Washington, DC.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

27-29 June 1991.
International Symoposium: Computer Simulation of Biomolecular Systems and Mechanisms.
Menton, FRANCE.
Contact: Mlle. Edith Godard, Conference Secretary, Institute de Biologie Physico-Chimique, 13 rue Pierre et Marie Curie, Paris 75005, FRANCE.

14-19 July 1991.
10th International Conference on Computers in Chemical Research and Education (ICCCRE).
Jerusalem, ISRAEL.
Conract: the Conference Secretariat, 10th ICCCRE, P. O. Box 71102, Jerusalem 91079, Israel (972-2-662989, 668070, TELEX: 26577 OMGIS IL, FAX: 972-2-6656689). 詳細は8巻3号の国際会議欄参照。

21-26 July 1991.
American Crystallographic Association Annual Meeting.
Toledo, OH.
Contact: Alan Pinkerton, Dept. of Chemistry, Univ. of Toledo, Toledo, OH 43606 (419-537-4568).

25-30 August 1991.
201st ACS National Meeting and 4th Chemical Congress of North America.
New York, NY.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW. Washington, DC 20036.(202-872-4396).

25-31 August 1991.
国際純正・応用化学連合—国際分析会議1991 (IUPAC ICAS'91)
場所：幕張メッセ（千葉市中瀬）
連絡先：〒151 品川区西五反田1-26-2 五反田サンハイツ304号 日本分析化学会 (TEL: 03-490-3351)

15-17 September 1991.
3rd Oxford Meeting on Molecular Orbital Calculations.
Oxford, UK.
Contact: Frank Blaney, SmithKline Beecham Pharmaceuticals, Coldharbour Rd., The Pinnacles, Harlow, Essex CM19 5AD, UK (44-279-622-143; FAX: 44-279-622-348).

18-22 November 1991.
SUPERCOMPUTING 1991.
Albuquerque, NM.
Contact: Raymond L. Elliott, MS B-260. P. O. Box 1663, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545 (505-667-1449).

2-7 December 1991.
Materials Research Society Meeting.
Boston, MA.
Contact: David Sours, Materials Research Society, 9800 McKnight Rd. —Ste. 327, Pittsburgh, PA 15237 (412-367-3003; FAX: 412-367-4373).

8-11 June 1992.
28th Annual Meeting of the Drug Information Association.
San Diego, CA.
Contact: Drug Information Association, P. O. Box 3113, Maple Glen, PA 19002 (215-628-2288; FAX: 215-641-1229).

9-16 August 1992.
Americal Crystallographic Association Meeting.
Pittsburgh, PA.
Contact: Bryan Craven, Dept. of Crystallography, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260.

16-20 November 1992.
SUPERCOMPUTING 1992.
Minneapolis, MN.
Contact: Bill Buzbee, National Center for Atmospheric Research, 1850 Table Mesa Dr., Boulder, CO 80307 (303-497-1204).

28-29 November 1992.
SUPERCOMPUTING 1992.
Paris, France.
Contact: Charles Omana, U.S.Embassy, 4, avenue Gabriel, 75382 Paris Cedex 08, FRANCE (33-1-42-96-12-02; FAX: 33-1-42-66-48-27) or in the U.S.: Don Dowd Communicatins, Inc., P. O. Box 1059, Belmont, CA 94002 (415-593-9899; FAX: 415-593-0937).

1 December 1992.
SUPERCOMPUTING 1992.
Stockholm, SWEDEN.
Contact: Robert Connan, Commercial Counselor, Embassy of the United States, Stockholm, SWEDEN (46-8-783-53-00; FAX: 46-8-660-91-81) or in the U.S.: Don Dowd Communicatins, Inc., P. O. Box 1059, Belmont, CA 94002 (415-593-9899; FAX: 415-593-0937).

4 December 1992.
SUPERCOMPUTING 1992.
London, U. K.
Contact: Jere M. Dabbs, Commercial Attaché, Embassy of the United States, London, ENGLAND (44-1-499-9000; FAX: 44-1-491-4022) or in the U.S.: Don Dowd Communications, Inc., P. O. Box 1059, Belmont, CA 94002 (415-593-9899; FAX: 415-593-0937).

文献紹介

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

1989年第8巻第4号　論文題目、著者、頁
daisormational Analysis on Calcium Channel Active Diphenylalkylamines, Diphenylbutylpiperidines, Phenylalkylamines, and Perhexlline, *Holtje, H.-D. and Maurhofer, E.*, p. 259

QSAR and Multitivariate Data Analysis of Amphiphilic Benzylamines and their Interaction with Various Phospholipids Determined by Different Methods, *Seydel, J. K. Cordes, H. -P. Wiese, M., Chl, H., Croes, N., Hanpft, R., Luiimann, H., Mohr, K., Platten, M., Padberg, Y., Luiimann Rauch, R., Vellguth, S., Meindi, W. R. and Schonenberger, H.*, p. 256

Rationallisations among Heterocyclic Partion Coefficients. Part 3: x-Excessive Heterocycles. Some Comments on the CLOGP Algorithm, *Bradshaw, J, and Taylor, P.J.*, p. 279
Principles of Method Selection in Partion Studies, *Hersey, A., Hill, A. P., Hyde, R. M. and Livingstone, D. J.* p. 288

Structure-Activity Models for Molar Refraction of Alkylsilanes Based on Molecular Connectivity, *Hall, L. H. and Assarud, D.*, p. 296

Topological Indices in Correlation Analysis. Part 1. Comparison of Molecular Shape with Molecular Connectivity for Some Hydrocarbons, *Mokrosz, J. L.*, p. 305

1990年第9巻第1号　論文題目、著者、頁
Hydrophobicity and tumor promoting activity of phorbol esters, *Rippmann, F.*, p. 1

Hydrogen Bonding. 12. A new QSAR for upper respiratory tract trriation by airborne chemicals in mice, *Abraham, M. H., Whiting, G. S., Alarie, Y., Morris, J.J., Taylor, P. J., Doherty, R. M., Taft, R. W., and Nielsen, G.D.*, p. 6

Relationships between octanol/water partion coefficients and total molecular surface area and total molecular volume of hydrophobic organic chemicals, *de Bruijn, J. and Hermens, J.*, p. 11

Drug lipophilicity in QSAR practice: I. A comparison of experimental with calculative approaches, *Mannhold, R., Dross, K. P. and Rekker, R. F.* p. 21

Quantitative structure-activity relationship studies on a new class of anththypertensive agents: derivatives of 3-aryl-4, 5,6,7-tetrahydrro-1H-pyrazolo [4,3-c] -pyridine, *Singh, P. and Sharma, R. C.*, p. 29

Topological indices in correlation analysis. 2. Molecular shape indices in modelling of the chromatographic retention parameters, *Mokrosz, J. L. and Duszynska, B.*, p. 33

1990年第9巻第2号　論文題目、著者、頁
High performance liquid chromatographic methods and procedures of hydrophobicity determination, *Kalliszan, R.*, p. 83

DARC computer aided drug design in anticholinergic research, *Marcler, C., Troullier, G. and Dubois, J. -E.*, p. 88

Correlation analysis and molecular modelling of cholelecyatokinin inhibitors, *Coats,*

COMPUTERS & CHEMISTRY

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

Vol. 223, 1990

Special Issue: Spectroscopic Studies on Molecular Structure—A Collection of Invited Papers in Honour of Professor E. Bright Wilson, Jr.

Vol. 224, 1990

Special Issue: Perspectives in Molecular Structure — A Collection of Invited Papers in Honour of Professor Bryce L. Crawford, Jr.

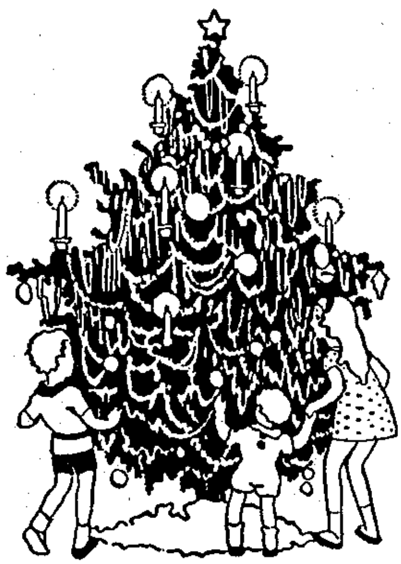
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY

Volume 11/Number 6/JULY 1990

Volume 11/Number 7/AUGUST 1990

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

1990年第8巻第3号（9月） 論文題目、著者、頁



新会員勧誘にご協力下さい

職場、家庭を問わず、また日、欧を問わず、みんながワープロを使い、ブック型、ノート型パソコンもかなり普及してきて、いつも電子文房具が視野に入るようになってきた現在、化学者のコンピュータに関する知識も年毎に変わってきていると思います。この背景の中で、化学情報、計算機化学などの情報化学に関心をもっている人、これからは化学の分野でも情報化学が不可欠だと思っている人などが多数にのぼることは、情報化学部会の編集委員が行ったデルファイ方式のアンケートや情報化学部会についての最近の問い合わせにも見られます。

情報化学部会として、研究活動と情報交換の範囲をさらに広げ、内容もより充実させるために、会員増加をはかりたいと願っています。お知り合いの方々をぜひお誘い下さい。

入会に関する問合先：〒101 東京都千代田区神田須田町１－９　教信木田ビル６Ｆ
（社）日本化学会　会員部　☎(03)258-9815

ちなみに、平成元年度に次のような活動をしました。

1．第12回情報化学討論会開催（平成元年11月８日～10日　豊中市、千里協栄ホール）
2．CICSJ Bull., 7, (1989) No.1 ～No.6（隔月）特集記事を含め203 頁の編集・出版
3．セミナー関係
第２回情報化学夏期セミナー―情報化学入門―（平成元年８月24日～25日　神戸市、YMCA六甲研修センター）
4．研究会・ワークショップ
１）化学物質名の機械処理に関する研究会　第１回（平成元年10月27日　東京都千代田区、中央大学駿河台記念館）
２）新しい領域としてのケモメトリックス―その現状と将来展望（平成２年１月22日東京都文京区、お茶の水女子大学）
３）化学命名法ワークショップ　第２回　―命名の歴史から機械処理まで―（平成２年１月26日　東京都千代田区、日本科学技術情報センター）
5．日化年会関係
第５８春季年会　化学情報・計算機化学部門を企画・担当
6．協力関係
１）1989環太平洋国際化学会議（PACIFICHEM '89）情報化学部会関係部門への協力
２）シンポジウム「化学における情報の現状と将来」（平成２年１月19日　東京都港区、日本学術会議）参加協力

（総務担当幹事　藤枝修子（お茶女大））

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。

本誌に適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須田町１－９　教信木田ビル６階
社団法人　日本化学会　情報化学部会　事務局
電話（03）258-9813

日本化学会事務局 仮事務所のお知らせ

日本化学会事務局は新化学会館竣工までの間、下記において業務を行いますのでお知らせ致します。

何かとご不便、ご迷惑をおかけいたすと存じますが、何卒ご協力を賜りますようお願い申し上げます。

記

①仮事務所住所

〒101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル 6，7 階
（郵便物は旧住所でも届きます）

②電話番号

東京(03)258-9811（代表）

総務部：(03)258-9812
業務部：(03)258-9813（部会事業一般、部会誌編集）
経理部：(03)258-9814
会員部：(03)258-9815（部会入退会、送本）
編集第一部：(03)258-9816
編集第二部：(03)258-9817
会館建設室：(03)258-9818
常務理事室：(03)258-9819
図書室関係：(03)258-9811

②ファクシミリ番号

(03)258-9810