ISSN 0913-3747

CICSJ Bulletin

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

ニューラルネットワーク　特集号

日本化学会
情報化学部会
Volume 9, Number 1
January 1991

目　　次

特集：ニューラルネットワーク

「ニューラルネット」特集にあたって

＝編集委員会より＝
服部　忠（名大工）・鬼頭繁治（愛知工大）

新しい理論や方法が提案されて広がり始める頃には，その向こうに無限の平原が広がっているように感じられ，何か新しい世界に踏み込めそうな気がするものである．しかし一方では，過去のいくつもの経験から，いずれ絵に描いた餅に終わるのではないかという不安ないしは懐疑的な気持ちも頭をもたげてくる．

ニューラルネットは，情報化学の世界に関する限り，ちょうどそのような状況にあるのではないだろうか．極度に単純化したかたちとはいえ，人間の脳のはたらきそのものを利用するのであれば，化学を今までと違った切り口で料理できるかもしれない．それが新しいメニューの提供につながるのか，あるいは調理場の合理化に役立つだけなのかは別にして．．．しかし，これまでにも，方法論としては正しくても，化学への適用には化学独自のさまざまな工夫と相当のマンパワーが要求されることを経験してきたし，時には工夫と努力では解決できない限界があることを知っている．ニューラルネットは，はたしてどうなのであろうか．どんな工夫とどの程度のマンパワーが必要なのであろうか．どのような問題に適しているのであろうか．

本特集は，ニューラルネットへの導入から始めて化学への応用例にいたる範囲の記事から構成されている．甘利先生の玉稿は，（社）近畿化学協会コンピュータ化学部会の資料から，本特集の基調記事として転載させていただいたものである．ＮＴＴの桑原氏には，無理を言ってわかりやすい実際面の解説をお願いした．大変な力作である．本特集の珠玉は，Gasteiger，Zupan両教授による総説である．これは，ニューラルネットの化学への応用に関するおそらく世界初の本格的な総説ではないだろうか．

さらに，化学の分野で実際にニューラルネットを応用している方々に，ご自身の研究を中心に，自由な内容で執筆していただくようお願いした．紙数をきびしく制限したため，研究内容について充分な記述をしていただけなかった点に悔いが残っている．幸い，これらの多くは，最近の情報化学討論会で発表された研究に関連したものであり，伊藤，佐々木両氏の研究は，触媒学会平成２年度研究発表会で発表されている．それらの講演予稿集も参考にしていただきたい．応用を紹介したこれらの５編では，ニューラルネットをどう使いこなしていったかという点に力点をおいていただいたものが多い．このあたりから，どんな工夫が要求されているのか，その臭いを嗅ぎとっていただければ幸いである．

最後に，ご多忙の中，こころよくご執筆いただいた著者の方々および本特集の企画にご助力いただいた副部会長の吉田元二氏に感謝の意を表します．

脳の科学とコンピュータ

甘利俊一

1. 情報技術の新しい流れ

情報技術の世界に新しい流れが現れた。並列処理、分散処理、そしてニューロ技術へと向かう流れである。いや、こうした傾向は決して新しいものではなく、古くから考えられていたものである。それが今なぜ急に浮上してきたのか、それは技術の世界に定着するものなのか、また情報技術にどのような新しい展望を開くのか、こういった問題を考察し、その歴史的必然性を明らかにする必要がある。

1940年から50年代は情報の概念が確立する情報科学の形成期であった。この時期に、マッカラック・ピッツのニューラルネットのモデル、ウィナーのサイバネティックスの思想、シャノンの情報理論、さらにオートマトン理論、言語理論が輩出し、電子計算機が登場した。ここでは情報機能や知的機能をめぐってあらゆる可能性が語られる夢の時代でもあった。学習機械としてパーセプトロンという神経回路網モデルが研究者の心を捉えたのも、この時代の末期、1960年代のことである。

これ以降、情報技術は確立期を迎える。ここではデバイス技術の驚異の発展に支えられて、コンピュータの性能が飛躍的に増大し、人工知能も含めてすべての情報技術がコンピュータを中心に考えられるようになった。その基礎には、チューリングに始まる計算可能性の理論、アルゴリズムの万能性がある。しかし、ハードウェアデバイス技術の発展は、ノイマン型のコンピュータだけでなく、他の多くの方式の可能性をも技術的に支えるものである。こうして、1980年代になって人工知能技術がある程度の成果を見るとともにその困難性が指摘され、他の可能性にも目が向けられるようになった。これが並列性であり学習可能性である。

2. 情報処理の二つの基本原理

人間の脳はきわめて優れた情報処理装置である。ここで人間の思考がどのように営まれているかを考えてみよう。人間は理詰めで物事を考える。この際に言語という記号体系を使って多様な情報を記号化し、記号間の組合せの規則として論理を成立させる。こうした方法を形式化すればアルゴリズムとなる。人間の情報処理のこの側面を理論化したものがアルゴリズムの理論、コンピュータサイエンスであり、これを技術として成立させたのがコンピュータである。これは記号処理を中心とする逐次直列型情報処理の基本原理であり、今日の人工知能はこの原理に基づいている。

一方、人間は意識に登らない領域でも莫大な量の情報処理を行っている。突然よいアイディアが浮かぶとき、我々は何か直観とでもいうべき思考、ひらめきなどを用いている。こうしたものは逐次的な論理操作では説明することの難しい人間の脳の働きである。こうした情報処理の基礎には、多数のニューロンの興奮パターンとして情報を分散表現し、ニューロン間の並列の相互作用によって興奮パターンを変えていく情報処理様式が考えられる。これはパターン化した情報をもとにする並列型の情報処理であり、そこに学習機能が容易に埋め込める。我々はこの基礎にある並列学習情報処理の原理を研究しなければならない。考えてみると、動物は言語を使って論理操作で情報処理をしているわけではない。それでも犬にしろ猿にしろ、きわめて優れた状況判断と問題解決能力がある。人間に至って初めて、逐次直列型のシンボルによる情報処理が実現したのであるが、それが現実にうまく働くのはその背後に莫大の量の並列情報処理が意識下で進行しているからではなかろうか。言語というシンボルで表した概念を我々が理解するときに、それを単に記号として同定するのではなく、その背後に潜む意味内容をも同時に理解している。記号に表現しきれないこうした意味内容が脳内の興奮パターンとして表現されているからこそ、記号表現が生きてくるのである。いや、我々が思考するときには、意味内容をもとにした並列の相互作用による直観的思考法がむしろ主であって、その後で記号表現と論理による思考の整理と検証が行われている。

こう考えてみると、情報処理には逐次直列型と並列学習型の二つが可能であり、それぞれを支える二つの基本原理があるといえる。人間はこの両者を使いこなすから強力なのである。技術の世界は、逐次直列方式の原理を明らかにし、これを技術化するのに成功した。今我々を待ち受けているのは、並列情報処理原理の解明であり、その技術化である。

3. ニューロコンピュータの研究

並列情報原理に基づくニューロコンピュータを開発するには、まず現実の脳をよく調べ、その仕組みを真似てコンピュータを作ればよいという考えがある。これは必ずしも良い方法とは限らない。我々は並列の情報処理の可能性と限界とを明らかにする情報原理そのものに関心がある。脳はこの原理を実現した今のところ唯一の例であるから、脳を調べることは有用である。しかし、脳は生物の進化という試行錯誤の迂遠な道をたどり、生物的な材料を用いるという制約の中で、この原理を生物学的に実現したのであった。したがって、その実現はスマートなものとは決していえないかもしれない。

むしろ、脳を解明するためにも、具体的な脳の構造から離れて、並列学習の情報原理を理論的に追求してみることが重要である。これは比較的単純なモデルをもとに、あるアーキテクチャの中で多数の要素が非線形に相互作用する回路網のダイナミックスがどのような動作をするか数理的に調べることで可能となる。さらに、このダイナミックスの中にどのような情報処理が埋め込めるのか、またその動作の限界はどこにあるのかを明らかにすることである。それにより、もっと複雑なアーキテクチャなら何が可能でどこが限界かを順に明らかにすることができる。こうした理論が並列学習情報処理の原理を明らかにしていく。

この立場からするならば、脳の秘密を探るには、ここで明らかにされる原理が脳の中でどのように実現されているかを見る方法が有効といえる。これを計算論的神経科学という。一方、この原理を工学的デバイスを使って実現するニューロコンピュータは決して脳の単なる模倣ではない。脳と並列原理を共有するとは言え、その原理の別の形での実現である。こう見るならば、たとえ

脳の秘密が完全に解明されなくとも、新しい情報技術を展開できることがわかるであろう。

4. 現状と展望

ニューロコンピュータは一種のブームとして技術の世界にやってきた。これを浅薄な一時的な流行にしてはならない。並列情報原理を志向する技術的必然性と、現段階でそれを技術的に可能とするハードウェア技術の成熟がその基礎にある。もちろんこの技術は簡単なものではない。今後の研究の積み重ねにより、21世紀に大きく花開くものといえよう。現在そのための努力が始まったところである。

ニューロ技術の研究にあたっては、脳の生理学的研究、脳の情報数理工学的理論研究、応用志向による並列情報処理の研究、それにハードウェアデバイスの研究が加わって、新しい総合的な脳科学を創造しなければならない。現在そのための努力が進行中である。ここでは基礎研究から応用研究までが一線に並んで進行するのである。

現実の脳は並列情報原理とその優秀性の存在証明を与える。我々は今こそこの原理を解明し、技術化する歴史の結節点に到着したのである。

謝辞

本稿は、社団法人近畿化学協会コンピュータ化学部会における講演資料を転載したものであることを付記し、転載を快くご承諾いただきました甘利俊一教授（東京大学工学部）および同部会部会長吉田郷弘教授（京都大学工学部）に謝意を表します。

ニューラルネットとその応用

ＮＴＴ情報通信処理研究所　桑原　敏

最近、ニューラルネットを使ったシステムの報告が目だつようになりました。　基本的アイデアは４０年以上前から研究されているものですが、現在は計算機の飛躍的進歩などから、いろいろな新しいアルゴリズムが提案され、応用されるに至っている状況と考えられます。

ニューラルネットの応用分野としては、文字認識、音声処理等の認識問題がほとんどです。

これは認識のような機械化が極めて困難な処理にニューラルネットが向いていると考えられてきたからです。　しかし、比較的長い歴史のあるニューラルネットによる認識問題への適用も、現実には人間の認識レベルには程遠く及ばないのが実情です。　これはニューラルネット技術の限界がこの程度のものであると判断する人も多いでしょうが、我々人類はニューラルネット技術の入口にいるにすぎないと考えるのが妥当と考えます。

一方別の潮流として、ＡＩシステム特にエキスパートシステムが次第に実用へ向い初めています。　エキスパートシステムは専門家の知識を宣言的に計算機内に格納し、推論することによって専門家と同程度の問題解決能力を持つ情報処理技術であり、これも記号レベルでの新しい認識技術として、現実に多くの実用システムが開発されています。　しかし、エキスパートシステムでは知識をルール等として記号表現することが前提となっており、実際には複雑な要因がからんでいる外界の情報を記号に変換し、知識として獲得するには多くのコストと労力を必要とするのが現状です。　記号レベルの知識獲得の研究は精力的に行われてはいますが、これといって決めてになる方法は無く、これが実用エキスパートシステム構築上のネックといわれ、現在のＡＩ技術の最大の問題であります。

こうした状況でニューラルネットを用いたエキスパートシステムへの期待も高まっています。

そこで、ここでは先ずニューラルネットとして現在盛んに利用されている代表的モデルのいくつかについて概観するとともに、ニューラルネットとエキスパートシステム等の記号処理との関係について紹介したいと考えます。

１．パーセプトロン

初期のニューラルネットは主としてパターンの認識に利用するというものでした。

パターンとして代表的なものは図形等の画像です。　さらにセンサを介して得られるデータもパターンとして捉えることができます。　音声等では時間とともに変化する時系列パータンと考えられます。　実際はほとんどの自然界から得られる情報は時系列性のあるパターン情報と考えられます。　このような時系列情報を扱う動的なニューラルネットは相当複雑なので、初期の研究では余り取り扱うことができず、静的なニューラルネットの研究が主流でした。つまり入力にパターンを与えると、結果が出力に得られる型で、一般にこれはフィードフォワード型ニューラルネットと呼ばれるものです。

この最初のモデルを発表したのが、この分野に大きくインパクトを与えたRosenblattのパーセプトロンです。　これを図１に示します。

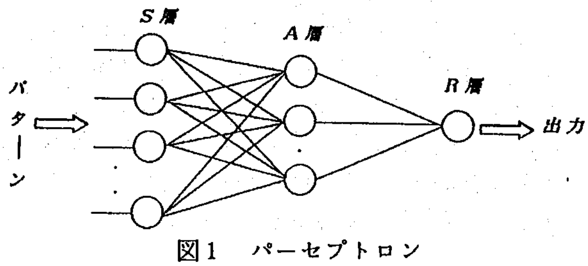


図１　パーセプトロン

基本となる単純パーセプトロンは３層のニューロンが並んだ構成をしており、入力情報はＳ層でｎ個のＡ層のニューロンに対するｎ組の信号に変換され、Ａ層と１個のＲ層を経て０か１の結果を出力するものです。　各層間の結合に

は重みが付加されますが、S層とA層間は固定重みで結合され、S層とR層間のみが可変重み結合されます。　A層、及びR層の各ニューロンは１段前のニューロンの出力を重み付き積和を行い、それを飽和型特性を持つ出力０か１のしきい値判定するものです。　このような単純な回路で簡単なパータン認識ができることが示されましたが、同時に大事なコンセプトとして機械学習と呼ばれるメカニズムを持ったことです。　パーセプトロンでは教師付き学習の方法が用いられました。　つまり、教師が入力と出力の正しい組合せをニューラルネットに教えることによって、ニューラルネット自身が重みを修正していくものです。　例えば、パーセプトロンのA層とR層間の重みの初期値はランダムに設定されているものとして、１回の学習で、R層の出力が大きすぎる場合には、出力過大に最も大きく貢献した重みを大きく下げ、逆に出力過小の場合には、その逆を行うというものです。　この学習法はアルゴリズムの簡単さに比較してかなり強力なもので、この後の学習法も大部分はこの変形と考えられます。

しかし、これには大きな欠陥もあることが指摘され、複雑な問題には適用できないことが分かりました。　いわゆる非線形分離問題です。

つまりA層とR層間の線形分離能力しか期待できないことを意味し、これに非線形分離能力をもたせるには複数のA－R層を持った可変重み結合型ニューラルネットが必要であることを意味します。　そこでそのような３層以上のニューラルネットの学習方法が研究されましたが、少数の研究者によってのみ続けられる期間が長く続きました。　但し、線形分離能力で充分な応用も多く、実際には現在実用になっている簡単な図形認識装置等ではこのタイプのニューラルネットを用いたものが多いようです。

２．バックプロパゲーション

わが国では、フィードフォワード型多層ニューラルネットの学習法について、早くから甘利による研究があります。　しかし、同種のバックプロパゲーション学習法をRumelhartらが発表したのを機にニューラルネットへの期待が再び大きくなってきたのはつい最近のことです。
これは多層のニューラルネットにおける各層間の重みの学習、つまり教師有り学習の実用的なアルゴリズムを提案したことによるもので、パーセプトロンの非線形分離能力の欠如の問題を解決するものです。　そして、現在最も多く利用されているニューラルネットの学習モデルです。　このバックプロパゲーション学習法は図２に示しますように、出力層以外に隠れ層と呼ばれる中間層の存在が可能であり、層数も原理的には多数持つことができるものです。

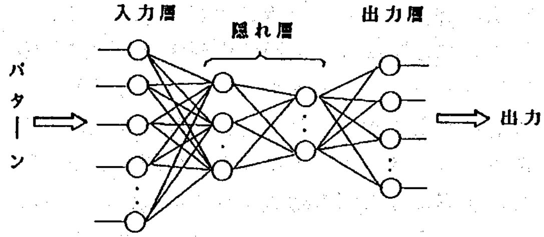


図２　バックプロパゲーション

必ずしも層構造でなくてはならないというわけではありませんが、基本的には信号が入力から出力へと１方向に流れるフィードフォワード型が前提です。　また各ユニットは単純なしきい値判定ではなく、シグモイド関数のような微分可能なアナログ型の関数が使われます。　学習については出力段の期待値との誤差を尺度に各層間の重みを修正する点に関してはパーセプトロンと同じですが、その修正量を計算する際にまずは出力層とその１層手前の中間層との重みを修正し、さらにその修正量を尺度にさらに１層出前の中間層、または３層の場合には入力層との間の重みを修正するというものです。
さらに学習時の途中、出力パターンと期待される正解出力パターン間の二乗誤差を最小にするために一般化デルタルールの１種である最急降下法を用いているために、学習の収束が保証されているというものです。　この理論的説明は、現在余りにも有名ですので、ここでは詳細は省き、最後の補足で他の学習法と併せて簡単な重み変更規則の比較を示します。

ところでバックプロパゲーション学習にも大

きな欠点があります。　これは学習が進むにつれて、誤差の改善の度合が縮小するために学習に長時間を要すること、また局所極小点に重み分布が収束してしまい、誤差が0にならないこと、また中間層の層数、ユニット数、及び望まれる教師データ形式等を決定するための効率的な方法論が無いことなどです。　しかし、バックプロパゲーション学習は最も多く利用されていることから、いろいろな解決法が提案されています。　まだ決定的な方策はありませんが、利用者にとっては多くの適用事例から予測をたてることができます。　現在では文字や音声の認識、株価の変動予測、簡単な制御の問題等に、実用的なものが出現しつつあります。

3．連想機能と教師無し学習

ニューラルネットに期待される重要な機能として連想があります。　またこの連想用ニューラルネットを作成するにあたっては教師無し学習法というものが考えられています。　パーセプトロンやバックプロパゲーション型ニューラルネットでも連想能力を期待した働きをさせることは可能です。　そこで、ここではまずバックプロパゲーションモデルで連想にどの程度能力があるか簡単な実験結果を示します。　さらに、教師無し学習を前提としたニューラルネットモデルのいくつかについて紹介します。

連想にはあるパタンの一部から全体を想起する自己連想とあるパタンから別のパタンを想起する相互（異種）連想の２種に大別されます。

いずれの場合でも入力データパターンに関連する出力パターンを想起する能力と考えられますが、特に入力データパタンが不完全、あるいは記憶した状況とは異なる場合でもなんらかの近似的な出力データパタンを想起する能力が連想では重要と考えられます。　そして効果的な連想が可能なニューラルネットが実現できれば、情報処理の分野では極めてインパクトが大きいと考えられます。　なぜならば、ほとんどの自然、及び社会現象から観測されるデータには何らかのノイズや擾乱が重畳され不完全なものであり、これがコンピュータに直接入力でき、利用可能になるのであれば、今以上のコンピュータの利用範囲が拡大するからです。

それでは、その能力を説明するために、グラフの形状を連想するという簡単な実験を紹介します。　まず、$y=a(x-b)^2$というグラフをａ，ｂを０から１まで可変にしてランダムに１０個用意します。　次に１つのグラフについて６箇所の（ｘ，ｙ）ペアの値を読み取ります。

この時適当なランダムノイズを加えます。全てのグラフについて、それぞれランダムに選んだ６箇所ずつのペアデータ（ｘ，ｙ）と期待される出力値（ａ，ｂ）を組にして教師データとします。　つまり教師データは教えようといしているグラフの離散的な点の値です。　次に入力層１２ユニット、中間層８ユニット、さらに出力層２ユニットの３層バックプロパゲーションニューラルネットを用意します。　入力層でのユニットとｘとｙの対応は若番をｘ、老い番をそれに対応するｙとします。　ｘはソートしておきます。　入力層には６つの（ｘ，ｙ）を入力します。　出力層には入力したデータに対して、想起した（ａ，ｂ）が出力されるようにします。　学習では用意した１０個のデータセットを順次入力し、バックプロパゲーション学習法でａ，ｂの二乗誤差が最小となるようにします。　連想能力を試すには、学習したときとは違うランダムなデータセットを別に用意します。　さらに別に５０個のデータセットを用意し、これでも学習、及び連想を行います。これはデータ数によって連想能力がどの程度変化するかを確かめるためです。　結果を図３に示します。

図３で学習データ数が１０個程度の少ない場合には、（ａ，ｂ）の出力誤差は大きく、連想能力がほとんどありませんが、５０個程度では誤差はかなり縮小し、連想能力が向上していることが分かります。　この実験では学習データセットや検証用のデータセットでのｘやａ，ｂが離散的、かつランダムに与えられたこと、さらにｙの値にランダムノイズを与えていることから、学習はニューラルネットにとって過酷な条件ですが、学習データセット数を多くするこ

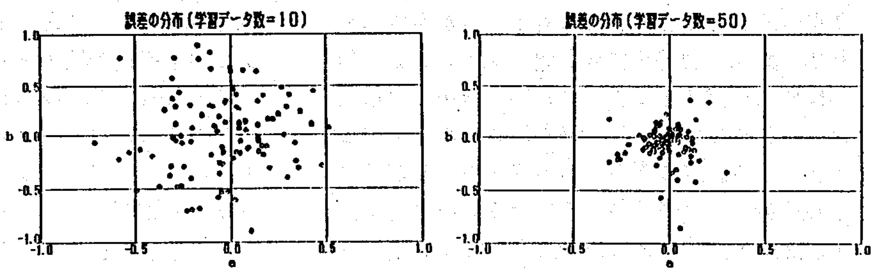


図３　グラフの形状を連想する実験

とができれば、不完全な未知データに対して近似的な連想が可能なことを示しています。

なお、ｘの箇所を固定にしたり、ランダムノイズを与えない、さらには対数データに変換する等を行えば、精度の高い連想を少ないデータセット数で学習できます。　さらにこの能力は、例えば、実際の問題に対して、この例のような数学的なグラフでなくとも入力と出力の対からなる事例、即ち学習用データセットがあれば、未知の入力のデータセットに対して連想することが可能であることを示しています。　以上、バックプロパゲーション学習による連想能力の実験例を示しました。　これは教師有り学習の代表例であり、実際のシステムを構築する上では大変便利であり、よく使われます。次に連想能力の学習でよく使われる教師無し学習について述べることとします。　教師有り学習には正確な教師用のデータが大量に必要になります。　しかし、実際には正確な教育用知識を獲得することは困難です。　また、人間が連想能力を学習する過程からいっても少し違和感があります。　実際、人間は外界からのいろんな情報に対して、いろんな観点からそれらを分類し記憶する柔らかな記憶能力を有しています。　そのためある状況に遭遇した場合、最も近い過去の状況を連想できるといったことができると思われます。　しかし人間はそのような観点をはっきり論理的に説明できない場合の方が多いのです。　また観点はその人間のもっている基本的な能力に依存しており、普遍的ではありません。　つまり第六感といったものを含め、多くの知能、あるいは知恵は何も教師から教えられたものではなく、経験から自然と得られるものと考えられます。

ニューラルネットを考える場合に、このメカニズムを実現することはきわめて意義があるものと考えられます。

しかし、教師無し学習を計算機で実現するのはそう容易ではありません。　現実に今考えられている教師無し学習はどのようなものでしょうか。　一般に各ユニット間は相互重みを有し相互結合されることを除けば、各ユニットの働きは今までのものと大差ありません。　教師無し学習とは、あるパタンをニューラルネットの特定の入力ユニットに与えた時、選択的にある特定の出力ユニットが興奮するように重みを修正することです。　従って、この場合でもニューラルネットの最適な重みをどのように決定するかが問題になります。　いろいろな教師無し学習パラダイムが提案されておりますが、Ｈｅｂｂの学習法と呼ばれるものを基本にしたものが多いようです。　それは重み付け相互結合の両端に位置する入力ユニットと出力ユニットのそれぞれの出力の積に比例して重み修正を施すというものです。　今、ユニットの出力が０、１の値をとるものとし、出力値が１に近いほどそのユニットはアクティブであるとします。

出力ユニットがアクティブで、その時の入力ユニットがアクティブの時のみ、重みを一定量増加する方式（強化学習）、また入力ユニットがアクティブでない場合にも反対に重みを一定量削減する方式（競合学習）などが代表的な方法です。　さらに巡回セールスマン問題で有名になったHopfieldモデルでは、これに出力ユニットがアクティブでない場合にも、競合学習的に重みを変更するものと概念的には考えられます。　この他にもKohonenモデル、視覚パタンに強いコグニトロン、また入力パタンの位置ずれに強いネオコグニトロン等があります。　これらの詳細はここでは説明しませんが、それぞれ特異な連想能力を有しています。

以上のモデルはユニットの状態変化規則に非線形なしきい値関数を用いるという決定論的な動作を前提としています。 学習のための計算量は少なくユニット数の多いネットワークでも対応できるという利点がありますが、欠点としては局所最小解に到達する可能性が高いことです。 例えば、Hopfieldモデルで少し規模の大きい巡回セールスマン問題を行わせると、何度も初期値を設定してやり直さなければ最適な解は得られません。 人間も試行錯誤しますので、最もよい答えを採用する程度で良ければ使えますが、ユニットの動作が決定的である点は、なんとなく人間の脳の働きとは異なるように思えます。 そこでユニットの状態変化規則に確率論的な要因を導入したモデルが考えられました。

しかも統計力学の手法を使うことによって学習収束性が保証されることが分かりました。

この代表的モデルがボルツマンマシンです。

ボルツマンマシンは多くの点でHopfieldモデルと類似したニューラルネットです。 つまり、ユニットに確率的状態変化規則を導入したこと、さらに焼きなまし(simulated annealing)という概念を使い、学習を安定させる方法を採用したことです。

例えば、ユニットkのローカルエネルギーギャップ△Ek（入力の重み積和に相当します）が求まりますと、ユニットkがアクティブになる確率Pkは以下の式で表わされます。

$$Pk = \frac{1}{1+\exp(-\triangle Ek/T)}$$

これをグラフにプロットすれば良く分かることですが、Pkは△Ekが増加するにつれ確率1に近くなるように変化し、その度合はネットワークの温度Tが大きいと緩慢で、Tが小さいとステップ的になります。 T＝0ではHopfieldモデルと同じ動作になります。 つまり、Tが比較的大きい時は、ネットワーク全体のエネルギーEは重みをいくら正確に設定しても、常に最小の方向に収束するとは限らないで、本当の最小点の廻りをうろうろした状態になります。

こんな状態でTを次第に小さくし、重みを微調整していくと、本当の最小点に収束する可能性が高くなります。 これは小さな局所最小点はTが高い時点でのユニットのランダムな動きで乗り越えられることを示しています。 ボルツマンマシンの呼び名の由来はネットワークがあるパターンである確率がネットワークの結合関係と温度にのみ依存するボルツマン分布になることからきています。 ボルツマンマシンの学習は入力パターンの発生確率と学習後の出力パターンの発生確率を合致させるように重みを決定することです。 ユニットは入出力パターンの出し入れを行う可視ユニットとそれ以外の隠れユニットに分け、Tを高い点から次第に下げながら何回も入出力パタンをネットワークに与え、ユニットの状態変化を記録し、簡単な統計的な計算で重みを変更することができます。

ボルツマンマシンの欠点は収束が遅いことです。 しかし、最近ではいろいろな改良方式やハードウェア化等の報告が行われており、研究していく余地はまだまだありそうです。

4．その他のモデル

多くのニューラルネットモデルは学習でネットワークの重みとユニットのしきい値を変更するというものです。 これとは別に重みやしきい値だけでなく、ネットワークの構造そのものを変更するモデルも考えられます。 この中には各ユニットの状態変化規則を単純なステップ関数や確率で考えるのでなく、論理やファジィに置き換え、これをヘテロに組み合わせる相当複雑なモデルも考えられています。

また前方向の信号だけによるフィードフォワード型だけでなく、時間的に遅れを持った後ろ方向の信号を有した、時系列データ認識向きリカレントモデルの研究も盛んになってきています。 ただこれらの解析はかなり難しく、学習方法、また能力もはっきりとは分かっていないのが現状で、応用はかなり先のことになると思います。

ここでは学習の進行に従って、隠れユニットの追加、あるいは削除が起こることにより、パターンの識別能力を高めることができるRCEモデルについて簡単に紹介します。

パターン識別とは、特定なパターンに対して、それが属するクラス（あるいは名前）を連想することと言えます。　ただ実際の問題では類似なパターンに対しては同一のクラスを連想する必要がある等、柔らかな識別が望まれる場合が多くあります。　このためにはパターン特徴を決定木のような画一的に表現するのではなく、なんらかの「ゆらぎ」を持った表現を採用する必要があります。　ＲＣＥは１つのパターン特徴を超平面上の１つの点と廻りに影響範囲（ゆらぎ）を持った円形の領域（隠れユニットに相当）で表現し、複数の特徴に相当するまとまった領域の集合に１つのクラスを割り当てた構造の特異なニューラルネットです。　各領域は学習の初期段階では、ある大きな影響範囲を持ち、学習が進行するにつれ、大きさが変動します。

新たなパターンが入力されたとして、特徴は似ているが、別のクラスであると、新たな領域が生成され、もとあった領域の影響範囲は縮小し、矛盾が無いようにします。　学習が完了した後に未知のパターンを入力した場合、そのパターンの特徴が既に存在する領域の影響範囲内であれば、未知のパターンはこの領域のクラスを想起できます。　このＲＣＥモデルを使った実際の商品では、最小、または最大の影響範囲、さらに判断レベル等のパラメータを設計者が指定でき、識別の観点を変えられるようになっています。　また多種類の特徴に対して、それぞれ別のネットワークを作成し、それらを統合して結論を導出できるメカニズムも持っています。

ただし、これらをどう使うか等のストラテジィについては問題対象に依存するものであって、画一的な方法は無く、試行錯誤するしかありません。　良い点は学習が極めて高速なことで、システム構築時にいろいろなことを試してみても苦にはならない点です。　デメリットは連想能力が弱く、また教師無し学習はできない等の点です。

５．ニューラルネットと記号処理

ニューラルネットもエキスパートシステム等に使われてきた記号処理も問題解決のための処理機構と考えられます。　それぞれ多くのパラダイムが提案されていますが、全ての問題に万能というものはありません。　実際の問題を単一のパラダイムだけで対応するのは余り賢いとはいえません。　つまり問題を複数のサブ問題に分割したときに、それぞれのサブ問題に適した処理機構を使い、全体として統合する方策が求められるはずです。　近い将来にＡＩ的なアプローチでシステムを作ろうとするならば、複数のサブ問題に分割し、それぞれの持ち味を活かしたハイブリッドなシステム構築が近道です。

それではニュラルネットと記号処理のそれぞれの得意な処理とはどのようなものか、おおまかな比較を表１に示します。

表１から分かりますように、２つの処理機構は明らかに正反対の特徴を持っています。　実際の問題に適用する際には、どのような処理機構を組み合わせたら良いか、実際に試してみればよいのですが、現在我々が手に入れることのできる処理機構は限られており、またばらばらに提供されているのが実情です。　幸い最近ではＵＮＩＸという比較的標準化されたシステムの上に、多くのソフトが提供され始め、それらの個別の処理機能を適当に連結することも可能になりつつあり、複合形態のＡＩシステムの研究も徐々に加速化されています。　記号処理自身にも分散ＡＩと呼ばれる新しいパラダイムの研究の必要性が高まり、おそらく複合形態のＡＩシステムを実現するための手法として、大きく関係してくるものと考えられます。

さらに、ニューラルネットと記号処理の関係では、相互に変換できる手段を考え、おおまかな記号ルールをニューラルネットに変換し、ニューラルネットで学習した後に、記号ルールに戻し実行するとか、ニューラルネットから記号ルールを抽出する試みまで行われています。

いずれにしても、ニューラルネット自身の研究だけでなく、ニューラルネットと記号処理を組み合わせたシステムが、いろんな分野で今後多数、報告されるものと予想されます。

表1　ニューラルネットと記号処理

比較項目		ニューラルネット	記号処理
問題の性質		入出力を観測した事例は多数有るが、関係をモデル化したり、記号で直列的に表現できない	入出力の関係がモデル化でき、記号で直列的に表現できる
特徴	精度	高精度が保証できない	記述できれば高精度が保証できる
	安全性	学習外入力に対して異常出力の危険性	学習外入力に対するチェックが可能
	対故障性	一部の故障が全体に波及しない	一部の故障が全体に波及する恐れ
	対ノイズ性	ノイズ、欠落に強い	ノイズ、欠落に弱い
	汎用性	同一カテゴリ内の未知入力に対して近似解が得られる	予め予想したパラメータの範囲内でなければ、近似解を導出できない
	速度	並列的処理のため高速 実時間大量データ処理に適する	直列的処理のため速度が遅い 実時間大容量データ処理には向かない
	説明性	処理過程の説明は困難	処理過程の説明は可能
	保守性	システムの変更に再学習が必要	システムの変更は容易
	構築性	・高度な専門知識がなくとも、システム構築できる可能性がある ・短期にシステム構築できる	・高度な専門知識の獲得に知識エンジニアの助けが必要 ・システム構築に長期間要する
用途		連想、パターン認識、分類	高次の論理的判断、高精度の計算処理

6．おわりに

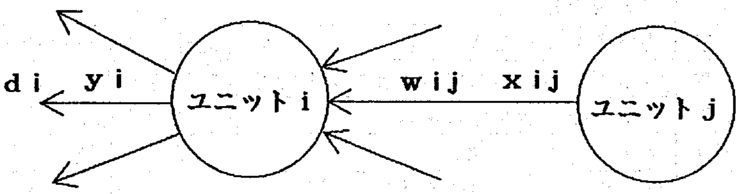
いくつかの代表的なニューラルネットについて概観し、これとエキスパートシステム等の記号処理との関係について述べました。

ニューラルネットへの我々の期待の最大のものは、何が何だか分からない現象に対して、明確なモデルを構築せずに、現象を入力するだけで自動的に識別能力が向上していく学習機能であると思います。　しかし実際に試してみると、入出力の形式を充分に注意深く設定したり、学習の方法を試行錯誤したりしないと良い結果は達成されないのが実情です。　小規模なニューラルネットでもその数理的な振舞いは良く分かっておらず、経験的にシステム構築しているのが現状です。　これを打破し、ニューラルネットが情報処理における真の処理機構になり得るためには、それの能力や限界等について、今以上の基礎的な研究が必要であるとともに、実際面への適用をさらに進めていかなくてはならないことを強調したいと思います。

［参考文献］

甘利：神経回路網の数理、産業図書、１９７８
甘利：ニューロコンピュータ読本、サイエンス社、１９８９
安西：ソフトウェア科学１６－認識と学習、岩波書店、１９８９

【補足】　学習則のまとめ



x_{ij}	；	ユニットjの出力値
y_i	；	ユニットiの出力値
d_i	；	ユニットiの期待出力値
I_i	；	ユニットiへの入力値総和
n	；	ユニットiへの入力数
w_{ij}	；	ユニットiとユニットj間の結合重み
w_{ij}'	；	wijの重み修正後の値
e_i	；	ユニットiの誤差
c_1、c_2	；	学習定数
$T(a)$	；	$\begin{cases} 0 & \text{if } a < \text{しきい値} \\ 1 & \text{if } a \geqq \text{しきい値} \end{cases}$

・強化学習	$w_{ij}' = w_{ij} + c_1 * T(d_i) * T(x_{ij})$
・競合学習	$w_{ij}' = w_{ij} + c_1 * T(d_i) * (2 * T(x_{ij}) - 1)$
・Hopfield	$w_{ij}' = w_{ij} + c_1 * (2 * T(d_i) - 1) * (2 * T(x_{ij}) - 1)$
・ﾊﾟｰｾﾌﾟﾄﾛﾝ	$w_{ij}' = \begin{cases} 0 & : \text{if } A = (2T(d_i) - 1) * (2T(x_i) - 1) > 0 \\ w_{ij} + c_1 * (2 * T(d_i) - 1) * T(x_{ij}) & : \text{if } A \leqq 0 \end{cases}$
・BSB	$w_{ij}' = w_{ij} + c_1 * (d_i - y_i) * x_{ij}$
・CPN	$w_{ij}' = w_{ij} + c_1 * e_i * x_{ij} + c_2 * (w_{ij}' - w_{ij})$
・Adaline	$w_{ij}' = w_{ij} + (di - I_i) / n * x_{ij}$
・Kohonen	$w_{ij}' = w_{ij} + c_1 * (x_{ij} - w_{ij})$
・ﾃﾞﾙﾀ	$w_{ij}' = w_{ij} + c_1 * e_i * x_{ij} + c_2 (w_{ij}' - w_{ij})$

APPLICATIONS OF NEURAL NETWORKS IN CHEMISTRY

J. Gasteiger* and J. Zupan†

*Institute of Organic Chemistry, Technical University Munich, D-8046 Garching, Germany and †'B. Kidric' Institute of Chemistry, Ljubljana, Yugoslavia

INTRODUCTION

The studies of neural networks began with the work of W.S. McCulloch, W. Pitts[1] and D.O. Hebbs[2] almost 50 years ago. Unfortunately, due to some theoretical weaknesses and because the practical results in solving real-world problems were not satisfactory, there was not much enthusiasm in their development and research. However, after the publication of J. Hopfield[3], the situation has changed dramatically. Furthermore, the introduction of the non-linearity and the feedback coupling of outputs with inputs by D.E. Rumelhart, G.E. Hinton, and R.J. Williams[4] gave new flexibility to the old neural network architectures.

In this paper, we intend to give the readers a short overview of the kind of problems that were tried to be solved in chemistry with neural networks. The neural network approach is quite a sensitive method that cannot be routinely used for predictions without careful preliminary planning and a number of fine-tuning experiments.

It can easily be said that modelling is the leading motif in all neural network studies in chemistry. Most commonly, the sought model should interprete an available set of data (spectroscopic data, set of historical recordings of process control, protein sequences, etc.) in such a way that the resulting outputs (structural features, process parameters or feedbacks, position of alpha carbons in the proteins, etc.) are as close to the real values as possible. The neural networks are mainly applied on data from which the results cannot be deduced in a straightforward manner from first principles, by theoretical calculations, or even with numerical methods.

There are, of course, many other possible uses of neural networks in chemistry and we hope that the present review will promote and encourage the research in this direction.

GENERAL OVERVIEW

The papers on which the present review is based address a very broad spectrum of problems. Among others, the application of neural networks was found in:

- spectra-structure correlations[5-13]
- predictions of the secondary structure of proteins[14-18],
- predictions of faults and diagnosis of causes in the control of chemical processes[19-25],
- QSAR studies[26,27],
- predictions on the course of chemical reactions[28,29],

- ion-selective electrodes[30],
- spectroscopic calibration[9],
- X-ray fluorescence spectrometry[31],
- classification of atom energy levels[32], etc.

The Methodology. In spite of a large variety of neural network architectures and methods, for the vast majority of neural network users in chemistry the back-propagation algorithm seems to be the most attractive choice. The back-propagation algorithm is very well-suited for many different applications due to its clear supervised learning ability, i.e., the ability to learn on a set of data with known responses.

Other neural networks were used in only four papers[5,8,12,32]. The Hopfield net was used twice by[5,8], the adaptive bidirectional associative memory or ABAM[33-35] was employed once[12], and a Kohonen competitive learning combined with counterpropagation corrections[36] once by[32]. Therefore, our main task will be to outline how the back-propagation method was used by the chemists (Table).

As can be seen from the Table, the back-propagation nets used vary in size considerably. The number of weights to be adjusted by learning range from half a million used by Bohr et al[18] to fewer than 100[21,30,31]. The number of weights in the neural network architecture does not necessarily reflect quality of the results, but rather the type of problem attacked. It is interesting to note that there is a clear cut between the 'low' and 'high' dimensionality 'employers' of neural nets. Either they use objects described by 3-18 variables[19-27,30,31] or there is a jump of almost two orders of magnitude, to the use objects with a few hundred dimensions.

Concern for scaling and transforming the input variables to a more suitable measurement (feature) space was present in almost all papers. The normalization of input variables was mainly done with the Min-Max procedure or by autoscaling[9]. However, a number of papers (all papers on secondary structure of proteins[14-18] and some papers on process control[21,24,25] use binary vectors as input. In this case, the normalization or transformation is obviously not necessary.

The next very important issue in neural network applications is the choice of the training set. A proper **choice of the training set** should consider both the size of the set (the number of samples in the set) and the coverage of the measurement (variable) space by the selected objects as uniformly as possible. To solve this problem, any form of experimental design technique[37,38] should be employed. Here, we believe, most of the authors did not put enough attention. The problem of selecting the right size and right exemplars for the training set should be the most carefully carried out preliminary procedure of a neural network approach.

SELECTED TOPICS

Spectroscopy. The problem of establishing reliable correlations between different types of spectra (infrared, mass, ^{1}H NMR, ^{13}C NMR, etc.) and the chemical structure of the corresponding compounds has been around so long, that there is no wonder that the neural network approach immediately attracted the attention of spectroscopists and those working in the area of computerized structure elucidation[5-13,31,39]. In the present overview, the following spectra were used as inputs to the neural nets:

Table. Main data used in back-propagation neural nets by different authors. The number of input neurons corresponds to the dimensionality of the input vector X. Biases are not taken into account. If a moving window was used as the input scheme, the size of the window is marked as MW. The size of the net is represented by the highest number of weights used in the study (in units of 1000). The number of outputs roughly corresponds to the number of information the authors try to extract from the data. Some authors did not explicitly describe either the training, or testing procedure and therefore, their achievements are not given in the table. ng=not given, ag=average prediction, pa=prediction ability. Q3 is a quality index specially developed in protein secondary structure determination[14-18].

Reference and the first author	No.of neurons on inp.	Total size of the net (10^3)	No. of neurons on out.	Samples in the set for Learn	Samples in the set for Test	Quality of predictions	
Spectroscopy							
6 Robb	256	33	128	7000	541	91.5	pa
7 Munk	256	20	36	2500	416	90.1	pa
9 Long	50-126	1.3	1	50	20	2	ag
10 Curry	493	42	16-36	12100	1210	98	pa
11 Thomsen	400	2.5	6	24	24	75	pa
Protein Structure							
14 Quian	MW13	14.5	3	18105	3520	62.7	Q3
15 Holley	MW3-21	0.7	2	8315	2441	63.2	Q3
16 Kneller	MW13	0.8	3	18000	2500	79	Q3
17 Bohr	MW7-91	41	2	10000-n	n=var	73	Qa
18 Bohr	MW61	500	3+30	ng	ng	96.6	pa
Process Control							
19 Hoskins	6	0.1	6	12	35	100	pa
20 Venkatas.	6,12	0.2	6,8	13,33	ng	54-98	pa
21 Wantanabe	3	< 0.1	5	6	ng		ng
22 Venkatas.	18	0.7	13	13,20	ng		ng
23 Ungar	6,11	0.2	13	13	ng		ng
24 Bhat	MW15	< 0.1	5	db	5	>90	pa
25 Leonard	6	< 0.1	6	12	35	100	pa
Miscellaneous							
26 Aoyama	7,14	0.4	1	11,21	5,8	66,75	pa
27 Aoyama	6,7	0.2	5,4	37-n,57-n	n=var		Ft
28 Elrod	6,25	0.1	2,2	32	13	77	pa
29 Elrod	36,66,105	16	28,55,105	18-74	7,6,9	87-100	pa
30 Bos	5	< 0.1	4	63	63	6,8	ag
31 Bos	3-9	<< 0.1	3	13,30	5,7		

- mass spectra (Curry and Rumelhart[10] and Lohninger[13]),
- infrared spectra (Tusar and Zupan[5], Munk and al.[6,7], and Zupan[39])
- near-infrared spectra (Long and coworkers[9]),
- optical reflectance spectra (Barnard and Cassanet[8]),

- UV spectroscopy (Otto and Hoerchner[12]),
- fluorescence (Bos and Weber[31]), and finally,
- ^1H NMR spectra (Thomsen and Mayer[11]).

Not all of the authors have used the back-propagation algorithm. Tusar and Zupan[5] have used Hopfield and Hamming networks[3] to categorize the full curve obtained by an infrared spectrometer if it needs base-line correction and which type of correction is necessary. Barnard and Cassanet[8] have implemented a Hopfield minimization procedure on an optical device simulating the Hopfield net. Otto and Hoerchner[12] have employed Kosko's adaptive bidirectional associative memories (ABAM)[33-35] to learn different UV spectra. All other authors have used back- propagation on conventional linear computers.

The most extensive studies in spectroscopy were those by Curry and Rumelhart[10] and by Munk and coworkers[6,7] who use more than 12,000 mass and about 6,700 infrared spectra, respectively. The goals of both studies were very similar: they intend to predict as many structural fragments that are relevant to the particular spectroscopy as possible. Curry and Rumelhart[10] design 37 neural networks: the first one to obtain 36 top-level structural decisions (like alkyne, phenol, phenyl, alcohol, carbonyl, phenyl-O, SO_2, etc...) and then for each top-level decision a separately trained network decides the structural sub-classes more precisely. For example, a subnet for -O-C(=O)- has 22 sub-classes. The results for 16 class decisions show excellent performance in the range from 94 to 99.5 % reliability in predictions.

In their first paper Robb and Munk[6] set up a backward propagation without hidden layers and trained it to recognize and identify 128 functional groups (24 main groups) active in infrared spectroscopy (for example -O-H, >NH, carbonyl, -O-C(=O)-, and aromatics, etc.). In the next study[7] they focus attention on 36 functional groups while adding a hidden layer and fine-tune their network. For extensive calculations a Cray supercomputer was used. The obtained predictions range from 'excellent' (for cumulene or carbonyls, for example) to 'poor' for groups whose detection is based on bands of variable intensity.

Due to the possibility of fast associative recall of neural nets and the ability to store and retrieve large amounts of multidimensional data by the three-distance hierarchical clustering method[40-42], Zupan speculates in his article[39] about the hardware and software that are necessary to enable a construction of intelligent spectrometers. His premise was that the amount of data processed by an average infrared spectrometer in its life-time does not exceeds 1.6 Gbyte data (1000 days times 200 spectra per day times 4000 values per spectrum times 2 byte per value) which is already today within the capacity of hardware and software combining 3-distance hierarchical clustering and neural network methods.

Thomsen and Meyer[11] designed to distinguish ^1H NMR spectra of six different alditols by a back-propagation network. They employed a threshold for the output error during the training. If the output value was larger than the threshold the weights were changed, otherwise not. They found that this addition enhanced the rate of convergence.

<u>Process Control.</u> The problems that werem tried to be solved in process conrol are basicly of the same kind: from sets of measure- ments (temperatures, pH values, concentrations, flow rates, etc.) recorded during the operation of a reactor vessel the faults that cause unusual and unwanted events must be predicted.

Hoskins and Himmelblau[19], Venkatasubramanian and coworkers[20], and Watanabe and coworkers[22], have applied a back- propagation neural network each to a different problem: 1) the prediction of six faults from six input measurements in three continous-stirred-tank reactors in series, 2) to model reactor- destillation column, and 3) the detection of five faults in the catalytic conversion of heptane to toluene. The authors in[19] observed an excellent generalization ability of the system if each fault was represented with at least two measurement patterns in the training set, but they express concern about the predictions of patterns that are very close in measurement space to the patterns representing normal state. In the study[20], it was noticed that the two-hidden-layer network shows similar or even worse responses than a one-layer network, inspite of requiring twice the number of learning iterations. Watanabe and coworkers[22] divided the diagnosis process into two phases (6 networks). In the top-level network the discrimination between causes of faults is made and in the subsequent five nets the level of each fault is determined.

Venkatasubramanian and Chan[20] explore the possibility for inclusion of their back-propagation network into a large rule- based expert system for controlling a fluidized catalytic cracking unit. They train the net with 13 single fault symptoms, and additional 33 and 30 symptons for two and three faults, respectively. The best achievements were 77.5 and 53.6 % for two- and three-fault predictions, respectively.

In their study, Bhat and McAvoy[24] predict pH values in a reactor for five consecutive steps in the future. For training, they used a historical database of pairs of variables, the flow rate and the pH-value. The input to the neural network consists of five consecutive data-pairs of flow rates and pHs from the past and five flow rates in the future. The outputs were the corre- sponding five future pH values from the historical database. On the average, their predictions were better than 90 %. Bhat and McAvoy[24] made another very interesting observation linking the main equation of the 'convolution' model for dynamic process control[43] to the equation expressing the net input of a neuron.

Leonard and Kramer[25] observed that a fixed momentum mu in the back-propagation learning can cause the system cycling around a minimum, while the use of mu = 0 (steepest descent) can cause slow traversal of long narrow valleys. In accordance with the conjugate gradient theory[44], they suggest the change of weights to be made after the calculation of overall direction of descent for all P samples in the training set are made.

<u>The structure of proteins.</u> The studies on the prediction of protein secondary[14-17] and tertiary[18] structure probably constitute the most homogenous group of papers.

Quian and Sejnowski[14] apparently were the pioneers to enter this field. Their solution to the problem was designed in analogy to a previous study by Sejnowski and Rosenberg[45] on a network that converted English text to speech. The aim of the study[14] was to predict whether an amino acid participates in an alpha- helix, a beta-sheet, or a coil secondary structure of a protein. This information should be deduced from the six amino acids preceeding the one investigated and the six amino acids following it in the sequence. In the learning process, a window of 13 amino acids is shifted in steps of one amino acid over the entire amino acid sequence of the protein.

Interestingly, the peak performance of the neural net was almost independent of the number of hidden units. Even one without a hidden unit had a success rate of 62.5 % in comparison with the best one of 62.7. The average success rate of previously established methods for the secondary protein structure[46] is 49 to 56 (against 33 % for chance prediction). Thus, the neural network approach did lead to an improvement against the existing methods.

The subsequent authors[15-17] perform very similar investigations trying to improve the results obtained with a fine-tuning of the neural network method employed by Quian and Sejnowski[14]. First, Bohr and coworkers[17] use separate networks for the decisions on alpha-helix, beta-sheet, and coil. They extend the window to 51 amino acids and obtain a prediction ability for alpha helix of 73%. Next, Holley and Karplus[15] use only two hidden and two output (helix and sheet) nodes to achieve the peak prediction of 63.2 %. Then, taking into account only highly reliable predictions a rate of 78.5% was obtained. Unfortunately, only 31.4 % of all test cases qualify for a decision using the above reliability criterion. Furtheron, Kneller and coworkers[16] improved the results of Quian and Sejnowski[14] by changing their approach in two points. First, they add new information to the input neurons (helix and strand hydrophobic moments or different average hydrophobicities taken from different windows of different lengths) which results in a slight improvement in the predictions. Secondly, by subdividing the proteins into four structural classes (alpha, beta, alpha/beta and others) they improve the prediction accuracy considerably.

Finally, in the very recent paper, Bohr and coworkers[18] used the same neural network method with the largest window of 61 amino acids but extended the approach to predict the tertiary structure of proteins. To this end, they introduced a binary distance matrix for the alpha-carbon atoms in the amino acids. An entry in this matrix was zero if the distance between alpha-carbons of the two amino acids in question was less than a certain threshold value (e.g., 8 Angstroms) and 1 otherwise. These distance constraints were used to generate a folded conformation of a protein backbone (tertiary structure), using a steepest descent minimization approach. Steepest descent minimization means taking the momentum term mu equal to zero (see ref. 25 for discussion).

<u>Miscellaneous.</u> Two papers by the same research group have appeared on the application of neural networks to studies on Quantitative Structure Activity Relationships (QSAR)[26,27]. The relationship between structure and biological activity was investigated for various sets of compounds. Intentionally, data sets were chosen that had already been well-studied by conventional methods, mainly multivariate-linear regression analysis (MLRA), to allow comparison with the results from those methods. The input data consisted of values for various physicochemical parameters describing the electronic and steric effects of the substituents on the skeletons of the various classes of compounds. The output of the net was either a classification of the compound considered into one of several activity classes, or a numerical value for a biological activity. The neural network approach gave in all cases better results than the discriminant analysis or MLRA.

Elrod, Maggiora, and Trenary[28,29] applied neural networks to the prediction of the products of chemical reactions. In their first paper[28], they study the ratio of ortho- and para- versus meta-substitution in electrophilc aromatic substitution reactions.

Two different types of representations for the monosubstituted benzene starting materials, were investigated. One was a connection table in the simple form of a 5 x 5 matrix giving for all non-hydrogen atoms of each substituent the atomic number, the bonds attached to it, and the charge on the atom. The other input representation used the charges on the six ring atoms as obtained from a semi-empirical quantum mechanical calculation.

Interestingly, the input representation that is simpler to obtain, the connectivity matrix, gave the better results. The charge in the aromatic ring is only one factor influencing the product distribution in electrophilic aromatic substitution. The more general connection table, although very simple, contains more information. The neural network is able to derive from this simple connectivity matrix the information relevant for determining the isomer distribution in this reaction.

The results of the predictions of the neural network were also compared with those obtained from a chemical expert system and those given by three experienced organic chemists. The connection table approach was somewhat better than the expert system and performed about as well as the chemists.

In a second paper[28], a more general representation was searched for use in studies of chemical reactions. Three different types of chemical reactions were investigated: 1) Markovnikov addition of hydrogen halides to alkenes, 2) Diels-Alder and retro-Diels-Alder reactions, and 3) Saytzeff E1 eliminations to form alkenes.

The same type of representation for the starting materials and the products of all these three reactions was chosen at the input and output units. For all those atoms participating directly in the bond rearrangement scheme or immediately connected to it the atomic number and their connectivity was given.

For all three datasets of reactions, all training examples could be correctly predicted. In the test sets, one example each in the first and in the third series of reactions was incorrectly predicted. In both these reactions the structures were such that the reactions under study could not be applied any more (no double bond for a Markovnikov addition; no hydrogen atom for a Saytzeff elimination). However the neural network predicted them anyway. This underscores that neural networks are good for interpolation but should be used for extrapolations only with care. It seems important to train a network with both successful reactions and cases where no reaction occurs.

In the study[30], M. Bos and coworkers report about the use of the back-propagation algorithm for the prediction of concentrations of K^+, Ca^{2+}, NO^{3-}, Cl^-, and H^+ ions based on the corresponding ion-selective electrode potentials. Bos and coworkers set up a few different nets (including three-layer ones) and study the behavior of outputs with respect to the input potentials that were autoscaled. For output the logarithms of concentration was used in order to adapt the actual values that span more than two orders of magnitude. The mean relative error they have obtained was +6 % what they consider acceptable for the method.

Bos and Weber[31] report how to circumvent the lenghty training procedure in the back-propagation learning. They propose that adapting weights be substituted by the so-called genetic algorithm. The genetic algorithm tries to obtain an optimal neural net from a pool of randomly created neural nets by applying three genetic procedures: crossover, mutation, and survival of the fittest. The crossover is implemented as a switch of two randomly selected equipositioned parts (weights) in two randomly selected neural networks. The mutation is replacement of a randomly selected part in a randomly selected neural network by a randomly selected value. The survival of the fittest is implemented by a rule that the probability of reproduction of a neural network is dependent on how good it is at solving the particular problem.

Petersen[32] used a counterpropagation neural network for the determination of the proper electronic configuration from the given atom energy levels in Curium.

CONCLUSION

A wide variety of problems has been studied by the neural network approach in the few years that have passed since the introduction of this method into chemistry. The neural network approach is a modelling technique for finding relations between two sets of data, the input and output data. Unfortunately only a few papers try to compare the neural network approach and the results thus obtained with other established modelling techniques, like statistical or pattern recognition methods. However, we believe that many authors would have drawn a lot of benefits from such a comparison. This would also have given them more directives for the proper representation and selection of data, particularly the design of the training and test sets.

The choice of the parameters for the neural network architecture, the number of layers and neurons in each layer as well as the values for the learning rate and the momentum in the back-propagation algorithm, is still very much left to be determined by experimentation. Here, we would like to see reports on guidelines and strategies for the selection of these parameters.

We hope that the initial euphoria about neural networks will now lead to more systematic studies that will show the neural network approach its proper place within the entire range of modelling techniques in use in chemistry, also covering statistics, pattern recognition methods, and more explicit mathematical models.

ACKNOWLEDGEMENT

This paper was written during the stay of J. Z. at the Technical University of Munich as a Visiting Professor. We gratefully acknowledge the support of the Bundesminister fuer Forschung und Technologie which made this stay possible.

REFERENCES

1. W.S. McCulloch, W. Pitts, A Logical Calculus of the Ideas Immanent in Nervous Activity, Bull. Math. Biophysics, 5, (1943), 115-33, ibid., **9**, (1947), 127-47.
2. D.O. Hebb, The Organization of Behavior, Wiley, New York, 1949.
3. J.J. Hopfield, Neural Networks and Physical Systems With Emergent Collective Computational Abilities, Proc. Nat. Acad. Sci., **79** (1982), 2554-58.
4. D.E. Rumelhart, G.E. Hinton, R.J. Williams, Learning Internal Representations by Error Propagation, in Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructures of Cognition, Eds., D.E. Rumelhart, J.L. McClelland, Vol.1 MIT Press, Cambridge, 1986, pp. 318-362.
5. M. Tusar, J. Zupan, Neural Networks, in Software Development in Chemistry 4, Ed. J. Gasteiger, Springer, Berlin 1990, pp. 363-76.
6. E.W. Robb, M.E. Munk, A Neural Network Approach to Infrared Spectrum Interpretation, Mikrochim Acta, [Wien], 1990, 131-55.
7. M.E. Munk M.S. Madison, E.W. Robb, Neural Network Models for Infrared Spectrum In-

terpretation, (to be published).

8. E. Barnard, D.P. Cassasnet, Optical Neural Net for Classifying Imaging Spectrometer data, Applied Optics, **20**(15), (1989), 3129-33.
9. J.R. Long, V.G. Gregoriou, P.J. Gemperline, Spectroscopic Calibration and Quantization Using Artificial Neural Networks, Anal. Chem., **62**(17), (1990), 1791-7.
10. B. Curry, D.E. Rumelhart, MSnet: A Neural Network That Classifies Mass Spectrs, Tetrahedron Comp. Method. (1990) in press.
11. J.U. Thomsen, B. Mayer, Pattern Recognition of the 1H NMR Spectra of Sugar Alditols Using a Neural Network, J. Magn. Res., **84**, (1989), 212-7.
12. M. Otto, U. Hoerchner, Application of Fuzzy Neural Networks to Spectrum Identification, in Software Development in Chemistry 4, Ed. J. Gasteiger, Springer, Berlin 1990, pp. 377-84.
13. H. Lohninger, Classification of Mass Spectral Data Using Neural Networks, in Software Development in Chemistry 5, Ed. J. Gmehling, Springer, Berlin, 1991, in press.
14. N. Qian, T.J. Sejnowski, Predicting the Secondary Structure of Globular Proteins Using Neural Network Models, J. Mol. Biol., **202**, (1988), 865-884.
15. L.H. Holley, M. Karplus, Protein Secundary Structure Prediction with Neural Network, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, **86**, (1989), 152-6
16. D.G. Kneller F.E. Cohen, R. Landgridge, Improvements in Protein Secondary Structure Prediction by An Enhanced Neural Network, J. Mol. Biol., **214**, (1990), 171-182.
17. H. Bohr, J. Bohr, S. Brunak, R.M.J. Cotterill, B. Lautrup, L. Norskov, O.H. Olsen, S.B. Petersen, Protein Secundary Structure and Homolgy by Neural Networks. The a-Helices in Rhodopsin, FEBS Lett., **241**(1,2), (1988), 223-8.
18. H. Bohr, J. Bohr, S. Brunak, R.M.J. Cotterill, F. Fredholm, B. Lautrup, O.H. Olsen, S.B. Petersen, A Novel Approach to Prediction of the 3-dimensional Structures of Protein Backbones by Neural Networks, FEBS Lett., **261**(1), (1990),43-6.
19. J.C. Hoskins, D.M. Himmelblau, Artificial Neural Network Models of Knowledge Representation in Chemical Engineering, Comput. Cem. Engng., **12**(9/10), (1988), 881-90.
20. V. Venkatasubramanina, K. Chan, A Neural Network Methodology for Process Fault Diagnosis, AIChE Journal, **35**(12), (1989), 1993-2002.
21. K. Watanabe, I. Matsuura, M. Abe, M. Kubota, D.M. Himmelblau, Incipient Fault Diagnosis of Chemical Process via Artificial Neural Networks, AIChE Journal, **35**(11), (1989), 1803-12.
22. V. Venkatasubramanian, R. Vaidyanathan, Y. Yamamoto, Process Fault Detection and Diagnosis Using Neural Networks I. Steadystate Processes, Computers Chem. Eng., **14**(7), (1990), 699-712.
23. L.H. Ungar, B.A. Powel, S.N. Kamens, Adaptive Networks for Fault Diagnosis and Process Control, Computers Chem. Engng., **14**(4/5), (1990), 561-72.
24. N. Bhat T.J. McAvoy, Use of Neural Nets for Dynamic Modeling and Control of Chemical Process Systems, Computers Chem. Engng, **14**(4/5), (1990), 573-83.
25. J. Leonard, .A. Kramer, Improvement of the Back-Propagation Algorithm for Training Neural Networks, Comput. Chem. Engng., **14**(3), (1990), 337-41.
26. T. Aoyama,Y. Suzuki, H. Ichikawa, Neural Networks Applied to Quantitative Structure-Activity Relationship J. Med. Chem., **33**(3), (1990), 905-8.
27. T. Aoyama, Y. Suzuki, H. Ichikawa, Neural Networks Applied to Quantitative Structure-

Activity Relationship (QSAR) Analysis, J. Med. Chem., **33**(9), (1990), 2583-90.
28. D.W. Elrod, G.M. Maggiora, R.G.Trenary, Applications of Neural Networks in Chemistry.1. Prediction of Electrophilic Aromatic Substitution Reactions, J. Chem. Inf. Comput. Sci., (1990) in press.
29. D.W. Elrod, G.M. Maggiora, R.G.Trenary, Applications of Neural Networks in Chemistry.2. A General Connectivity Representation for the Prediction of Regiochemistry, Tetrahedron Comput. Method. (1991) in press.
30. M Bos, A.Bos, W.E. Van der Linden, Processing of Signals From Anion-Selective Electrode Array by a Neural Network, Anal. Chim. Acta, **233**(1), (1990), 31-9.
31. M. Bos, H.T. Weber, A Comparison of the Training of Neural Networks for Quantitative X-ray Flourescence Spectrometry by a Genetic Algorithm and Backward Propagation Error, to be published in Anal. Chim. Acta, (1991).
32. 32 K.L. Peterson Classification of Cm Energy Levels Using Counterpropagation Neural Networks, Phys. Rev. A, **41**, (1990), 2457-61.
33. B. Kosko, Adaptive Bidrirectional Associative Memories, Appl. Optics, **26**, (1987), 4947-53.
34. B. Kosko: Constructing an Associative Memory, Byte, September 1987, 137-44.
35. B. Kosko, Bidrirectional Associative Memories, IEEE Trans. Syst., Man and Cyber., **18**(1), (1988), 49-60.
36. D.G. Stork, Counterpropagation Networks: Adaptive Hierarchical Networks for near Optimal Mappings, Synapse Connection, 1(2), (1988), 9-17.
37. S.N. Deming, S.L. Morgan, Experimental Design: A Chemometric Approach, Elsevier, Amsterdam, 1987.
38. D.L. Massart, B.G.M. Vandeginste, S.N. Deming, Y. Michotte, L. Kaufman, Chemometrics: A Textbook, Elsevier, Amsterdam, 1988, pp. 271-91.
39. J. Zupan, Can an Instrument Learn From Experiments Done by Itself?, Anal. Chim. Acta, **235**, (1990), 53-63.
40. J. Zupan, Clustering of Large Data Sets, Research Studies Press (J. Wiley), Chichester, 1982.
41. J. Zupan , M. Novic, Hierarchical Ordering of Spectral Data, in Computer Supported Spectroscopic Data Bases, J. Zupan, Ed., Ellis Horwood, Chichester, 1986, pp. 42-63.
42. J. Zupan, M. Munk, Feed-back Search of Hierarchical Trees, Anal. Chem., **58**, (1986), 3219-25.
43. C. Garcia, M. Morrari, Internal Model Control. 1. A Unifying Review and Some New Results, Ind. Engng. Chem. Process Des. Dev., **21**, (1982), 308-23.
44. R. Fletcher, C.M. Reeves, Function Minimzation by Conjugate Gradients, Comput. J. **7**, (1964), 149-54.
45. T.J. Sejnowski, R. Rosenberg, NETtalk: A Parallel Network That Learns to Read Aloud, JHU/EECS-86/01 Technical Report, 1986 pp 32; additionaly published in Neurocomputing: Foundations of Research, J.A. Anderson, E. Rosenfeld, Eds., MIT Press, Cambridge, Third printing, 1988, pp. 661-672.
46. P.Y. Chou, G.D. Fasman, Biochemistry, **13**, (1974), 211-45.

ニューラルネットワークによるタンパク質の高次構造予測

図書館情報大学　中山伸一、吉田政幸

タンパク質の三次構造予測は、タンパク質工学を始めとする諸分野から大きな興味が寄せられている重要な問題である。これまで、この問題に対して次のような解法が考えられてきた。すなわち①三次構造既知のタンパク質との一次構造の類似性による一次構造からの三次構造予測、②アミノ酸の二次構造傾向をもとにした一次構造からの二次構造予測、③アミノ酸の内外位置傾向をもとにした一次構造からの内外予測、④パッキングの考えにもとづく二次構造からの三次構造予測、⑤分子のエネルギー計算による一次構造からの三次構造予測などである。

さて、最近バックプロパゲーションという階層構造型のニューラルネットワークの学習規則が開発され、そのパタン認識への応用が広く行われるようになってきた。タンパク質の高次構造予測についても、その応用が検討されている。

②の方法への応用の検討は比較的多く、HolleyとKarplusによるαヘリックスとβシート構造の予測[1]、それにランダムコイル構造を加えた三構造の予測（QianとSejnowski[2]、Bohrら[3]）、さらに笹川と田嶋による三構造およびそれにβターン構造を加えた四構造、水素結合パタンに基づくKabschらの八構造の予測[4]の研究などがある。

これらの研究では、入力に構造を予測したいアミノ酸配列を、出力に対象とする構造を割り当て、それぞれの層にそれらを意味するユニットを用意している。

たとえばQianらは、一次構造上の一つのアミノ酸を表現するのに、20種類のアミノ酸とアミノ酸無し（NおよびC末端の学習を想定している）を意味する計21個のユニットを考えた。実際の予測には前後のアミノ酸配列情報も必要であるとし、片側6個のアミノ酸を考慮して配列幅を13とし、入力層には上述のユニットの組を13、すなわち273個のユニットを用意した。一方、出力層にはαヘリックス、βシート、ランダムコイルを意味する3個のユニットを用意した。彼らは中間層のユニット数を0（入力層と出力層が直結）から60まで非連続的に変えたネットワークにそれぞれ学習をさせ、中間層のユニット数にあまり関係なく60%程の予測率を得た。なお学習用のタンパク質は91種で残基数にして約18000、予測用のタンパク質は15種で約3500残基であり、学習は一七万回（残基）ほど行っている。

他の研究においてもほぼ同様のニューラルネットワークが用いられ、同じ様な結果が得られている。ただ、Bohrらは一つの構造の予測ごとに一つのネットワークを使うことにより予測率が73%に、また笹川らの研究では構造数が4個や8個の場合に予測率が30%程度になっている。

われわれも四構造の予測の検討を行ったが、学習対象のタンパク質数が20と少なかったため、30%程の予測率しか達成されなかった[5]。その後学習対象を78に増やして同程度の予測率を得ている。また、中間層が2層の検討も行ったが、若干の予測率の向上が見られるにすぎなかった。むしろ、ネットワークの初期の重みづけの違いによる予測率の差の方が大きいようである。

McGregorらは各種βターンの構造予測を検討している[6]。彼らはβターンをタイプⅠとⅡ、その他の3つに分類し、βターン以外の構造を加えて、それぞれに相当する4個のユニットを出力層に用意した。アミノ酸はアミノ酸を表わす20種だけで表現し（NおよびC末端は学習対象としない）、入力層には配列幅を4として80個のユニットを用意した。中間層のユニット数が0と8のそれぞれの

ネットワークを約600残基の学習用データで一万回学習させると、中間層のユニット数にあまり関係なく100残基程の予測用データを約25%の予測率で予測した。

さらにこれらのような予測の変形として、Bohrらによる近隣アミノ酸との距離マトリクスの予測研究もある[7]。彼らは中心アミノ酸からある一定以上近い距離にある手前の30個のアミノ酸を意味するユニットと、αヘリックス、βシート、ランダムコイルを意味するユニットの計33個のユニットを出力層に用意した。入力層にはMcGregorらと同様のアミノ酸表現で、配列幅を61として1220個のユニットを用意した。中間層のユニット数を300とし、ネットワークを13のプロテアーゼのデータを学習対象として学習させると、学習対象の一つとよく似たタンパク質について100%近い予測率を得たとしている。この場合は学習対象と類似したタンパク質を予測対象にしているため厳密には予測とはいえないが、この結果から計算により三次構造を組み立てていることは興味深い。

②ばかりでなく③の方法についてもニューラルネットワークの応用が検討されている。Holbrookらはアミノ酸の表面/内側、及び表面/中間/内側の予測を研究した[7]。彼らは表面と内側にそれぞれ相当する意味をもつ2個、もしくはそれに中間を加えた3個のユニットを出力層に用意した。入力層はQianらと同様のアミノ酸表現で、幅を1から13まで変えた場合をそれぞれ用意した。中間層が無いネットワークの学習により表面/内側で72%、表面/中間/内側で54%程の予測率を得た。使用した学習用タンパク質は19種(約3000残基)で、予測用タンパク質は5種(約1000残基)である。

われわれは、三次構造予測におけるニューラルネットワークの利用可能性を検討している。現在行っているのは、二面角により32に分類した構造の予測である[9]。これは②の二次構造の分類を詳細にしたものとも考えられる。出力層には構造パターンに対する32個のユニットを、入力層にはMcGregorらと同様のアミノ酸表現で、幅を9、13、31と変えた場合のユニットをそれぞれ用意した。中間層のユニット数が0、15、30個のそれぞれのネットワークを78個の学習用タンパク質(約12000残基)で約十二万回(残基)学習させると、12個の予測用タンパク質(約2500残基)を中間層のユニット数や入力層の幅にさほど関係なく20%程の予測率で予測した。ただし、予測結果の詳細な解析により、このような構造パターンではパターンの種類別の学習回数が異なり、学習が偏ったものになることが分かってきた。また、構造パターンが多いので学習の速度も非常に遅くなり、かなり多くの学習回数を必要とすることも分かってきて、現在学習回数を増やして検討中である。

①や④、⑤の方法にはまだニューラルネットワークが応用されていないようであるが、今後はこれらの方法にも広く応用されて行くと考えられる。またこれまでは、バックプロパゲーションを用いる階層構造型のニューラルネットワークしか利用されていないが、ボルツマンマシンのような他のタイプのニューラルネットワークの利用や、ニューラルネットワークの特徴を活かした新たな高次構造予測法の開発も期待される。

1 L.H.Holley,M.Karplus. Proc.Natl.Acad.Sci.USA, vol.86, 152-156(1989).
2 N.Quin,T.J.Sejnowski. J.Mol.Biol., vol.202, 865-884(1988).
3 H.Bohrら. FEBS Lett., vol.241, 223-228(1988).
4 笹川,田嶋. 第17回生体分子の構造と機能に関する討論会講演要旨集(1990).
5 中山ら. 第12回情報化学討論会講演要旨集(1989).
6 M.M.McGregorら. Protein Eng., vol.2, 521-526(1989).
7 H.Bohrら. FEBS Lett., vol.261, 43-46(1990).
8 S.R.Holbrookら. Protein Eng., vol.3, 659-665(1990).
9 中山ら. 第13回情報化学討論会講演要旨集(1990).

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

（化技研）田辺和俊

1．目的

コンピュータを利用して赤外スペクトルから未知物質を同定するには、大規模なスペクトルデータベース（ASTMやSadtlerなど）を検索する方法を用いることが多い。この方法は実用的に利用されているが、実行時間の点でさらに速い同定方法が求められている。

我々は最近注目されているニューラルネットワーク技術を利用して、それにもとづくパターン識別による赤外スペクトルの同定について研究を行っている。

従来のデータベース検索と比較すると、ニューラルネットワークを利用したスペクトルの識別では、ピークの検出のような人為的な特徴抽出を行う必要がないため誤りが少なくなること、原理的要因から実行時間が大幅に短縮されること、などの利点が期待できる。

2．方法

2．1　ニューラルネットワークシミュレータ

我々が用いたニューラルネットワークシミュレータは富士通のNEUROSIM/Lであり、これをニューロボード（ニューラルネットワークの学習と実行を約300倍高速化するオプションカード）付き富士通FMR70HD上で稼働した。このNEUROSIM/Lは階層型ニューラルネットワークであり、3層（入力層、中間層、出力層）パーセプトロンモデルが採用され、学習にはエラーバックプロパゲーション方式が用いられている。

2．2　ネットワークの構造

今回用いたニューラルネットワークは3層構造のパーセプトロンモデルを2段に組み合わせて全体を構成する複合ネットワークの形態をとるようにした。初段と次段の各々のニューラルネットワークのユニット構成はそれぞれ250x40x40とし、初段ネットワークの下に40個の次段ネットワークを配置するようにした。

2．3　学習データ

パターン認識に用いる赤外スペクトルについては、構造の類似している化合物のスペクトルの識別が可能かどうかを検討するために、当所で開発中のスペクトルデータベースシステム(SDBS)に登録されている化合物約28,000種の中から炭素数5-7、窒素数1-2、酸素数1-3の組成の化合物1,000種を選び出し、波数領域1800-550cm^{-1}のスペクトルパターンを間隔5cm^{-1}でサンプリングした250点の縦軸データを入力層に与えた。

2．4　学習方法

初段、次段のネットワークは以下のような方法でそれぞれ個別に学習を行った。初段のネットワークでは適当な方法で分割して、全体のカテゴリーが40個になるようにし、すべてのデータを用いて学習を行い、初段のネットワークを完成させた。次段のネットワークでは、初段のネットワークで同一のカテゴリーに属しているものを学習データとして、個々のパターンを識別するように学習を行った。したがって40個の次段ネットワークについてそれぞれ学習を行った。

2．5　ネットワーク条件の検討

2．5．1　中間層の大きさの影響

ニューラルネットワークの識別能力に最も影響するネットワーク条件は中間層の大きさである。一般に中間層を増加させると認識能力が向上することが知られている。しかし、中間層を多くすると、必然的に計算回数が増加し、学習時間と認識時間が長くなる。したがって、適切な大きさの中間層を設定する必要がある。そこで中間層の大きさの影響を調べるために、1段のネットワーク（出力層15ユニット）について10個のパターンを用い、中間層の大きさを5から50ユニットまで変えながら学習を行ってみた。

その結果、中間層の大きさが5ユニットの場合には20,000回の学習を行っても最終的なエラー総和が非常に大きく、収束しないが、中間層の大きさが15ユニット以上の場合にはいずれも収束し、出力層の大きさとほぼ同じ大きさの中間層を用いれば十分であることが分かった。

2．5．2　学習条件の影響

本研究で構築しているニューラルネットワークの学習はエラーバックプロパゲーション方式で行っているが、この方法は次式の誤差が限りなく小さくなるようにユニット結合の重みWを変化させるアルゴリズムである。

$$\Delta W^{k}_{ij}(t) = -\varepsilon D(t) + \alpha \Delta W^{k}_{ij}(t-1)$$

ここで、Dは正解との誤差、εは結合の重みを修正する時の比例定数、αは一回前の修正値に対する安定化係数である。εが大きければユニットの結合は大きく修正され、学習は速く進む。しかしεが大きすぎると誤差修正が収束しなくなり、振動することもある。αはこの振動をおさえる働きがある。

したがって安定化係数αと誤差修正係数εとがニューラルネットの学習の状況に影響を与える条件因子である。しかしこれら2つの学習係数に関して最適な値を決定する方法は確立されていない。そこでこれらαとεを種々変えながら学習を行い、最適条件を求めた。

その結果、$\alpha = 0.2\text{-}0.3$、$\varepsilon = 1.9\text{-}2.0$の付近で安定して速かに収束に達することが分かった。

3．結果

3．1　ネットワークの構築

以上のような方法で2段のニューラルネットワークを学習させた結果、次段のネットワークには24-40個のパターンから成る40個のカテゴリーが形成され、1,000個の赤外スペクトルパターンを識別するニューラルネットワークを構築することができた。

3．2　実行時間

実行時間に関しては、ニューロボードを使用し、ネットワークのデータ読み込みを前処理として除外すれば、テストデータ1件当り0.1秒以内というきわめて短時間の内に1,000件の赤外スペクトルとの照合、識別が可能であり、この結果から、パソコンの上で赤外スペクトルの実用的な検索システムが開発できることが分かった。

以上の結果にもとづき、我々はニューラルネットワークを利用したパソコン用赤外スペクトル検索システムを目下開発中である。

ニューラルネットワークによる類似化合物の分類

富士通株式会社　湯田　浩太郎

序論：　化学分野での『類似化合物の分類』問題は様々な解析業務の基本となる重大なテーマであるが、この問題に対するアプローチは以外な程に少ない。　これは『類似』という言葉自体に曖昧な情報を含み、定量的に扱う事が困難で、しかも解析作業の内容により『類似』という言葉の持つ意味が異なり、様々な分野の知識を必要とするからである。

例えば、化合物自体の構造式が似ているという直接的な問題、化合物のスペクトルデータや薬理活性が似ているという間接的な問題等である。　このような問題に対する有力なアプローチとしてパターン認識によるアプローチが知られている。

ここでは最近展開されているニューラルネットワーク手法のうち、分類問題に適しているバックプロパゲーション手法を用いてこの『類似化合物の分類』に適用した。　今回はこの『類似』という問題に対し、化学構造式の類似問題と、化合物の薬理活性に関する類似問題との２テーマに絞り、解析には実際の化合物を用いて論じる。

実験１：　類似構造式を持つ化合物の分類

分類対象となる化合物は構造の異なる５種類の化合物群から構成されている。　この５群の化合物として①　直鎖及び分岐脂肪族化合物（２０化合物）、②ベンゼン環を持つ化合物（２５化合物）、③　縮合芳香族環を持つ化合物（２０化合物）、④ポリオキシド化合物（９化合物）、⑤ステロイド誘導体（２２化合物）の総計９６化合物用いた。

分類に用いる数値データ（記述子）は化合物構造式よりＡＤＡＰＴ（Automated Data Analysis using Pattern recognition Toolkits)を用いて７３種類創出された。

この７３種類の記述子を初期記述子セットとし、様々な特徴抽出手法を経て最終記述子セットとして１０種類の記述子が選択された（表１）。

表１．構造類似化合物（５グループ）の分類に用いられた最終記述子リスト

１．TOTAL NUMBER OF PATHS	６．THIRD GEOMETRIC AXIS
２．NUMBER OF OXYGEN ATOMS	７．FIRST/THIRD GEOMETRIC AXIS
３．NUMBER OF DOUBLE BONDS	８．MINIMUM NUCLEOPHOLIC SUPERDELOCALIZABILITY
４．FIRST GEOMETRIC AXIS	９．TOPOLOGICAL SYMMETRY PARAMETER
５．SECOND GEOMETRIC AXIS	１０．OTHER STRAIN ENERGY

この１０記述子を用いてバックプロパゲーション手法により、前記５グループの化合物について分類を試みた。　この結果、用いた化合物は５グループに完全に分類された。参考として、１０記述子による非線型写像による出力を図１に示す。　尚、プログラムの実行条件としては、入力層（１０ユニット）、中間層（３ユニット）、出力層（５ユニット）、学習定数（０．２５）、安定化定数（０．５０）であり、収束に要した学習回数は２４，６７８回であった。

また、中間層のユニット数と学習回数との関係について考察を行ったが、学習回数は中間層のユニット数の増大（５、１０ユニット）に伴い減少する事が分かった。　しかも、ユニット数がある一定数以上になると、学習回数の減少傾向が止まる事も示された。

実験２：　類似薬理活性を持つ化合物の分類

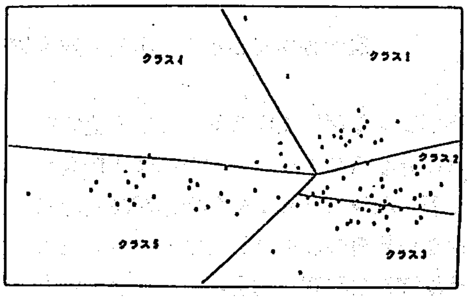


図１．非線型写像法による出力

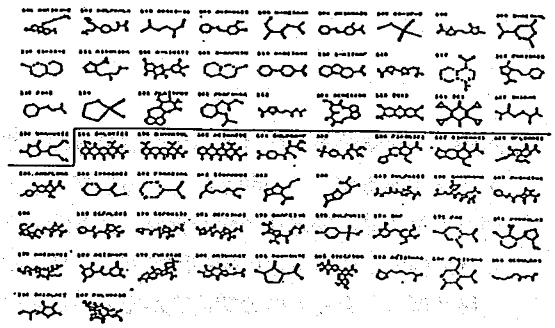


図２．類似薬理活性の分類に用いられた化合物

互いに構造式の異なる化合物群を異なる活性を有する２化合物群に分類する事を行う。ここでは薬理活性として発癌性と抗菌活性とを選んだ。　この２活性の組み合わせには特に意味は無い。　用いたデータは発癌性化合物として２８化合物、抗菌活性化合物として３７化合物、総計６５化合物用いた。　図２には用いた化合物の構造式が示されている。図中線の上部が発癌性化合物で、下部が抗菌活性化合物である。　この図からもわかるとおり、様々な構造式を持つ化合物が両クラスに含まれている事が分かる。

分類に用いた記述子は実験１と同様、ＡＤＡＰＴを用いて７３種類創出された。　続いて、様々な特徴抽出手法により最終記述子セットとして１４記述子が選択された。

この最終記述子１４個を用いてバックプロパゲーション手法による分類が行われ、全化合物を発癌性及び抗菌活性の２クラスに分類する事が出来た。　尚、実行条件としては入力層（１４ユニット）、隠れ層（３ユニット）、出力層（２ユニット）、学習定数（０．２５）、安定化定数（０．５）を用い、学習回数は９３１回であった。

結論：　ニューラルネットワークが化学における『類似化合物の分類』に対し充分に利用可能である事を示した。　ニューラルネットワークの特徴からパターン認識手法の代表的手法である線型学習機械法より優れている事は明らかである。　例えば実験１で示したように多クラス分類も可能であり、その分類／予測率も大幅に向上する事は多くの実験からも証明されている。　その他様々な利点がニューラルネットワークには存在する。

しかし、ニューラルネットワークが完全に化学の分野に根をはるには更に幾つかの条件をクリアする事が必要である。　例えば分類問題にしても工学等の分野では単純に分類／予測率が高く、その信頼性も高ければ良しとする問題が多いが、化学の分野ではその外に“何故分類出来たか？”という疑問に答える事が必要である。　分類に関する重要な情報はネットワーク構造の中に潜んでいると考えるのは自然である。　しかし、現時点においてネットワーク構造から欲しい情報を直接取り出す事は困難である。　これを能率良く行うにはネットワーク構造中に潜む情報を取り出す技術の確立、さらにはネットワークそのものの信頼性を上げる／保証する手法や制限事項等の確立が早急に必要となってくる。

ニューラルネットによる
複合酸化物の酸強度の予測

（愛知工大）鬼頭繁治　（名古屋大工）服部　忠

一般に触媒は複数の化学成分から構成されている．したがって触媒の設計を行う場合には，各構成成分が単独で発現する触媒機能の他に非線形現象としての複合効果により発現される触媒機能も考慮する必要がある．酸化物を例に取って考えてみる．単独酸化物については，酸性あるいはｒｅｄｏｘ性などといった触媒機能について一応実測データが存在したり場合によっては理論的・経験的に推算が可能である場合が多く，触媒設計に当たってはこれらを利用することができる．一方多成分系酸化物の場合には，その組合せの数の多さなどから実測値の報告は非常に少ないのが実状であり，また複合効果による酸発現のメカニズムについてはほとんど未解明といってもよく理論的予測は不可能である．２成分系酸化物に限ればいくつかの複合効果による酸発現の程度を予測するための半経験的方法が提案されているが，触媒設計に適用するには予測の信頼性が十分ではない．以上は，我々が触媒設計支援エキスパートシステムＩＮＣＡＰ［１，２］の開発において直面している問題である．

このように複合酸化物の酸強度を予測することは非常に困難な問題であるが，ここで複合効果による酸発現現象についてわかっていることを整理してみる．すなわち，

(1) 複合酸化物の酸強度に影響を与える因子は経験的に推定できる．それらを挙げると，金属イオンに関係するものとしては，イオン半径，価数，配位数，電気陰性度であり，酸化物に関する物性としては，酸素イオンの部分電荷，生成熱である．
(2) ２成分酸化物を中心としていくらかの実測酸強度データが報告されている．
(3) しかしこれらのデータは指示薬の変色により測定されたものであり，あいまいさを含んでいる．例えば，「$MgO-TiO_2$のｐＫａ値は1.5から3.3の間である」のように表現されている．

理論的手法を欠いたまま，これだけの情報のみを利用して未知の複合酸化物の酸強度（pKa 値）を予測することは非常に困難である．ここで，物理化学的知識が乏しいということを情報処理の分野の言葉で表現すると，酸強度予測という問題を解決するためのアルゴリズムが存在しないということであり，またその他の情報も乏しいということは「知識」が少ないということになる．したがって手続プログラムや知識ベースシステムの手法を利用して酸強度の予測を行うことは難しいといえる．

このような状況のもとで頭に浮かぶものとして，新しい問題解決手法として最近注目を集めているニューラルネットがある．ニューラルネットの特徴については本特集の別論文で紹介されているが，ここで簡単にまとめるとつぎのようになる．

(1) 問題解決のためのパスを学習によって獲得する（関数近似システムとして機能する）．
(2) 誤差・ノイズを含んだ情報の処理が可能である．
(3) パターンや記号の変換・処理に向いている．

われわれは，ニューラルネットのこのような特徴とさきに述べた複合酸の酸強度予測という問題の特質を対比することにより，ニューラルネットを利用して予測を行うことを試み

を始めた．［３］

いろいろな原理や構成に基づいたニューラルネットが提案されているが，われわれは最もよく使用されている学習アルゴリズムにerror back propagationを利用した多層構造のニューラルネットを用いている．pKa値で表した酸強度をニューラルネットで処理するに際して注意しなければならない点は，データとニューラルネットの性質を考慮してデータの表現形式およびニューラルネットの構造とパラメータを適切に設計することである．まだニューラルネットが工学問題に応用されだして日が浅いことも相まってこれらに関する手順というものはなく，対象問題に関する知識の他にニューラルネットに関する知識も利用して経験的に設計を行っていかなければならない．まず酸強度予測問題をつぎのように設定する．２成分酸化物の酸強度（pKａ）は各酸化物成分のイオン半径，価数，配位数，電気陰性度，酸素イオンの部分電荷および酸化物生成熱，すなわち１２個を変数とするある未知の関数で表される．ここでこれらの物性値は連続値を取る．一方pKａ値は上で述べたような性質を有するので連続値とはせず，各pKａ値で変色する変色パターンとして表す．この結果，未知の関数は多値関数となる．このような設定のもとに，入手できる実測酸強度データを使用して未知の関数の形を学習させる．ニューラルネットの構造は，入力層，隠れ層（層数およびユニット数は可変）および出力層からなる．そしてさまざまの条件のもとで２成分酸化物の酸強度データを学習させたところ，そのニューラルネットは使用した酸強度の学習データを完全に再現することができた．この場合は，酸化物の組合せ全体を他の問題と比べてやや多い約３０００回繰り返して使用して学習を行うことが必要であった．つぎに一部の実測データを除いたもので学習を行ったニューラルネットを用いて学習に使用しなかった２成分酸化物の酸強度の予測を行ったところ，予測値と実測値の間に非常に良好な一致が見られた．この事実から，ニューラルネットを利用することによってこれまで非常に困難であった複合酸化物の酸強度の予測が可能となることがわかる．

以上の実験の過程において，各種パラメータの値や学習データの範囲を変化させることによってニューラルネットや問題の性質を調べた．そのなかで特に重要な結論は，ニューラルネットによる予測は，学習データが属する「領域」に大きく依存するという点である．すなわち学習に使用したデータの属性と大きく離れた属性を有するものを予測することは困難である．たとえていえば，ニューラルネットの学習とは学習データを多項式によって相関するようなものであり，相関に使用したデータ（変数）の範囲では良好な予測結果を与えるがその範囲から離れたものについては信頼性が悪いということであろう．

ニューラルネットは非常に強力な手段になり得るものであるが，その利用にあたってはニューラルネットの性質をある程度理解した上で適用するする必要があるであろう．またここでは述べなかったが，ニューラルネットによる情報処理メカニズムを物理・化学における「意味」に写像することはさらに大きな課題である．

【参考文献】

[1] Kito, S., Hattori, T. and Murakami, Y.: Appl. Catal., 48 107 (1989)
[2] Kito, S., Hattori, T. and Murakami, Y.: Proc. 3rd Int. Conf. Ind. Eng. Appl. Art. Intell., Vol. 2 611 (1990)
[3] 鬼頭，服部，村上：第１３回情報化学討論会講演要旨集，p.277 (1991)

ニューラルネットによる実験データの整理と推定

化学技術研究所　伊藤建彦、佐々木　基

＜はじめに＞

ニューラルネット、ファジーなど曖昧な情報を処理するシステムに対する関心が最近高まっている。我々は以前から触媒反応のような複雑な系の計算機処理においては各種のデータを必ずしも全ての因子を明確にすることなく曖昧なままに処理する必要があると考えていた。ニューラルネットはこの様な目的に適していると思われた。そこで触媒反応データの解析と結果の推定への利用を試みたところ比較的よい結果が得られたのでここに紹介する。

＜触媒反応とニューラルネット＞

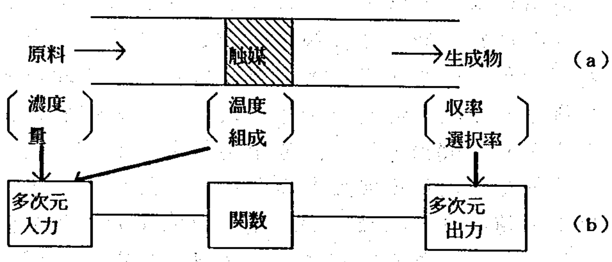


図１　触媒反応とデータ処理系

触媒反応は図１ａに見られるように触媒、原料、温度．．．など各種の入力に対し生成物、収率、選択率などが出力される系である。この系は、図１ｂのように多次元の入力から多次元の出力を生成する関数系とみなすことが出来る。もし触媒反応が各々の要素の展開式で記述できるなら、その関数系の記述は容易である。しかし、触媒反応では不明の因子も多くそのようなことは困難である。従って、多次元の空間に於いて比較的少数のデータから結果を示す空間全体の補間（推定）を行なう方法が必要である。

一方、ニューラルネットは関数を変数の展開式で示す必要もなく全体の状態（重み、状態遷移関数、ｅｔｃ．）で表わすため、内容の不明瞭な入力を含む多次元から結果を含む多次元への変換、即ち結果の空間の補間に有効であることが期待できる。また、その場合、結果の全体が滑らかに連続したデータと見なせるなら、比較的少数のデータから全反応を示す関数を作ることが出来るのではないかと考えられる。更に、入力データの変更に対してもパラメーター等の一部を変更するのみで対応出来る柔軟性を持っており、データ解析のシステムとして適していると考えられる。

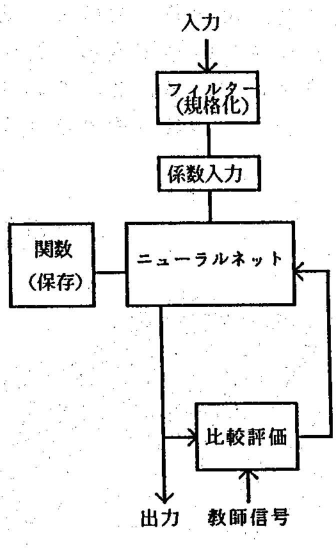


図２　システム概略図

＜システムおよび計算方法＞

ニューラルネットに関しては別に解説があると思われることから説明は省略した。今回使用したニューラルネットはバックプロパゲーション型のものであり、計算にはＦＡＣＯＭ－Ｍ７８０／２０を使用した。プログラムは文献[1]に記載されていたものを参考としてＣ言語で作成し、入力データをシステムに合うよう規格化するフィルター、対話型にパラメータを変更するための機能、得られた関数をその後の各種計算に利用できるよう保存する機能等、を追加した。

＜検討結果＞

検討した反応はＣｕ－ＺＳＭ－５型ゼオライトを用いるＮＯの直接分解反応である。

$$NO \longrightarrow N_2 + O_2 + (N_2O)$$

この反応は副生物は少なく反応は単純であるが、生成したO_2が反応を阻害すると共にＣｕ担持量、ゼオライトのSiO_2/Al_2O_3比（ケイバン比）、反応条件などが複雑に反応率に影響を与え、全体の予測の難しいシステムでありテスト例として適当と思われる。学習に用いたデータの数は１００個で、入力として（１）反応温度、（２）ケイバン比、（３）銅担持量、（４）共存酸素濃度、（５）ＮＯ濃度、の５個、出力としてＮＯの分解率をとった。

計算結果の一部を以下に示す。学習は出力と理想出力との誤差の二乗和が１％以下となるまで行なった。状態遷移関数としてはシグモイドを使用し、中間ユニットは３２個である。学習には約１日を要した。なお、予め除いておいた一つの実測値を、先の学習によって得られた関数を用い予想したところ実測値とよい一致を示した。図３はこの学習によって得られた関数を用い、銅担持量２．５％、酸素濃度０％、ＮＯ濃度１０５５ｐｐｍでのＮＯ転化率の反応温度及びケイバン比に伴う変化を求めた結果を示している。この面上には実測値は含まれないが、結果は我々の予測と合致するものであった。

一方、データを整理する上では２変数の関係を知りたいことがしばしばある。そのような目的での利用例を図４に示す。先の学習で得られた関数を用い、銅担持量、ケイバン比、ＮＯ濃度を一定として、４００、５００、６００℃における反応率と酸素濃度の関係を求めた。図から、分解率の酸素濃度依存性は反応温度により変わり、反応温度が高くなると分解率の酸素濃度依存性が小さくなることが判る。この結果も研究者の予想とほぼ一致するものである。これらの結果はニューラルネットの反応結果の整理と予測（補間）システムとしての利用の可能性を示しているものと考えられる。

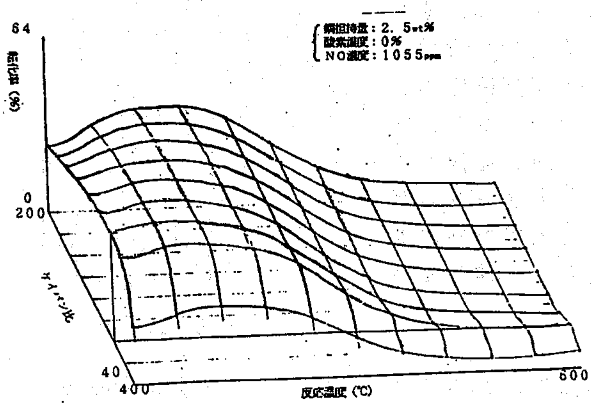


図３　ＮＯ分解率のケイバン比、反応温度に伴う変化（予測）

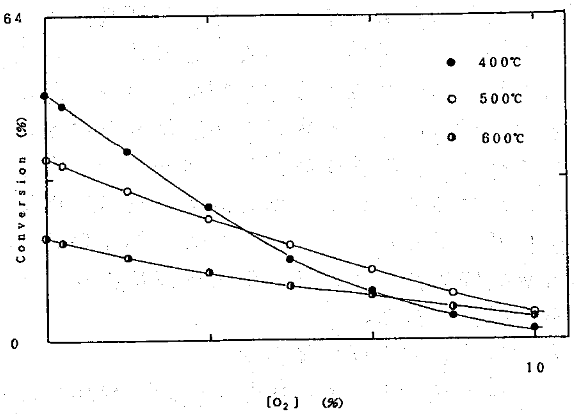


図４　ＮＯ分解率の酸素濃度依存性（予測）

＊　１）”認識と学習”　安西祐一郎　岩波書店　（１９８９）

部会行事

第13回情報化学討論会総括

世話人による報告

第１３回情報化学討論会報告

§はじめに

豊橋での開催は、昭和５７年の第５回に次いで２度目となります。前回の時に初めて、構造活性相関シンポジウムとの併催が行われました。そのときは参加者数も少なく、大学の教室を借りて何とか二つの学会の併催が出来ましたが、今回はそうも行かず外に会場を求める事となりました。

§参加者数について

新幹線のローカル駅（？）しかない豊橋での開催とあって、これまでより減るのではないかと恐れていたのですが、幸いにして構造活性相関シンポジウムとあわせて４６２名というこれまでに優るとも劣らない数の御参加を頂きました。又発表件数もあわせて１１０件（口頭発表が各３３件、ポスターが情報化学討論会のみで４２件、これに特別講演が２件です）とこれはこれまでで最大となりました。紙面を借りて発表者及び参加者各位のご協力に感謝いたします。

§会場について

大学キャンパス内での開催は２００名以上を収容可能な教室が１つしかない事から考えられず、必然的に学外に求める事となりました。幸いにしてホリディ・インシアターという２会場が同時に取れる格好の貸しホールが有りましたので、昨年開催が決まってすぐに予約を致しました。ここはホテルの経営になっているので、参加者に対する宿泊割引も可能であろうとの思惑もありました。実際には３０階建ての新館のオープン直後であったため、期待したほどには安くはなりませんでしたが。

もっとも、東京・大阪に比べては割安ではなかったかと思います。それにホテルの部屋から会場へ直行という国際会議的な雰囲気で大変良かったとのお褒めの言葉も頂きました。

ただ、活発な質疑が行われて時間が長引き、初日のスケジュールが苦しくなってしまいました。会場が午後６時から映画館になるという特殊事情から、最後のセッ

ションの座長の方にご迷惑をおかけした事をここにおわび申し上げます。

§ポスターセッションについて

本討論会の在り方としては、口頭発表を少なくしてポスターに時間を掛けた方がふさわしいのではないかと感じておりながら、ポスターセッションの会場としてはホテルの宴会場を借りたので、借料が高かった事と会期の関係で充分な時間と広さが取れませんでした。少なくとも朝からポスターを貼っておけるようにすべきであったと反省しております。

§懇親会について

最も（？）重要なイベントである懇親会は２００名を越える盛況で、担当者としては大成功だと思っていましたが、飲物に比べ食べ物が少なかったとのお叱りを一部の方々から受けました。言い訳を致しますと、料理の予約は２日前まででその後の追加は一切不可能との事で、過去の実績の最大数を赤字覚悟で予約したのですが追いつきませんでした。何しろ予算額としては最も大きな比重を占める項目ですので、参加者が少なくて収入が見積を下回りますと大変な赤字となりますのでやむをえませんでした。

§天皇陛下と台風について

会期が天皇陛下の伊勢神宮御参拝と重なり、直前に新幹線のテロ事件などもあったため心配しましたが、幸い何事もなく始まりほっといたしました。ところが今度は季節外れの台風が最終日に豊橋を直撃し、最終日の最後のセッションがかなり慌ただしいものとなってしまいました。新幹線も運休にはならず、結果的には大した事にはならなかったのですが、一時はだいぶ気を揉みました。

§おわりに

前回の世話人である姫路工業大学の安田則武先生には、貴重な資料をたくさんお送り頂き、また色々教えて頂きました。本当に有り難う御座いました。

今回の両学会の開催に当たり、日本化学プログラム交換機構（ＪＣＰＥ）より多大のご援助を頂きました。ここに厚く御礼申し上げます。

今回の開催に当たっては、実行委員会を作り分担して作業を進めて参りましたので、以下にその氏名を記させて頂きます。また、実際に受付その他で活躍してくれた女性達（私どもの研究室のスタッフです）と安いアルバイト料でよく働いてくれた学生諸君に紙面を借りて感謝いたします。　（文責　阿部）

佐々木　慎一（総括）　阿部　英次　宮下　芳勝　高橋　由雅
船津　公人　奥山　徹　Carlos A. Del Carpio

座長による報告

28I01～28I02

28I01　二置換ベンゼン類におけるオクタノール－水分配係数の推算
（山形大工）　金谷重彦、工藤喜弘

二置換ベンゼン類の logP 値の推算法の提案とその試用結果の報告である。推算法は、置換基対を３つのクラスに分類して、それぞれのクラスについて３種の位置異性体間の logP 値を関係づける式を構築し、その式を用いて既知の異性体の logP 値から未知の位置異性体の logP 値を推算するというものである。

水素結合相互作用に基づいて置換基対が分類されているが、疎水結合相互作用などの他の相互作用を考慮する必要性、および logP 値推算に要求される精度と本報告で得られた精度の関係などの討論があった。

28I02　有機化合物の水溶解度を求めるシステムの開発
（山形大工）　工藤喜弘、鈴木孝弘

有機化合物の構造式から、(1)実測値の引出し、(2)構造式からの推算、(3)オクタノール－水分配係数Ｐからの推算の３つの方式で log 1/S を求めるシステムの開発経過の報告である。推算の必要性および正確な実測値を得るための苦労話が強調されていた。推算に要求される精度および logP を経由して推算することの妥当性などの質問があった。実測値の原点をたどる話は大変興味深かったが、システムの完成までの多難さをも印象づけたような感がある。

（名大工　服部　忠）

28I03～28I04

28I03　出版物等からのデータの入力に多数の企業の研究者が協力しているシステムの報告である。出版元の了解済みで著作権問題なしという回答に対してその確認や手順などに関して質疑が繰返された。この他に座長としては満足度の差異の解消／発生防止法にも興味をもったが、舌足らずの質問をしてしまった。

28I04　この種の作業は表現法の選択など重要な決断の連続で眠れなくなる程に悩むのが普通であると思うが、うまく克服されたようなので、感心した。ただし、関連発表があるというポスターセッションに行く機会を逸したので、一つの講演はそこで完結するのが好ましいのではないかとやつあたりぎみにふと思った。

（山形大工　工藤　喜弘）

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

佐々木先生は来年3月にめでたくご停年で，そのご退官記念講演をお願いするはずであったが，学内の衆望を集められて，学長にご就任された．　先生は討論会予稿集に書いておられるように，約25年まえからコンピュータ化学の開発を，日本ではいうまでもなく，世界的にも殆ど最初の先駆者として苦しい条件で始められた．　その当時の状況，特に風戸氏のご好意などを予稿を越えた実感を込めて回想された．　先生はご本人では「普通の有機化学者」とおっしゃったが，合成にも分析にも卓抜な業績を持つ有機化学者として，DENDRAL 以後の最初の統合化された構造決定システム CHEMICS 誕生の瞬間である．現在に増しての劣悪な大学の研究環境のなかで，それでも当時としてはかなりの計算機環境で開始されたのであるが，13年後に豊橋にうつられる頃には，学内外の多くの協力者とともにこのシステムはほぼ完成したと理解している．　「夢を見る人」は最初の夢を現実とすると共に，この間に日本の情報化学の指導的人材を多数育てられた．

豊橋では人員の充実と計算機環境の画期的な向上とあいまって，先生の指導のもとに，それに続く大きな「夢」，要求された生理活性を持つ分子を設計する TUTORS と，この分子を最もうまく合成する反応設計・合成設計の AIPHOS の開発がきわめて強力に開始されたのである（Tetrahedrom Computer Mehodology, 3, No. 1, 1(1990)）．　これらのシステムは大筋において完成し，学内外の協力で実用化の日も近いということである．　また，国際的な協力での^{13}C NMR，独自の測定による^{1}H NMRのデータベース作成を協同研究者と永年にわたって行い，これも世界的なものに仕上げた経過を懐かしげに紹介された．

予稿に記された，「有機化学を余り知らないコンピュータ化学者が化学のシステムを開発できるか」の自問には「コンピュータ化学者が仕事に当たって化学の実験に親しむべきだ」と自答された．　また，コンピュータ化学の success story の決定版も時間の問題と結論された．　先生の研究成果を基として永年のご指導を受けた有能な各位の新たな思考によって「がんに効く薬の構造」も「夢」ではなく，あの料亭が店仕舞をするまでに風戸氏と祝杯をあげることができそうである．　世界的な情報化学の創始者であり，よき教育者である先生の今後のご発展とご自愛を祈る．（東海大学開発技術研究所　米田 幸夫）

２８Ｉ０５～２８Ｉ０８

２８Ｉ０５　合成設計のための知識獲得システム　－　ＫＡＳＰ　－

（神奈川大・理）　中山　尭

LHASAやSECSに見られる合成TRANSFORMの知識を個別の反応データベースから獲得するシステムについて考察がなされた。ここで獲得を計画しているTRANSFORMの項目の多くはは、すでに別の表現形式で他所の個別反応データベースシステムにおいて自動獲得され前駆体生成の際に適用されているが、ここではより一般化した知識としての整理、適用が意図されている。また知識の矛盾や欠落があっても与えられた局面での最適な知識の適用が計画されているがその方法論は今後の課題となろう。具体的な事例についての成果発表を期待したい。

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

（呉羽化学工業）　朝永

演者が長年にわたる研究において考案した、分子構造処理のために有用で新規なアルゴリズム、手法がさりげなく公表されている。三次元座標生成のための実用的で簡易な（高速な）手法が鎖状分子、環状分子について述べられた。構造処理に便利で簡明な分子構造の線形表現（立体指標つき）は今後構造データベースを設計する人への推薦に値する。つぎの等価原子の判別で述べられている方法は、分子構造正準化におけるMORGAN法の欠陥を明瞭に克服したものとして注目すべきである。正準化番号とUNIQUE NAMEでみられるMORGAN法へのこだわりを捨てれば、世界の標準として広く通用できるアルゴリズムと思う。

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大）　仲久保正人、仲久保公子、前田浩五郎

演者らはマススペクトルデータベースの高速で使いやすいパーソナルコンピュータシステムの開発を続けてきている。すでに高速な化合物の同定を可能とし、質量分析計と接続しても稼働している。今回の発表は、従来の機能を拡張し、類似化合物のデータを抽出一覧することにより、知識ベースとしての機能を付与するために、CAS化合物名からの部分構造検索を実現しようとするものである。演者らは構造式からの検索のほうが機能として優れていることを十分承知しているが、構造式処理のためのシステムを開発する余裕が無い、数万件の構造式の登録が容易でないことから、化合物名処理のほうを選択している。しかし命名法から利用者の満足のいくシステムを構築することは構造式処理よりはるかに困難ではなかろうか。それにつけても、PUBLIC DOMAIN で利用できる構造式処理システムが公的機関から供給されれば我が国でのシステム開発はもっと加速されると思われるのであるが。

２８Ｉ０８　文字入りの立体化学構造式の解読

（東海大開発技術研）　米田　幸夫

演者は、印刷または手書きの化学構造式をイメージスキャナーでコンピュータに読取り構造式の結合表を自動作成するシステムの開発に成功した。このようなシステムの出現は化学者、情報技術者、出版事業者から要望されていたものであり、実用的なものが実現したことを喜びたい。さらに、このシステムがパーソナルコンピュータとその周辺機器とソフトから構成され、利用者は安価にその恩恵に与れる（本システムは無料で公開される予定である）とのことである。従来の同様の試みは、構造式に制限（文字を含まない、結合の交差が無い）を加えた物であった。種々の思想と技術を複合し、根気のいるプログラミングの上に実現したものと思われるが、さらに完成度を上げるために皆様の協力を期待したい。

（中外製薬　松浦　育敏）

28I09～28I12

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、鈴木、志村、早瀬、大崎

ＪＩＣＳＴの文献情報をもとにした結晶構造のデータベース化に関する発表。データベース化を行う際のデータチェック検出に重点をおく。

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、樋口、西尾、阿部、佐々木

化学構造式の検索のためのデータ数値化として新しいトポロジカルインデックスを導入し、これを構造検索、に応用する基本的な考え方について発表。

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、田中、笹渕

^{13}Ｃ－ＮＭＲの検索同定に関する筆者らのこれまでのシステムに対し、ピーク強度情報の利用を検討した。

28I12 ＣＯＳＹ－二次元ＮＭＲを考慮した^{13}ＣＮＭＲと^{1}ＨＮＭＲとの同時検索・推定システム（神田外語大、化技研）山本、早水、柳沢

^{1}Ｈおよび^{13}ＣＮＭＲを統合し、スペクトルの検索・表示、シフト値の推定、構造情報の表示などの機能をもったＮＭＲデータベースシステムに関する発表。

（化技研　田辺　和俊）

29I13～29I15

29I13　汎用配座発生プログラム改良版 CONFLEX 3 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

昨年に引き続き主として環状分子の配座発生探索プログラム CONFLEXの改良，発展についての発表であった．　改良版では初期配座が低いエネルギーの順に選択されよう工夫され，また鎖状部分も同時に扱えるように改良されている．このプログラムによりシクロウンデカンでは約30個の安定配座が得られているが構造，転移関係等からのグループ分けをすることにより一般に環状分子の配座空間の理解につながることも期待できよう．

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，お茶大理） Claudia Marquardt，今井啓祐，大沢映二
平野　恒夫

MM2 などの汎用分子力場のパラメータは以前に比べて整備されてきたが，まだまだ不充分なのが現状である．　実測の構造データ，赤外振動数等に合うようにパラメータを非線形最小二乗法によって求めるのが SOPE である．本方法により従来より信頼度の高い力場の構築が望まれる．

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） M. Rudzinski，大沢映二

従来の孤立分子の配座計算に対し，結晶中の配座さらに結晶系を含む構造予測の期待が高まっているが，n －ヘキサンとフェロセノファンについて実測の構造格子定数，昇華熱を良く再現する結果が報告された．今後は結晶中の配向，さらに空間群の予測まで期待されるところである．

（呉羽化学　中馬　寛）

29I16～29I18

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・他

力場パラメータの交差項のデータ形式を新たに決め、一組の力場パラメータを用いて、２０炭素のアルカンの分子振動を予測した。実験データとの一致が広い範囲にわたって成立している。

２９Ｉ１７　疎水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

分子動力学計算において疎水相互作用による現象を実用的な計算時間でシミュレートするために、疎水効果を一種のポテンシャルと見なす方法を提案した。このような方法の物理的意味については検討を要するが、もし何等かの正当化ができれば、実用的でおもしろい方法である。

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）麓雅樹、田淵公士、安川民男、（化技研）田辺和俊

分子動力学計算を分子イオンの結晶構造の予測に用いた。分子内の電荷分布の見積方法に不十分なところがあり、また何故力場計算ではなく動力学計算を使わねばならないか、この点にも疑問が残る。

（九工大情報　柏木　浩）

29I19～29I21

29I19　中村和彦ほか3名（呉羽化学など）「毛根状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」

非常に計算量の多い方法を用いながら着実に課題をこなして実験データを裏付けるような配座分布を導き出した「呉羽スタイル」の良い仕事であった。聴衆からこの場合のようにあまり配座数が多くない化合物に対しては始めから力場計算を行ったらどうかという質問があった。

29I20　藤枝修子ほか（お茶大理）「画像として扱うBelousov-Zhabotinskii反応の空間模様」

いわゆる振動反応の中で美しい色を発する例に対して本格的画像処理装置を作ったという報告であった。この装置を用いて撮影した見事なカラー写真が数多く示されて聴衆を魅了した。これからこの装置を利用して従来の研究方法では得られなかったような解析結果が現れる事が期待される。

29I21　伊奈　諭ほか（分子研など）「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の適応－－」

柏木グループからの際だって美しいグラフィックス関連のお仕事の続報である。今回は分子の等静電ポテンシャル線に直交する電気力線の軌跡を流れ線として表現することによって、電荷をもつ反応試薬が乗って動く経路を直接視覚的に提示しようとする試みであった。討論にあったように反応の進行につれて流線がダイナミックに変化する様子を表現することができれば言うことはないが、今のままでも相当に強力なツールであろう。

（豊橋技科大　大澤　映二）

特別講演Ⅱ　生命体の調和は破綻を探る　岡崎国立共同研究機構長　岡田　節人

岡田先生の長い期間にわたる御研究にもとづいて、生命体の発生・成長の具体例を引用し、その“調和と破綻”に関して御講演いただいた。“調和”の保たれた生命体とは、“自らの故障を、自ら発見かつ修復するような柔軟なシステム”と位置づけられるが、“破綻”は必ずあって、その際立った例が生物固体の“死”という事実である、というIntroductionからはじまった。

生物の個体は、受精卵が分割され、成長・分化して完成するが、それに伴うプログラムは、すべて生命体としての個体の内部に所蔵されていることを強調されたなと、“調和”の具体的な例として、切断されたゴキブリやイモリの脚の先端が、切断される以前と全く同じ形態に再生されるという現象、またプラナリアは、自らの個体を自ら何個かに分断し、そのそれぞれの断片が個体に分化成長するという事実などを紹介された。プラナリアは、このように、無性的に繁殖できるメカニズムとともに、有性生殖を行なうこともできる。本来生命体としての生物には、無性・有性両型の生殖によって乙種の保存をはかる能力があるが、人類をふくめ、いわゆる高等動物は、原則的に有性的な生殖しか可能でない種に属している。しかし、高等動物においても、ある種の器官から分離し、ある操作によって脱分化させた細胞を増殖させ、個々の細胞を再分化させ、プラナリアにおいて観察されたのと同じカテゴリーの" 無性的" な増殖を行うことも可能であって、“クローン人間”をつくることも夢ではないことに言及された。このような無性的な増殖という現象にだけ注目すれば、生命体の“調和”は“永遠”に続くはずであるが、高等動物は、“残念ながら”、有性生殖を原則とするため、先世代の個体には“破綻”が伴われる。

以上のような内容を、豊富なカラー写真スライドを使用され、先生独自の軽妙な話術で、極めて理解し易く解説していただいた。専門領域は異なるが、本討論会出席者の各位に感銘を与えたことと確信している。

（京大農　藤田　稔夫）

30122〜30124

30122　有機化合物の融点と化学構造の関係　リードジェネレイション型分子設計の試み　（矢野宮崎研究所）矢野邦彦

炭素原子数、枝分かれ数等々、非常に簡単な変数の単純な組み合わせを試行錯誤的に探索することにより、融点と有意な相関のある記述子を見いだしている。有機化合物とは水素化物であるとの指摘は示唆を与えるものであったが、分子設計の方法論としては、これまでのＱＳＡＲ研究との違いを明確化する必要があるように思われた。

30123　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　（石原産業中央研究所）赤木俊夫

パス長３の最大完全部分グラフ構造を構造単位とし、これに電気陰性度をもととした性質を定義して、分子間の構造単位の対応付けを行っている。構造的にかなり異なった分子対が類似生理活性を有する場合、部分構造間のきれいな対応関係を導き出すのに成功している。本質的に似ていない分子対にたいし、間違った対応関係を見出さないことが実証されれば、有力な方法となろう。

30124　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

甘味に影響を与える記述子が定まっている場合に、データの集合からできるだけ簡潔な活性決定木を求めている。またこの木から逆に、活性発現に必要な記述子の値域を求める方法を提案している。精細化し過ぎたＱＳＡＲから少しはなれて、データ群の性質を鳥瞰図的に眺めるためには良い方法かも知れない。

（関学情報センター　岡田孝）

30125〜30127

３０日午前の部後半の講演は、30125「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・尾関氏）、30126「シンプレックス最適化法による混合物ガスクロマトグラフィーデータの分離・再構成」（キッコーマン・相島氏）、30127「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・鬼頭氏ほか）の三講演であった。いずれもかなり以前からの難問に対してのコンピュータの新しい利用による解決策を提示したものであり、それぞれにユニークな結果が得られている。ただこれらの古くからの問題に対しては、やはり容易に解決を許さぬ諸般の環境があったために、対比すべき独立のデータが乏しいことが、得られた結果のもつ意味をいささか減殺しているやに考えられる。だが、逆に考えると今後の大いなる発展がますます期待できよう。

（電気通信大学・山崎　昶）

３０Ｉ２８～３０Ｉ３０

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ＣＳ室）戸潤一孔
蛋白質のなかでアミノ酸残基がどの程度蛋白質の内部に埋もれているかを調べて、その値を各残基の疎水性や溶媒和をあらわすパラメータとして利用できることを示そうとしている。この方法はすでに西川、大井（１９８６）によって提唱され、その有効性と限界が原著者らによって詳細に報告されている。しかし、このパラメータはこれまでほとんど利用されなかった。それは、蛋白質の溶媒和が（蛋白質の大きさによって異なるものの）なぜ一定の球内に存在するα炭素原子の数で表現できるのか、その物理的な根拠があいまいなことによるものと思われる。しかし、今回の発表で演者はＮｏｖｏｔｏｎｙの実験例などに適用できることを示したのは新しい応用面を拓いたものと評価できる。ごく一部の配列部分を人工的に変えた変異体蛋白質の溶媒和の評価にも利用できるのかどうか、ぜひその点を調べた発表を次回に期待したい。実験屋としてはその点がもっとも知りたいところである。

３０Ｉ２９　立体構造ホモロジー（キリンビール基盤技術研究所）飯島洋、岩城高則
ある蛋白質の与えられた部分的な立体構造に最もよく似ている立体構造部分を、もう一つの与えられた蛋白質から検索しようとする試みである。今回の発表では、部分的な立体構造について全てのα炭素原子間の相対距離を計算した行列をずらしながら類似構造部分を捜そうとする方法をとっている。直接「ＸＹＺ座標」を用いた比較と比べて、（演者もことわっているように）「相対距離」で比較する方法では対称性が考慮されないなど問題点が多い。この方法にどのようなメリット（例えば、演算時間が「格段」に速いなど）があるのか具体的に示してほしかった。しかし、演者らの方法（行列をずらしながら見つける方法）で致命的と感じられる問題点は、比較する両方にdeleteion/insertionがある場合には最も類似した立体構造を見つけられないことである。このままでは立体構造の類似検索の自動化すらできそうもない。どこに新規性があるのか今後明らかにしてほしい。

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
（図書館情報大学）中山伸一、吉田政幸
タンパク質の立体構造を予測するためにペプチドのコンフォメーションを規定している二面角とその前後の配列との関係を学習して予測させようとするものである。この講演をきいて、演者らが二面角に注目した動機のお粗末さにだれもが唖然としたにちがいない。演者によれば「二面角は誰もやっていないので....」。二面角とその前後の配列との関係というのは（今の時点では）ナンセンスだから誰もやっていないのである。会場からのコメントもこの点を指摘したものである。この研究はここで打ち切られることをすすめる。演者らの優れた資質をもっと他の研究に役立ててほしい。

（京大化研　西岡　孝明）

３０Ｉ３１～３０Ｉ３３

３０Ｉ３１
蛋白質のα－ヘリックスを配列のパターンで予測しようという試み。要旨集の時点ではパターンを作成したデータセットへの適用だったので良好な結果を与えたが、それ以外の蛋白質に適用するとヘリックスの識別は難しかったということである。今後は、α－ヘリックスの核を識別する方向で研究を進めたいとのこと。

３０Ｉ３２
　レセプターマッピングに、新たな形状パラメータとニューラルネットを応用した報告。提案された形状パラメータは今回の様な平面的で小さな分子には有効かもしれないが、一般化にはもう一工夫必要だろう。また、ニューラルネットを用いる場合にも、パラメータ数とデータ数の関係に注意する必要があろうという指摘があった。

３０Ｉ３３
　核酸分子の構造決定への分子動力学の応用とそのトラジェクトリーの解析手法の報告。現在得られているＮＯＥの情報だけではＡ型かＢ型かの構造決定はできないという話と、内部回転角、キンクパラメータ、ＡＳＡ等の分子動力学シミュレーションをモニターする手法の話をひとつにまとめたので目的が分かり難くなってしまった様に思われる。

（旭化成工業㈱　戸潤　一孔）

ポスターセッション報告

２９Ｐ０１～２９Ｐ０４
　２９Ｐ０１　機能類似で構造既知のものを参照する蛋白質モデリング法が報告された。構造既知のものを未知とみなして成功したことが示されたが、他の成功例も並べて示してもらえれば説得力が増したであろう。蛋白質の同じ組合わせでも役割を逆転させるだけで実験はもう１件できた筈というのはしろうと考えか？
　２９Ｐ０２　ＤＮＡのモデリング法が報告された。蛋白質との相互作用によるＤＮＡの微妙な変形も算出、図示された。結果がＸ線データを初期値とするよりも良好というのは実測値や推算値の意味とも関連していてきわめておもしろい。この種の計算量は膨大であろうが、その将来性を的確に判断するためにももっと多くの成功例が欲しいところである。
　２９Ｐ０３　蛋白質の動きが、多数ある筈のエネルギー極小構造の主要な一つだけでほとんど説明できるという事実を理論的に裏付けたという研究であった。蛋白質の分子同士の相互作用と異なり溶媒の関与は無視できないらしい。それをどう考慮していくべきかの説明に理解力をつけないで臨んだのは申訳ないことであった。
　２９Ｐ０４　市販センサを組合わせたガス混合物分析装置の発表である。対応できるガスは現在特定の５種類まで進んだ。ＣＯ用市販センサが水素の方に敏感な場合もある由であった。そういう状況下で高炉ガス専用を意図するときに次にめざすのはガス種の追加か、専用のセンサ材開発か、という質問を帰宅後思いついた。

工藤喜弘（山形大工）

29P05～29P08

29P05 ＬＡＮ (Local Area Network) 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、佐々木
簡単なネットワーク系とソフトウエアを用いたデータベースシステムによる分散データベースの可能性について実験した結果を発表。

29P06 分子動力学シミュレータのためのワークベンチ：ＣＯＭＤＥＳ　Ｉ（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、廣田、大谷、大浦、三上
結晶、表面、界面などの材料設計を志向した分子動力学シミュレータに関してヒューマンインターフェースを検討し、そのプロトタイプを作成した。

29P07 アラキドン酸のモデルと抗炎症剤（ミドリ十字）井上、山浦、深谷
フレキシブルな分子の活性配座のうちでエネルギーの低いものを抽出するシステムＳＥＡＲＥＮを開発し、これをアラキドン酸の配座解析に応用。

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、斎藤
パターン認識法を用いた複合ガスセンサシステムによる化学物質の匂いの自動認識システムの設計・開発に関する発表。

（化技研　田辺　和俊）

２９Ｐ０９～２９Ｐ１２

２９Ｐ０９

ニューラルネットを用いて赤外スペクトル１０００件の識別を行ったという報告。現状は２５０のデータポイントを入力に１対１対応を行っているだけなので、当然のパフォーマンスだと思うが、ニューラルネットの実際的な応用とは言えそうである。さらに、一万件へとシステム拡張の予定であるとのこと。

２９Ｐ１０

ダミーアトムを用いて自動的にレセプターマッピングを行おうという試み。今後、発生したレセプターモデルから構造式を発生させるというステップには、データベース等を用いることを考えているとのこと。現在のダミーアトムがベストとは限らず、その選択の仕方によっては、別の情報を引き出すことも可能であろう。

２９Ｐ１１

既に一点法で予測した蛋白質二次構造の結果を、伸長ルールによって改良しようという試み。こうした手法は他の二次構造予測法でも用いられており、若干の予測結果の向上を与えるが、本質的には最初のステップの改良が必要であると認識されているとのこと。

２９Ｐ１２

デカルト座標から内部座標への変換プログラムに関する報告。３年連続の報告であるが今回は共通部分構造の利用を行う機能に主眼が置かれている。こうしたプログラムを一般化しようとすると構造式を取り扱う手法そのものに関わることになってしまう。

（旭化成工業㈱　戸潤　一孔）

２９Ｐ１３～２９Ｐ１６

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」（中外製薬・松浦氏）は松浦氏のチームの長年にわたる労作の中から、実際の合成設計の事例を紹介するものであった。個別反応のデータベースと経験則に基づく知識ベースの得失の比較検討など豊かな示唆を含むものであった。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、木原氏）は、CAIへのユニークな応用例として注目できるが、これだけではまだ不十分の感を免れない。演者たちの言われるように、「予測と異なった結果が出た場合にどうするか」など場合の処理が巧みに出来ればエキスパートシステムの本領が活かせるのではないかと思われた。今後に期待したい。

29P15「パーソナルコンピュータによるプロトンＮＭＲフルスペクトルデータベース」（豊橋技科大・河野、阿部、佐々木氏）、および29P16「ＮＯＥデータのCHEMICSへの導入」（小野薬品・西崎氏、豊橋技科大、船津・佐々木氏）はどちらもプロトンＮＭＲ情報を扱うものである。比較的少数の数値データでスペクトルパターンを再構成できるのがＰＭＲスペクトルであるが、メモリの大容量化と高速・低廉化のためにデータ収集や構造式入力、スペクトル表示などに従来とは全く異なった新しい方式を採用して作られたのが前者である。後者は従前CHEMICSに組み込まれていた2DNMRやCOSYの情報に、さらに分子内のもっとローカルな部分に対しての情報を与えるNOEデータを導入して、未知資料の三次元的構造推定を可能としたものである。立体異性体の判別や幾何異性体の区別も可能となるなど、強力な手段であることがわかる。

電気通信大学　山崎　昶）

２９Ｐ１７～２９Ｐ２０

２９Ｐ１７　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－ （豊橋技術科学大学）速水健一、船津公人、佐々木慎一

構造推定において、マススペクトルデータは必ずしも可能な部分構造全てについてピークを与えるとは限らないことからそのデータ利用が限られていた。今回の発表では、それぞれの候補構造についてピークの質量数（ｅ／ｍ）や強度を予測し、スペクトルとの対応関係をグラフ化して提示することにより、候補構造を検定することに成功している。マススペクトルデータによる検定結果が定量的に示されたことは、ユーザに一層の信頼感を与えるのではないだろうか。

２９Ｉ１８　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－（豊橋技術科学大学）船津公人、原藤寛、佐々木慎一

この発表は二つの成果をまとめたものである。一つは、構造間の論理処理を行う方法の開発である。すなわち構造の NOT、OR などをおこなうことができる。もう一つは、構造決定において、他のデータから存在していることが確実な構造部分と、これから推定していこうとする構造部分の処理に関するものである。両方の構造部分のデータをそれぞれ抽出して、互いにうまく組み合わせて行くところに難しさがあり、それらの問題点をうまくクリアしいているように思われた。これまでのCHEMICS発展の歴史に疎い人間にとって、「マクロ処理」などの言葉を理解するのに大変であったが、発表者の説明は親切であった。ポスターセッションのよいところであろう。今後の進展を期待したい。

２９Ｉ１９　有機合成システム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－（豊橋技術科学大学ほか）船津公人ほか

反応知識ベースシステムと個別反応データベースシステムの開発に関する報告である。プロジェクトがスタートしたばかりと思われる。従来の有機合成システムと比べてどのような特徴を備えたシステムなのか今後明らかになってくるであろう。

２９Ｉ２０　有機合成システムAIPHOSの開発(2)　Bond Dissociation Energy推算法の開発
（豊橋技術科学大学ほか）船津公人ほか

前駆体候補化合物の絞り込みにおいて、結合解離エネルギーをパラメータとするために推算をおこなったものである。したがって、結合エネルギーの値が精度よく推算できることも必要であるが、むしろここでは、全ての候補化合物について（若干の精度は犠牲にしても）ある程度の値が得られ、相対的に比較できることであろう。この推算方法がそのような要求を満たすものかどうか、発表者が的確に答えてくれなかったのが残念である。

（京大化研　西岡　孝明）

２９Ｐ２１～２９Ｐ２４

２９Ｐ２１　有機合成システムＡＩＰＨＯＳの開発（３）－芳香属性及び語かに性認識プログラムの開発（豊橋技術科学大、大阪市工研、ハリマ化成、山本化成、開化協）船津公人、大野敏信、磯崎昌史、堀内健一郎、銅金巌、佐々木慎一

有機合成システムの一貫として、芳香族性及び互変異性を認識するプログラムを開発した。まだ頻度の高いケースの分析に限られており、一般化までには距離があると思われた。

２９Ｐ２２　受容サイトにおける分子認識機構（ＶＩＩ）パパイン阻害剤の活性立体配座の分子動力学による解析（東京農工大工、神奈川科学技術アカデミー）片岡良一、赤池敏宏、安川民男

タンパク質分解酵素パパインと阻害剤との相互作用を分子動力学法で解析したものである。現在の計算機能力ではタンパク質の動力学計算は短時間のシミュレーションしか行えないという制約がある。この制約の中の努力ではあるが、いま一つ方法論の検討がほしいところである。

２９Ｐ２３　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）山崎　、梶川博司、（北里大）木下俊夫、石崎勉、伊藤恭世、満野千加子、（ＤＡＫＯ　Ｊａｐａｎ）平賀やよい

情報化学討論会の英文要旨のパソコン上でのデータベース化である。このような努力には頭が下がる思いがする。

２９Ｐ２４　『超ボリューム概念』の多変量解析への適用　ＩＩＩ　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

薬品の構造活性相関のための多変量解析法の拡張である。筆者には『超ボリューム』概念とベクトル空間の次元の拡張との差異がよく理解できなかった。

（九工大情報　柏木　浩）

２９Ｐ２５～２９Ｐ２７

29P25　阪田由加ほか（住友電工など）「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－－」

平野恒夫先生（最近お茶大に転動された）が以前に行われた水の蒸発に関する分子動力学計算の結果を光ディスクとビデオ装置を組み合わせた画像表示システムを用いて実演していたので大変に人気があった。以前に同じ計算結果を白黒のＯＨＰ画面で拝見したことがあったが、今回の方が当然迫力があり、性質の異なる水分子クラスターをカラーで色分けして示していたので分かりやすい。本システムは住友電工で商品化している。

29P26　辰田信章ほか（花王）「新規香料分子設計支援のためのデータベース」

いつも人垣が出来ていてとうとう最後まで接近することが出来なかった。よほど人気のあるポスターのように見受けられた。論文になったときには是非拝見したい。人の嗅覚よりも優れた総合的機能を持つ香料設計システムが出来れば影響力は大きいであろう。

29P27　高木達也ほか（阪大薬）「シフト検定法の判別分析法への適用」

非常に丁寧に説明して頂いた。数理統計学の教科書に書いてあるような方法よりも優れたシフト判別法を化学上の諸問題に適用するという内容であったと理解した。情報化学のなかでも分析は地味な分野であるが、差検定のように化学の広い分野で日常的に用いられている手法に関する基礎的な研究だけに広く影響を与えるお仕事であろうと感じた。

大澤映二（豊橋技科大）

２９Ｐ２８～２９Ｐ３０

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

コンピュータによる薬物分子設計支援の一つのゴールとして，活性アナログ等の情報から新規分子構造を提示することである．発表されたシステムでは user の要求が生かされるよう工夫されており，この human interfaceの部分を今後さらに強化することで実用へより近づくのではと思はれる．

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

Bioisosterism と実際の成功事例をデータベースとするリードエボルーションのシステム化を目指したもので，発表者の充分な経験と知識が組み込まれており早期の実用化が望まれる．

29P30　分子計算特性予測知識データベースの開発
（花王文理研，豊橋技科大）　山下修，辰田信章，太田好人，美濃順亮
高橋由雅

分子特性予測知識データベースの構築の一貫として分子中の原子電荷の予測について発表があった．　Cambridge Data Base からカルボニル，エステルの構造を取りだし，MO 計算による電荷と原子の環境の関連を解析結果が報告された．MM 計算においては電荷は必須のパラメータであり，Gesteiger charge等より信頼度の高く，迅速な評価法としても期待されるところである．

（呉羽化学　中馬　寛）

３０１３１〜３０１３３

29P31　ｌｏｇＰ推算システムの開発　西岡 中川 藤田（京大）

オクタノール／水分配係数を，いわゆるフラグメント寄与分の加成性でなく，実測値既知の類似化合物のデータをもとに構造の差異分を補正するやりかたで求めるシステムの開発を目指した．類似化合物の絞りこみがむずかしい点があきらかになったとのことである．データベースのかたよりと柔軟な部分構造認識のむずかしさが原因としてある．限られた対象についての精度よい予測法としては期待できるが一般性はむずかしいかも知れない．

29P32　毒性予測知識ベースシステムの開発　中舘（国立衛生試験所）ら

化合物の変異原性などを予測するためにデータベースと予測式を使う．検索して既知のデータがあるものはそれを使う．毒性の有無を判別する判別式を作るためのディスクリプタとして構造のＷＬＮ表記による部分構造表現を用いる．芳香環・ヘテロ環などに分類したあと判別式でよいものが得られた．専門家が評価した正しいデータベースを使うことが大前提である．

工藤（28I02）が指摘したデータの正確さの問題はこれから電子化とパーソナル化が進むにつれますます大きな問題になりそうだ．

29P33　発癌性予測支援システムの開発　神沼（国立衛生試験所）ら

ＩＡＲＣモノグラフにもとずくデータベースの作成が中心で予測式の検討は今後の課題である．今回の科技庁のプロジェクトでは各種の活性や物性の予測システムをデータベース検索を基礎において実現するという考えかたが共通にあった点は評価してよいと思う．ＡＩとかＥＳは実用レベルに達しなくてもデータベースは残る．

富士写真フイルム足柄研究所 花井荘輔

２９Ｐ３４〜２９Ｐ３６

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、他

化学物質の生体内動態として、生物学的利用率、未変化体尿中排泄など７項目の動態値を収集し、これと７９種の構造記述子およびlogPとの相関モデルを作成している。これらの結果は、分子設計過程において知識ベースとして利用可能になっている。

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－　（筑波大）藤原譲、他

generic な反応経路を入力した時、その経路を評価するためのSYNDESシステムを作成し、反応設計において中心となる部分を構築している。また、Organic synthesis, 新実験化学講座などに所載の有機化学反応多数を収集し、構造表記と原文をCD-ROMに集積したCORESシステムを作成して、知識ベースシステムの一環としての役割を果たさせている。

２９Ｐ３６　　合成経路探索知識ベースシステムの開発

（化技研）内丸忠文、他

有機合成設計支援システムCASINOを開発している。このシステムでは、論理指向的なアプローチに従って網羅的な合成経路探索を行っている。内容的には、標的化合物と出発物質を指定して経路を探すプログラムと、標的化合物のみを与えて求電子性、求核性の元素に構造を抽象化した上で探索を行うプログラムに分かれる。このシステムは、他の知識ベースによる経路の評価と組み合わされて、反応設計システムを構築している。

（関学情報センター　岡田孝）

２９Ｐ３７～２９Ｐ３９

２９Ｐ３７　共通基盤としての基礎化学知識ベースシステムの開発

（関学大、東海大）　岡田　孝、河井俊一、木下悦子、米田幸夫

リスト構造の効率的検索のための枠組みとして提案された弁別ネットを類似性検索や推算に利用しうることを示した発表である。実例として、酸素酸の酸性度の類推、ピリミジン誘導体における構造活性相関の認識、および触媒酸化脱水素反応の類似度の判定が紹介された。

他の類似度推定の方法に比べて構造の中に視点を持たせているのが特徴であろう。

２９Ｐ３８　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）鬼頭繁治、服部　忠、村上雄一、米田幸夫

不均一系触媒を効率よく開発するための支援システムの報告である。不均一系触媒固有の知識をコンピュータ化するための新しい知識表現、およびシステム予測結果と既往の事実あるいは実験結果とのよい一致が強調されていた。

情報化学としてはなじみの薄い分野であるためか、２９Ｐ３９とともに、聴衆（観客？）はそれほど多くなかった。コンピュータ化し難いとの印象の強い不均一系触媒を知識ベースによりコンピュータ化したことの意義など、抽象的な討論が主であった。

２９Ｐ３９　セラミックス系物質合成理論知識ベースシステムの開発

（東大工、無機材研、東大生研、東工大工、秩父セメント）

牧島亮男、門間英毅、三友　護、安井　至、水谷惟恭、二上俊朗

指定の特性を持つセラミックスの合成法（条件）を予測する知識ベースシステムの報告である。ガラス、ペロブスカイト系エレクトロセラミックス、バイオセラミックス、窒化ケイ素焼結セラミックス、気相合成セラミックスなど多様な例を取り上げ、一般則、経験則、半経験則などを中心に知識ベース化されている。

経験則などを使って無駄な試みを排除するというアプローチが他の分野にも応用しうるかという点に関心が集まったようであり、実際に試みてみたいという申し出もあったそうである。

（名大工　服部　忠）

第１４回情報化学討論会（予告）

日　時：１９９１年（平成3年）１１月２７日（水）～２９日（金）　３日間

場　所：（財）川口総合文化センター　リリア(LILIA)

［交通］ＪＲ京浜東北線川口駅下車　西口駅前

ＪＲ川口は東京から京浜東北線で３０分、新宿から埼京線経由赤羽乗換で約２０分

なお、第１９回構造活性相関シンポジウムも同じ会場、同じ日程で行われます。

世話人：細矢治夫・平野恒夫・鷹野景子・藤枝修子（お茶の水女子大学

〒112 東京都文京区大塚 2-1-1　電話 03-3943-3151）

梅山秀明（北里大学　〒108 東京都港区白金 5-9-1　電話 03-3444-6161）

第１回 情報化学部会 講習会

―シニアケミストのための化学ﾊﾟｰｿﾅﾙｺﾝﾋﾟｭｰﾀ 利用講習会―

主催　日本化学会情報化学部会

協賛　放送大学

日　時　平成３年３月19日（火）10：00～16：30

会　場　放送大学東京第二学習センター（東京都文京区大塚3-29-1、旧東京教育大学キャンパス）

〔交通〕営団地下鉄丸の内線茗荷谷駅下車すぐ

参加申込締切　平成３年２月２８日（木）、定員（20名）になり次第。

参加申込資格　原則として、企業人・教育会員：45才以上、大学人：55才以上。ご夫婦での参加歓迎（若手対象の講習会は別の機会に行いますので今回はご遠慮下さい）。

内　容　シニアケミストのためにパーソナルコンピュータの活用法を初歩から懇切に手ほどき致します。ワードプロセッシング（日本語・英語）、表計算、印刷ソフト、大型データベースの利用法など。若いものに聞いてもカタカナ言葉だらけの専門語ではなかなかわからぬと尻込みされているような方々のご来臨をお待ちしています。あまり失礼なことにないようにガイド致したいと考えています。

講　師　藤枝修子（お茶の水女子大）、山崎　昶（電通大）

参加費　3000円（ご夫婦で参加される場合はお二人で4000円）

参加申込方法　FAX または葉書で「第１回情報化学部会講習会申込書」と標記し、①参加者氏名、②年齢、③所属、④連絡先（所在地・郵便番号・電話番号）を明記のうえ、下記あてお申込ください。参加費は当日徴収します。

申込先　101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル
日本化学会情報化学部会　講習会係（電話03-3258-9813、FAX03-3258-9810 ）

ワークショップ 「化学構造式の自動解読」 話題提供者募集

東海大学開発技術研究所　米田 幸夫

情報化学部会の行事として，上記のワークショップを開催しますので，話題提供者を募集いたします．

化学構造式の自動解読とは，文字を含む，印刷または手書きの化学構造式を自動認識をして，各種の立体化学表示を含めて，結合関係と元素記号などを認識し，入力と同じ水準の結合関係表を作成することで，分子設計，反応設計，データベース構築など，化学の情報処理に要望されていながらも，実用に供しうるシステムは発表されていない．

このシステムは化学構造式（望むべくは複数の構造式と文章を含む文書）をイメージ・スキャナーで読み取り，それ以後は総てバッチ処理で，(1)ベクトル化，(2)光学的文字認識，(3)化学構造式エディターの専門的な技術と，結合線認識と文字の切り出し，線図（グラフ）と文字との統合，の二つのアルゴリズムを更に統合することにより，化学構造式を結合関係表に変換する．　システムの対象である現実の化学構造式の書き方は特許文書などのように意外に混乱しており，このようなバッチ処理が可能であるかの疑問が無いわけではない．

現在の化学構造式の入力の主流はＣＲＴ上の構造式エディターであろう．　これに依れば，新たな化合物の化学構造式の入力は構造式データベース中の既存の構造を修正する方が迅速・確実であるとの見方もある．　しかし，特許明細書を始め，多数のしかも多様な化合物の構造式を入力するときは，その性能が高ければ自動認識が有利であることはまちがいない．　また，研究者がその着想を手書きの構造式にサラサラと書き，これから各種のデータベースやシステムに直ちにアクセスできれば，その貴重な着想が立ち枯れすることなく，さらに発展させることが可能となろう．

バッチの自動解読である限り，出力の結合関係表の校正は不可欠であり，そのために構造式エディターをこのシステムの一要素としている．　パソコンなりワーク・ステーションを使用するならば，処理時間はあまり問題とはなるまい．　システムが処理中の疑問点などをレポートすることを前提として，正答率がどの程度であれば実用的といえるかも，今後の開発に当たっての重要な問題である．

このシステムの基礎的なアルゴリズムや技術，実用化の条件などを話題として，下記のように気楽に情報を交換するワークショップを計画した．

話題提供者の募集： 開催に先だって，上記の各側面について２０～３０分の話題提供者を募集します．　要素技術関連のソフト・ハウス，ポテンシャル・ユーザなども歓迎いたします．　ご応募いただける方は **２月２０日**（水）までに下記へ演題その他を郵便またはＦＡＸでご連絡願います．

なお，プログラムおよび参加者募集は CICSJ Bulletin, No.2 （３月末）に発表する．

記

(1) 日時：　１９９１年5月１０日(金)　１３．００～１８．００（終了後懇親会の予定)
(2) 会場：　東海大学　開発技術研究所（代々木）　　会議棟　第１会議室
(3) 連絡先：　151 東京都渋谷区富ヶ谷2-28-4　東海大学 開発技術研究所 米田 幸夫
03(3467)2211,内線475　　FAX　03(3467)6177

参考：1) 米田 幸夫，「文字入りの立体化学構造式の解読」，第１３回情報化学討論会予稿集,p.33-36(1990). 2) 米田 幸夫，「化学構造式考現学」，CICSJ Bulletin, vol.9, No.1(1991)
[GEN$0-5A 910111]

年会プログラム

第61春季年会 化学情報・計算機化学プログラム

日時　1991年３月29日（金）～４月１日（月）
場所　慶応義塾大学日吉校舎（横浜市港北区日吉）

Ｃ５会場（第４校舎Ｂ棟25教室）
３月30日（土）〔化学情報・計算機化学〕
〔 10:00～11:00 〕　　　〔座長　阿部　英次〕
２Ｃ５０７＊ミニフォーラム　ＮＭＲスペクトルデータベース── ファクトデータベースの一例として（神田外語大・化技研）○山本　修・早水紀久子
２Ｃ５１０＊ミニフォーラム　パソコン通信による化学者間のコミュニケーション（姫路工大）中野英彦
〔 11:10～11:50 〕　　　〔座長　今井　　賢〕
２Ｃ５１４　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（４）パソコンシステムの開発（化技研・ファコムハイタック）○田辺和俊・田村禎夫・上坂博亨
２Ｃ５１５　分析スペクトル情報検索システムの開発（三井石油化学工業）○西村竜一・中村玲子・山崎　徹
２Ｃ５１６　レセプターサイト推定のためのタンパク質ポケット領域の探索法（豊橋技科大）○Carlos A. Del Carpio・高橋由雅・佐々木慎一
２Ｃ５１７　ＰＬＳ法によるフェニルピリジン系抗不整脈剤の構造―活性相関（興和㈱東京研・豊橋技科大）○長谷川清・執行洋陸・薮木宏之・宮下芳勝・佐々木慎一
〔 13:00～13:50 〕　　　〔座長　藤枝　修子〕
２Ｃ５２５　シクロデキストリンの分子認識機構（１）β・ＣＤ－ｄ，１マンデル酸系（科学技術アカデミー・東京農工大）○岡崎秀美・赤池敏宏・山下豊文・安川民男
２Ｃ５２６　化学物質の分解性の予測（１）分子軌道法による置換基底数σＩの推算（化技研）○田辺和俊・都築誠二・小野修一郎
２Ｃ５２７　数式処理を利用した化学動力学計算の自動化（大阪電通大）藤田岩男
２Ｃ５２８＊有機化合物のＩＵＰＡＣ命名支援システムの開発　Ⅱ（豊橋技科大）○阿部英次・高橋佐江・佐々木慎一
〔 14:00～15:00 〕　　　〔座長　田辺　和俊〕
２Ｃ５３１＊ミニフォーラム　化学構造式の自動解読にまつわる諸問題（東海大開発研）米田幸夫
２Ｃ５３４＊ミニフォーラム　プログラム（ＢＡＳＩＣ，ＰＡＳＣＡＬ，Ｃ）をつくるソフトの開発とコンピュータ教育（工学院大）渡部正利

※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、ミニフォーラムは一件30分です。

★日本化学会情報化学部会総会のお知らせ

3月30日（日）一般講演終了後、15時から16時迄、会場にて当部会の総会を開催致します。

第61春季年会 特別講演

特2会場　第4校舎　B棟19教室

4月1日（月）　特定テーマ（短期）「医薬品における分子設計」

講演〔講演50分、質疑応答10分〕

4特201　蛋白質工学による新規生理活性物質の創製（10:00 ～11:00）（蛋白工学研）池原森男・大田由巳

4特202　人工抗体の分子設計（11:00 ～12:00）（藤田学園保健衛生大医総合医学研）黒沢良和

4特203　糖鎖工学を応用する医薬品開発（13:00 ～14:00）（岐阜大農）木曾　真

4特204　核内レセプターリガンドと医薬品（14:00 ～15:00）（東大薬）首藤紘一

特5会場　第6校舎　623 教室

4月1日（月）　特定テーマ（短期）「新素材開発をめざした理論化学計算」

講演〔講演40分、質疑応答10分〕

4特501　分子設計のための量子化学—量子化学のメガネで見れば何がみえるか—（10:00 ～10:50）（阪市大理）西本吉助

4特502　新材料開発と分子設計（10:50 ～11:00）（化技研）田辺和俊

4特503　分子設計の役割・現状・展望（11:40 ～12:30）（住友化学筑波研）吉田元二

4特504　液晶／高分子複合対の設計（13:30 ～14:20）（旭硝子中研）石田嘉明

4特505　有機非線形光学材料の分子設計（14:20 ～15:10）（日立製作所日立研）伊藤雄三

4特506　化学研究者用情報ベースシステムの展望（15:10 ～16:00）（筑波大電子情報）藤原　譲

部会記事

常任幹事会報告　(平成2年度)

第1回　平成2年5月19日(土)　日本化学会仮事務所会議室

藤原部会長の挨拶の後、議事に入った。

1．平成2年度第1回役員会および総会の報告(CICSJ Bull., 8(No.3), 30 (1990))

2．常任幹事会の趣旨確認：役員会は年2回(日化春季年会と情報化学討論会のとき)しか開催されないので、部会が活発な活動を行うためにその間に常任幹事会を年4回開催する。実務的活動を推進するために、役員会に総務、企画、編集の各委員会をおき、常任幹事会には部会長と副部会長のほか、各委員長と副委員長も出席して、連携をはかる。

3．平成2年度情報化学部会役員と役割分担を確認　(敬称略)

部会長　藤原　譲　(筑波大電子情報工学)

副部会長　吉田元二　(住友化学大阪研)　町田勝之輔(京大薬)

幹事

荒木啓介(ＪＩＣＳＴ)	石塚英弘(図書館情報大)(編集：主)
板井昭子(東大薬)　(企画)	今井　賢(立正大教養)　(編集)
梅山秀明(北里大薬)	大沢映二(北大理)　北海道
岡田　孝(関西学院大)(企画)近畿	柏木　浩(九工大)　九州
神谷和秀(武田薬品)	鬼頭繁治(愛知工大工)　(編集)
工藤喜弘(山形大工)　東北	小出昭夫(日本ＩＢＭ)　(編集)
佐藤明子(化情協)	西岡孝明(京大化研)
橋本正雄(日立計測ｴﾝｼﾞﾆｱﾘﾝｸﾞ)(企画)	服部　忠(名大工)　(編集)東海
張ケ谷泰二(エーザイつくば研)	平野恒夫(東大工)
深沢義正(広島大理)　中国四国	藤枝修子(お茶大理)　(総務：主)
藤田真作(富士フィルム)(総務：副)	松浦育敏(中外製薬)　(企画：副)
安岡則武(姫路工大)討論会(第12回)	谷中一郎(呉羽化学生物医学研)
山崎　昶(電通大)　(企画：主)	山崎　徹(三井石油)
山田明文(長岡技科大工)	四居靖彦(第一製薬中研)(編集：副)

監査　佐々木慎一(豊橋技科大)討論会(第13回)

　　　米田　幸夫(東海大開発技研)

なお、事務局は日本化学会情報化学部会担当　保倉光邦・田辺弘子氏。

4．情報化学部会内規（平成元年１１月２７日第４７９回理事会議決）と昨年の変更箇所（部会員種別と部会費）を確認

5．平成２年度部会年間スケジュール表を作成し、事業内容を確認。項目は総会・事業、協賛・共催事業、役員会、常任幹事会、ＣＩＣＳＪ　Ｂｕｌｌ．編集関係からなる。

6．各担当から

企画関係：命名法ワークショップ第３回報告　「命名の歴史から機械処理まで」　平成２年４月２７日（金）　日本科学技術情報センター会議室において開催、参加者は約２０名、世話人飯塚健（群馬大）先生。第４回は６月はじめの予定。

編集関係：ＣＩＣＳＪ　Ｂｕｌｌ．の編集について

１）特集「ＬＡＮを中心としたネットワーク」をVol.8 No.3 に掲載

２）特集企画の予定

2.1）「ニューロコンピュータ」名古屋地区の先生方に依頼

2.2）「ワークステーション」編集委員会で企画中

総務関係：１）共催の承認

化学ＰＣ研究会主催　第５回化学ＰＣソフトウェア研究討論会　討論主題「化学の研究・教育におけるパソコンの利用」　平成２年１１月７～８日　会場はお茶の水女大、世話人細矢治夫・藤枝修子（お茶女大）

２）情報化学部会アンケート

平成２年４月１日に、日化第５９春季年会の化学情報・計算機化学の会場で、参考資料として平成元年度活動報告をつけてアンケート調査を行った。集計結果は CICSJ Bull., 8(No.4), 2 (1990)に掲載。

第２回　平成２年８月２日（木）　日本化学会仮事務所会議室

1．前回議事内容の確認

2．各担当から

企画関係：１）第３回情報化学夏期セミナー開催　「情報化学　基礎と応用」　平成２年８月２９日（水）～３０日（木）１泊２日　会場は湯河原厚生年金会館で、定員４０名。世話人今井賢（立正大）先生

2）命名法ワークショップ第４回開催　日程は未定　内容は高分子・金属錯体を計画中

3）前年度からの継続懸案事項を検討中

3.1）文献集作成　具体的には必読本リスト、著者の書評、目次などをまとめる。

3.2）教育活動、情報化学のテキスト作成

編集関係：ＣＩＣＳＪ　Ｂｕｌｌ．　Ｖｏｌ．８と今後の編集について

1）既に掲載ずみの特集号　Ｎｏ．１で「新しいＦＯＲＴＲＡＮ」、Ｎｏ．３で「ネットワークーＬＡＮを中心としてー」。今後、Ｎｏ．６で「ワークステーション」を予定している。来年１～２月に名古屋グループで「ニューロコンピュータ」の特集を企画中。

2）将来展望「２１世紀の情報化学の重要テーマと実現時期」アンケートについてＮｏ．１で「アンケート結果報告」とＮｏ．３で「アンケート調査結果に寄せて」を掲載した。

総務関係：1）会員増加をはかる上で、「化学と工業」に情報化学部会の紹介記事をのせてもらう。

2）共催の承認

先端科学技術・情報教育センター主催　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」　平成２年９月１３日、１０月１５日、１１月１５日、１２月１０日、平成３年１月２８日、２月２５日の６回、会場はＪＲ上野駅パソコンステーション上野。

3）ワークショップ開催の申請書と会計報告書式を統一して作る。

３．日本化学会建物完成後の図書室におけるデータベースサービス（案）について

日本化学会図書担当の会田久美子氏の説明によれば、図書室の限られたスペースでは印刷物を置くことに限度がある。従来からの図書室の概念と機能を超えて、近未来には通信ネットワークにより、データベースサービス（所在サービス、コピーサービス、予稿集などのデータベースサービスほか）、支部との連絡、個別情報交換サービス、会員相互の情報交換などを行いたいと考えている。日本化学会情報委員会では既に全体的計画のもとに検討を進めているが、今後の検討課題として、これからの化学情報の流通、化学会図書室の情報、講演・講習会をどうするかなど数えられない程ある。とりあえず、既存の手段を使って、これらの進歩に対応できるように、会員教育から始めたい。これに関連して、高速多回線ＨＯＳＴハイパーコミュニケーションシ

ステム（ＨＣＳ）によるＢＢＳの資料紹介があった。

これをうけて、情報化学部会は具体的に企画担当が考えはじめて、講習会・講演会の開催を計画し、支援することにした。

第３回　平成２年１０月１９日（金）　日本化学会仮事務所会議室

１．前回議事内容の確認

２．各担当から

企画関係：１）第２回ケモメトリックスワークショップ開催　平成３年２月１５日（金）１３時～１７時　会場は豊橋技科大、世話人宮下芳勝（同大知識情報工学系）先生

２）情報化学講習・講演会第１回開催　「シニアケミストのためのパーソナルコンピュータ利用講習会」　平成３年３月１９日（火）　会場は放送大学第二学習センター（東京都文京区大塚２丁目　元の東京教育大学校舎）　午前中は講義形式、午後は実習（ＮＥＣ　ＰＣ９８０１ＶＭを使用）、定員２０名。世話人企画委員会

講習会で使用する市販ソフトを（コピーライトの問題で）２０セット購入する件が提案され、承認された。

３）日本化学会第６１春季年会のミニフォーラムの企画

例年通りに行うことを確認。テーマと講演者を企画担当で検討する。

編集関係：ＣＩＣＳＪ　Ｂｕｌｌ．の編集

特集「ニューラルネット（仮題）」　平成３年１～２月をめどに名古屋グループが企画進行中。基礎編と応用編にわけて構成し、Vol. 9 の No.1 に掲載を予定している。

総務関係：１）部会員数と部会員増強

平成２年８月３１日現在、正部会員４４８名（日化会員４０５名、日化非会員４３名）、学生部会員１４名（日化会員１２名、日化非会員２名）、海外部会員１名、法人部会員９８社（１２２口）、計５６１名。

法人会員は前年度米田幸夫部会長と佐々木慎一副部会長をはじめとし、関係の諸先生方のご苦労により多社にのぼっているので、本年度以降は個人会員増強を目標にすることになった。

2）ワークショップ開催の申請書と報告書の件

ワークショップは極めて重要な部会の活動であり、大勢の方々に積極的に開催のお世話をお願いしたいので、その開催作業を簡単にし、部会も記録に残せるように、申請書と報告書（共にＡ４サイズ）を作成した（用紙などのお問合せは事務局へ）。開催後に、部会員へのサービスとして CICSJ Bull. に１頁（２頁以上も大歓迎　ただし希望頁数は編集委員会と相談のこと）の報告を書いていただきたい。

３．次年度役員案作成

専門分野、地域などを考慮し、事業の円滑化と活動の活発化を目指して、役員案と各担当（委員会）案を作成した。

４．次年度予算案作成

日本化学会３部会（コロイドおよび界面化学、生体機能関連化学、情報化学）の収支推移（昭和６１年度～平成元年度）、情報化学部会の平成元年度収支報告書、平成２年度収支中間報告書（平成２年３月１日～８月３１日）、平成元年度事業報告書をもとにして、平成３年度予算案を作成した。

５．次年度事業計画案および年間スケジュール案作成

平成３年度事業計画案は、平成２年度と同様に一覧表形式で、総会・事業、協賛・共催事業、役員会、常任幹事会、ＣＩＣＳＪ　Ｂｕｌｌ．関係をもりこんで作成した。

（文責　総務担当　藤枝修子（お茶女大））

情報化学部会　総会（第2回）報告

平成２年１１月３０日開催

第１３回情報化学討論会が豊橋ホリデーインシアターで平成２年１１月２８日（水）～３０日（金）に開催され、その第３日午前の講演に続いて、平成２年度第２回総会が開かれた。襲来した台風が、紀伊半島に上陸する見込みであると報道され、暴風雨の真っ最中のことであった。

総会は藤原譲部会長の挨拶で始まり、次いで、第１３回情報化学討論会と第１８回構造活性相関シンポジウムの開催で実行委員長をされた佐々木慎一先生から参加者数、発表件数などの報告があった。各委員会からの議事として、

総務から：１．第１回役員会議事内容の報告
２．平成２年度　年間スケジュールの確認
３．平成３年度　役員およびその役割分担、年間スケジュール、予算の原案が提出され、承認された。
４．平成３年度　第１４回情報化学討論会は東京地区で開催し、世話人は細矢治夫教授を中心とするお茶大グループが引き受ける。第１９回構造活性相関シンポジウム（世話人は北里大梅山秀明教授）と同期日同会場で合同開催を行う。
５．ワークショップの開催申請書の書式を決めたので、ご協力願いたい。
６．個人会員増強の積極的推進の承認

企画から：１．第３回情報化学夏期セミナー報告　平成２年8月２９～３０日　湯河原厚生年金会館において開催。参加者３０名、世話人今井賢（立正大）先生。
２．第2回ケモメトリックスワークショップ開催　平成３年2月１５日　会場は豊橋技科大、世話人は宮下芳勝（同大）先生。
３．情報化学講習・講演会（第1回）開催　「シニアケミストのための化学パーソナルコンピュータ利用講習会」　平成３年3月１９日　会場は放送大学第二学習センター（東京都文京区大塚２　元の東京教育大学校舎）、世話人は企画担当幹事。

編集から：CICSJ Bull. は順調に進んでいる。特集「ニューラルネット（仮題）」を鬼頭繁治（愛知工大）・服部忠（名大工）・吉田元二（住化）先生によりVol. 9 No.1 に掲載予定で進行中。

吉田元二副部会長から、部会活動の活性化のために、賞を設けてはどうかの提案があり、今後検討することになった。最後に、町田勝之輔副部会長から締めくくりのご挨拶があり、閉会した。　　　　（総務担当幹事　藤枝修子（お茶女大））

情報化学部会ワークショップ　主催申請要項

日本化学会情報化学部会

日本化学会情報化学部会では、情報化学および関連分野の専門家を対象とした“情報化学部会ワークショップ”を開催しています。下記により部会員各位からの企画提案および主催申請を募集いたしますので、奮ってご応募ください。

記

1．名称：情報化学部会ワークショップ（第○回）―第○回○○○○ワークショップ
〔注〕下線部の回数は当部会にて決定します
2．補助金：１件につき２万円支給します。要否をお知らせください（年間５件以内）。採否は当部会にご一任ください。
3．申請方法：所定の申請書（事務局に請求のこと）に必要事項を記入のうえ、当部会あてお申込ください。添付資料は①開催案内、②収支予算書、③補助金支払方法（必要な場合のみ）です。なお、終了後は、①報告書（書式自由）、②テキスト１部（作成していない場合は不要）を提出してください。また、部会機関誌に１頁以上の報告をお願いします（複数頁歓迎。予めご連絡ください）。
4．会告：部会機関誌および日本化学会機関誌（下記あて原稿２部を送付のこと）。
5．申請書送付先（問合せ先）
101 東京都千代田区神田須田町1-9 教信木田ビル　日本化学会情報化学部会　事務局
（電話03-3258-9813　FAX 03-3258-9810 ）

以上

情報化学部会　ワークショップ　開催申請書

平成　　年　　月　　日

社団法人　日本化学会
情　報　化　学　部　会　　御中

下記のとおりワークショップを計画いたしましたので貴部会の主催を申請いたします。

<table>
<tr><td rowspan="2">名　　称</td><td colspan="3">第___回　情報化学部会ワークショップ　　〔注〕下線部は未記入のこと</td></tr>
<tr><td colspan="3">〔テーマ〕第　回</td></tr>
<tr><td>会　　期</td><td colspan="3">年　月　日（　）　～　年　月　日（　）</td></tr>
<tr><td rowspan="3">会　　場</td><td colspan="3">〔会場名〕</td></tr>
<tr><td colspan="3">〔所在地〕〒　　〔電話（　　）　－　　（内線　　）〕</td></tr>
<tr><td colspan="3">〔交　通〕</td></tr>
<tr><td>参加申込締切</td><td colspan="3">年　月　日（　）　特記事項：</td></tr>
<tr><td>参　　加
申 込 先</td><td colspan="3">〒　　〔電話（　　）　－　　（内線　　）〕</td></tr>
<tr><td>講演件数等
概　　要</td><td colspan="3"></td></tr>
<tr><td>補 助 金</td><td>要（2万円）・　不　要</td><td>添付資料</td><td>①開催案内②収支予算書③補助金支払方法</td></tr>
<tr><td>事務局への
連絡事項</td><td colspan="3"></td></tr>
</table>

■ 世話人（申込者）・同所属・同連絡先
〒　　　　　　電話（　　）　－　　（内線　　）

印

関連行事

第５回化学ＰＣソフトウェア研究討論会を終えて

平成２年１１月７日（水）午後から８日（木）夕方までの２日間にわたり、第５回化学ＰＣソフトウェア研究討論会（化学ＰＣ研究会主催　細矢治夫実行委員長）が、お茶の水女子大学一般教育２号館で開催された。参加人員９８名、特別講演１件、一般発表２７件、無償利用ソフトにおける表彰式と２件の受賞講演があった。

恒例により、本討論会でも次の３形式を合わせたものを１件の一般発表とした。１）口頭発表による７分間概要説明　２）ポスター展示　３）パソコンを使ったデモンストレーション。１）ではＯＨＰなどを使った説明のみで、質疑応答・討論は２）と３）で充分行おうというものである。昨年、化学ＰＣ研究会事務局長吉村忠与志先生の本拠である福井工業高等専門学校で行われた第４回に比べると、今回は参加者、発表件数など全体的にやや下回った。しかし、昨年の概要説明の５分はあまりにも慌ただしい印象が強かったので、本年は、逆に件数増加にあまり努力せず、積極的な申し込み発表者を大切にして、１件あたり７分にした。それでもかなり追い立てられる感があった。内容的にも随分充実し、かなりの時間をかけて検討が重ねられたことがはっきりとうかがわれる発表が極めて多く、安易な気持ちで、気楽に発表することなど許されなくなっているように思われた。

デモンストレーション用パソコン機材は、例年通り、日本電気㈱の情報処理装置システム事業部販売促進部の本橋正美さんにお骨折りいただいた。周到な手配と気配りのもとにご協力くださったことに謝意を表する。今回はこの他に、マッキントッシュ、ＩＢＭのＰＳ／５５シリーズもデモンストレーションに参加し、多彩になった。

第１日目最後に「ニューロコンピュータへの期待」と題して、日本電気㈱Ｃ＆Ｃ情報研究所長飯沼一元氏による特別講演が１時間半にわたり行われた。内容は最近のパーソナルニューロコンピュータも含めて、基礎から応用まで広範囲にわたり大変興味深い講演であった。

第２日目最後、無償利用ソフトにおける表彰式では、下沢隆（埼玉大理）化学ソフトウェア頒布委員長から、学術賞「化学教育とマイクロコンピューター・グラフィックス」として時田澄男（埼玉大工）先生に、技術賞「化学構造式作画ソフト・Ｃｈｅｍ－Ｋｉｔの開発」として吉野輝雄（国際基督教大理）先生に表彰状と副賞がわたされた。続いて受賞講演があり、長い経験と蓄積の重みを感じさせた。

中野英彦（姫工大）先生によりパソコン通信のデモンストレーションが行われ、相当の人気があった。お茶大の電話交換台経由で、ＰＣ－ＶＡＮ（商用ネット）につなぎ、シス

オペをされているＳＩＧ「コンピュータ／科学」の中の「化学とコンピュータ」の説明をされた。

口頭発表とポスターセッションだけの普通の討論会と違って、パソコンを使って実演を行うために、ディップスイッチの１つ１つの設定に至るまで細かい気配りが必要である。開催の大学としては、正直なところかなり手間がかかったように思う。東大工学部からお茶大へ来られたばかりの平野恒夫先生、家政学部被服学科小川昭二郎先生、理学部化学科鷹野景子先生、東大の学生諸君、お茶大の学生諸姉のご協力によるものと感謝している。

次回は関沢恒男（長岡工業高等専門学校）先生のお世話で行われる予定である。

（細矢治夫・藤枝修子（お茶大理））

講演要旨集に残部があります。ご希望の方は化学ＰＣ研究会事務局（福井高専　電話0778-62-1111 内線458）、または藤枝（お茶大　電話03-3943-3151 内線562）までお知らせ下さい。送料込みで1500円です。

データベース講演会

共　催　日本化学会情報化学部会・ＣＢＩ研究会・ＣＡＭＭフォーラム・ＪＣＰＥ・化学バイオつくば財団

日　時　２月14日（木）13時30分～17時

会　場　東京大学山上会館大会議室（東京都文京区本郷7-3-1 電話(03)3812-2111)

１．ＪＩＣＳＴファクトデータベースについて(JICST) 矢嶋　祐次

２．Today and tomorrow of chemical and biochemical databases（米農業研）S. R. Heller

Heller博士は化学分野の統合データベースとして名高いCIS(Chemical information System)の開発責任者であり、現在は米国農務省農業研究所で植物ゲノムプロジェクトのマネージャーとして活躍中です。

参加費　無料

連絡先　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１回計算化学シンポジウム

主催　日本化学プログラム交換機構（ＪＣＰＥ）
共催　日本化学会，日本薬学会

日　時　5月29日（水），30日（木）9時30分から

会　場　東京大学山上会館大会議室（〒113 東京都文京区本郷7-3-1 電話(03)3812-2111）

参加申込締切　定員（150名）なり次第

参加費　ＪＣＰＥ会員無料，非会員3,000円

参加申込方法　①氏名，②所属，③ＪＣＰＥ会員番号，④懇親会の出欠を明記のうえＦＡＸで（非会員は参加費をそえて現金書留で）下記あてお申し込み下さい。

一般研究発表（発表時間20分）分子軌道法，分子力学法，分子動力学法，モンテカルロ法など計算化学とその応用に関する研究発表

発表申込締切　3月30日（土）

発表申込方法　Ｂ５用紙に①氏名，②所属，③題目，④概要（100字程度）を明記のうえ下記あてお申し込み下さい。

特別講演（講演時間60分）

1.機能性色素の理論設計（阪市大理）西本吉助

2.高分子の分子軌道計算（広島大理）今村詮

3.ゼオライトの分子動力学計算（北大理）河村雄行

4.生体分子の分子動力学計算（北里大薬）米田茂隆

懇親会　5月29日（水）シンポジウム終了後，山上会館食堂にて会費2,000円（当日徴収）。

問い合わせ、参加申込、一般研究発表申込先　〒113 東京都文京区弥生2-4-16 学会センタービル 化学情報協会内 日本化学プログラム交換機構事務局（電話(03)3816-3581，3582，ＦＡＸ(03)3816-7826）

国際会議

ＩＣＡＳ’９１へのお誘い

日本分析化学会では、創立４０周年記念事業として、平成３年８月２５日（日）～３１日（土）、幕張メッセにおいて IUPAC International Congress on Analytical Sciences 1991（ICAS '91）の開催を準備中です。Scientific Program は７主題からなり、その中の１つ、Section 4 に Chemometrics and Robotics があります。この Section では、Keynote Lectures として

N. Otto (Bergakademie Freiberg, Germany)

S. Minami (Osaka University, Japan)

G. R. Eaton & S. Eaton (University of Denver, U.S.A.)

がすでに決まっています。

さらに、藤原譲教授（筑波大）をオーガナイザーとするシンポジウム ” Recent Analytical Approach in Chemometrics and Computer Chemis-try（仮題）” が開催されます。招待費に差はありますが、外国からの招待者として、現在、次の方々のお名前があがっています（変更の可能性もあり）。

B. R. Kowalski (U.S.A.)	Smeyersd-Verbeke (Belgium)
S. N. Deming (U.S.A.)	P. Jurs (U.S.A.)
B. G. M. Vandeginste (Netherland)	J. Kalivas (U.S.A.)

情報化学部会は大いに関係があり、関心をお持ちの方も大勢おられると思います。多数の方々のシンポジウムへのご講演・ご参加をお勧めいたします。 口頭発表とポスターセッションとの関係は未定ですが、Paper Submission の締切は３月３１日で、目下 2nd Circular を配布中です。詳細は下記へお問合せ下さい。

（藤枝修子（お茶女大理））

問合せ先　〒141 東京都品川区西五反田１－２６－２　五反田サンハイツ３０４
日本分析化学会内
ＩＣＡＳ’９１ 事務局　　電話　０３－５４８７－２７９０
または　日本分析化学会事務局　　０３－３４９０－３３５１

学会報告

１９９１情報学シンポジウム　に参加して

富士写真フイルム足柄研究所　　花井　荘輔

日時：１９９１年1月8日（火）～9日（水）　於：日本学術会議講堂（東京乃木坂）
主催：情報処理学会，化学会など多数の共催・後援

主催者の最後のまとめによると初日１５０名，２日目１８０名が出席とのこと．プログラムの全体は Bulletin の Vol.8, No.6を見ていただくとして，ここでは感想を気楽に書かせていただく．

１．バイオ分野では研究にファクトデータベースがよく使われているようだ

世界中の研究者がＰＤＢ（タンパクの３次元構造データバンク）などをしゃぶりつくすくらい使っているという表現（八尾氏）があったが，研究におけるファクトデータベースの使い方が化学とずいぶんちがうようだ．その理由は？　学問の面白さ？　体質？　注目の度合い？

工藤氏（山形大）の意見

３次元座標や核酸の塩基配列はデータが少ないし自分で創り出すのは大変だから他人のデータを懸命になって使う．化学では，がんばれば自分で創り出す（合成・測定）ことができるから

というのが正解かも知れない．

２．ヒトゲノム計画

文部省の計画の話があった（金久氏）．相変わらず各省庁でバラバラにいくつかのプロジェクトが走っているらしい．線虫のゲノム（１億塩基対）は人間のゲノムにくらべて３０分の１．人間が効率的なのか，あるいは線虫のこれからの進化が期待大ということか．

３．ハイパーメディア

みんなまだ構想段階．特に大座畑氏（マッキテリジェンス）の航行めがね構想は「現在の技術は前提としていない」というもので人工テレパシーまで出てくる．こういう段階でみんなの前で話すという体質は化学にはなさそうだ．コンセプトの段階でまとまった議論をする場も必要だ．

応用例を話した増田氏（東大）の，「計算機の能力はどんどん上がるが使いやすさは下がっている」という問題意識には共感できる．ＪＩＣＳＴの菊池氏に対し中村氏（情報科学技術協会）が「ハイパーメディアといっても各メディア間の関連がいわゆるリンクだけでは実際の情報処理でどこまで使えるか疑問だ」と質問していたが，人間の脳のなかの相互関連づけがどこまで再現できるのかと考えるとあまり明るい話ではないような気もする．

４．ウインドウシステム

MS-Windows, OPENLOOK, PM(Presentation Manager), OSF(Motif)の競演．それぞれが個性あふれる説明だったが座長（富士通　尹氏）がうまく以下のようにまとめた．

淘汰されるまで主導権争いは続き標準化は困難．内容はまだまだプリミティブな状態でもっと他の情報要素（図形・文字だけでなく）や入力手段（マウス・キーボードだけでなく）へ拡張することがたくさんあるはず．

５．全体として

昨年までとくらべ盛況だったという．テーマがバイオ・全文テキスト・ハイパーメディア・ウインドウシステムと連鎖していき，人間の認知論から脳へとむかえば環が閉じることになる．

情報学（Informatics)本来の目的は人間の情報処理でありコンピュータは手段だろうからその意味では認知論や言語学の専門家も集まる必要がある．そう考えるとまだシステム（ハードとソフト）に偏っていて本来の情報学の議論は少ない．missing　link が閉じるのはいつのことだろうか？

来年は同じ時期に「ゲノムと情報科学」というテーマで開催される予定とのこと．

話　　題

化学構造式考現学

東海大学開発技術研究所　米田 幸夫

1．はじめに．　第１３回情報化学討論会で，「文字入りの立体化学構造式の解読」[1]と題して，パソコン統合システムＳＦ／ＩＣＯＮ(Structural Formula, Image to CONnectivity)を発表した．これは，文字を含む，印刷または手書きの化学構造式をイメージ・スキャナーで読み取り，結合関係表に変換するパソコン・プログラム・パッケージである．

自作の基幹部分のパソコン・プログラム SF/RECG（SF RECoGnition, 構造式認識と文字の切り出し）と SF/INTG（SF INTeGration, 線図と文字との統合）に，それぞれ専門的な技術を要する，以下の３種の市販の汎用パソコン・プログラム，(1)ベクトル化，(2)光学的文字認識，(3)化学構造式エディターを統合することにより，各種の立体化学表示を含めて，結合関係と元素記号などを認識し，入力と同じ水準の結合関係表を作成することを目的とするものである．

解読の対象となる化学構造式は，一般に直線（稀に曲線も）と文字（英数字，特殊文字）から構成されていることはいうまでもないが，実際に計算機処理を試みてみると，その作図法には標準・規格はないようで，文字の相対的大きさ，立体化学の表現，直線の交差（架橋）などは，やや熟練した化学者が理解するには問題はさほどないけれども，計算機処理という観点からは，実に多様であることを痛感した．　今後，ＳＦ／ＩＣＯＮと同じ目的のシステムが活用されるためには，作図（特に構造式「おえかき」プログラムで）するときに最低限の規格が守られることが望ましく，それが期待できなくても，今後，システムを作成される方々の参考に供するためにこの資料をまとめた．　処理の詳細は討論会の予稿を参照願いたい．

化学構造式の例は主として「化学便覧」[2]から収録した．　[Kxyz] はその図面番号である．　紙面では縮小・拡大されているので，必要なときは原図のベンゼン環の高さ(HBENZ)[1]を示した．

2．　解読の手順

構造式はまず原図（図2.1a）をイメージ・スキャナー(240 dpi)で入力し，続いてベクトル化する（図2.1b）．　細線化された細線化ベクトル中の文字と結合とをベクトルの長さ，密集の度合などを手がかり（パラメータ）として，文字どおり手探りで分離する．　この段階で作図の多様性が悩みの種となり，パラメータとの戦いを引き起こす．　特にベクトル化された細線は予想以上に歪が多く，いわばファジーな図面となることに気づくであろう．　同じ原図でも HBENZ が小さいときは（図2.1c），二重結合が分解できない．

YONEDA Yukio
所在地：151　東京都渋谷区富ヶ谷2-28-4　03(3467)2211,内線475　FAX　03(3467)6177

以下に多様性の例と，望ましい書き方を示したい．

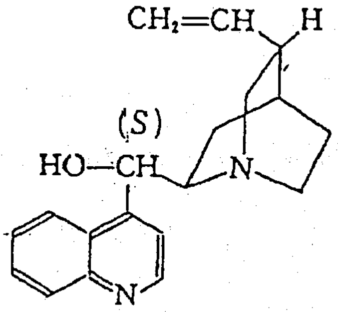


図2.1a ［K748］原図(ｲﾒｰｼﾞ)
HBENZ=6.0mm

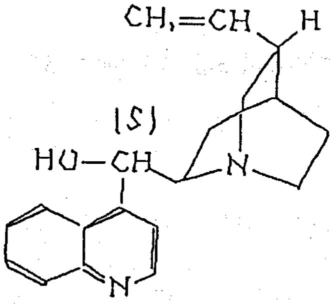


図2.1b ［K748］細線ﾍﾞｸﾄﾙ
原図×1.4　HBENZ=8.7mm

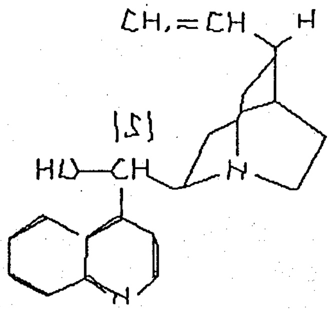
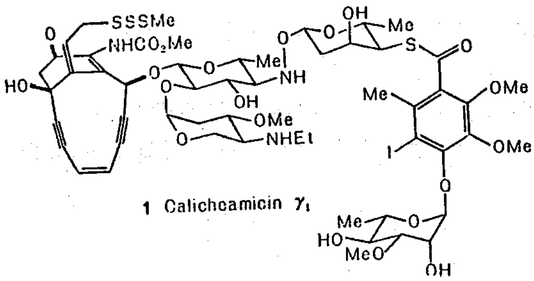
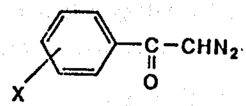


図2.1c ［K748］細線ﾍﾞｸﾄﾙ
原図×1.0　HBENZ=6.0mm

3．直線の結合線の解読

直線は，ベクトル化プログラムでできるだけ長い直線と認識した後に，更に二直線の交角がある角度（経験的に165°）よりも大きい場合は一本の直線とみなす処理を行う．　また多重結合の解読のときも，この角度を平行線の識別に適用する．　正ｎ角形では頂角は180°×(1-2/n)であるから，165°は正２４角形に相当するけれども，図3.1 の１０員環の最大の頂角は174°であって，その頂点はヒトは三重結合からともかくも判断できようが，システムでは大変困難である．　これらの処理は手書きの図面では特に重要である．　多重結合の解読は多重の線が分離される限り，さほどの困難はない．　総称結合も図3.2 のように，結合の中点の近くでほぼ直角に交わり，交点の前後に図の程度の長さがあれば解読可能である．





7

	X
a	p-CH_3O
b	H
c	p-Cl
d	p-NO_2
e	o-$COOCH_3$
f	o-$COOCH(CH_3)_2$

図3.1 複雑な構造式　HBENZ=9.0mm

図 3.2 総称結合[B3097]

架橋化合物の結合線の交差は本来，隠線除去であって，隠される結合線は中断され，手前の直線と分離しなければならない．　実例は図3.3a-c に示すように多様である．

拡大図の[1]が正しい書き方で，[2]は２ドット以上離れているからスピロと識別できる（１ドットの切断はイメージ・スキャナーのノイズの範囲である）．　[3]はスピロ化合物（自由・拘束スピロとも）との区別が付かない．　目で見れば何れも架橋と見えようが，[3]は多少不自然な書き方を許せば，拘束スピロと判断してもおかしくはない．　十倍の虫目がねで初めて可能な判断である．　ところが，化学便覧を始めとして，多くの文献は[3

]である．　[4] の側鎖の交差はさすがに隠線を分離しているが，断片があまりにも短く，文字ベクトルとの識別の論理（パラメータ）に苦しむであろう．

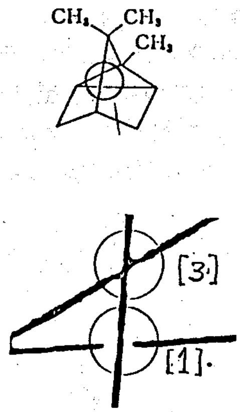


図3.3a 架橋 [K574]

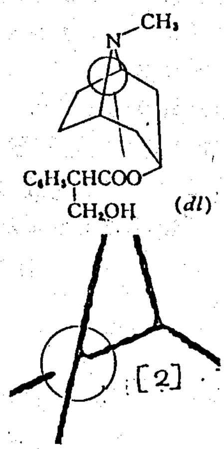


図3.3b 架橋 [K736]

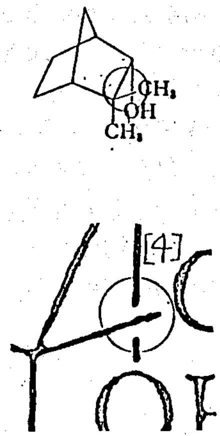


図3.3c 陰線 [K572]

4．　曲線の解読．

共役環を図4.1の様な円で現すのは汎用であり，ベクトル化ソフトが円を識別するもの（予稿のソフトは可能）であれば，部分的な共役を示す円弧でもこれらの解読は容易である．

しかし破線の円や図4.2の楕円は短い直線の集合と見てベクトル化されるので，円や楕円としての識別にはおそらく特殊な論理が必要であろう．

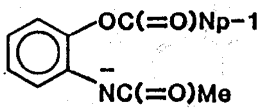


図4.1 円弧 [B3146]

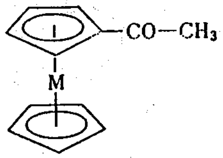


図4.2 楕円 [K171]

5．　立体化学を表現する結合線(α, β, ξ)．

構造式では立体化学は次の結合線で表現される．

(i) 細線: α (down)．

破線(方向性なし)．　図5.1, 5.3

短い平行線(方向性なし)．　図5.2.

くさび形の平行線(方向性あり)．　図5.5.

白いくさび形(方向性あり)．　図5.7（誤用，図5.6）

(ii) 太線: β (up)．

太い実線(方向性なし)．　図5.2, 5.3

黒いくさび形(方向性あり)．　図5.1, 5.7

(iii)　曲線の集合：ξ(unknown).　図5.4.

定義としては一見明瞭であるが，これは文字どうり「文字」であって，結合線と識別する論理に苦慮している．　その書き方に特別な規約がほしいところである．

太線は細線とそれを取り囲むアウトライン・ベクトルと[1]を識別することによって，処理は困難ではない．　細線の破線，平行線は図5.1，5.3 のように，書き方によって，その長さ，数が異なり，文字との識別の論理が異なってくる．　白いくさび形の使用は望ましくない．まず図2.1b の二重結合との識別が原理的に困難である．　また構造式エディタの出力には，図5.6 のように白いくさび形をβに（手を抜いてか）使用する悪い例があり，これが単独で出力されるときはα／βが逆転することになる．

したがって，図5.3，6.2 の場合を除いて，α／βには方向性のある黒いくさび形，くさび形の平行線を使用することが望ましい．

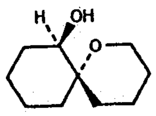


図5.1 [CA203]

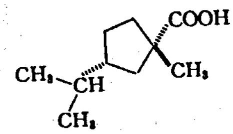


図5.2 [K575]

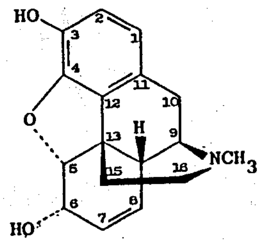


図5.3 [M6128]

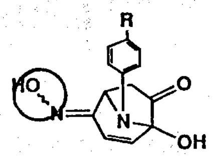


図5.4 [B3029]

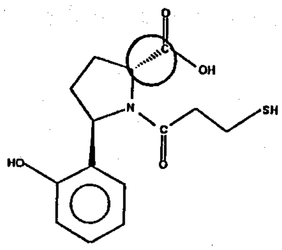


図5.5 [CSS25][3]

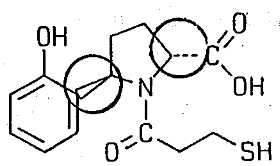


図5.6 [CSS26]

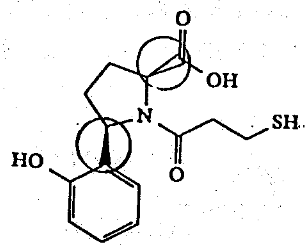
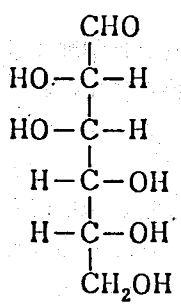


図5.7 [CSS28]

6．　立体化学表現の規約.

ヒトに立体化学を容易に認識させるための規約である．　(i) Fischer 投影式（非環式の糖類）と(ii) Haworth 投影式（環式の糖類）による表現は，それぞれ．魚の骨形の結合線，一部が太線である環式化合物に限られるので，構造式の解読の後での処理で立体化学を認識できるであろう．　ただし．(ii)で，垂直方向の結合線が必然的に非常に短くなるので，文字との識別が容易ではない．

一般的な投影図式で書いたもの（図3.1 の6員環，図3.3）の置換基のα／βの識別は，ヒトは容易にα／βを識別できるが，構造式の一部分が投影図式との認識を前提とするので，システムでの処理は容易ではなかろう．



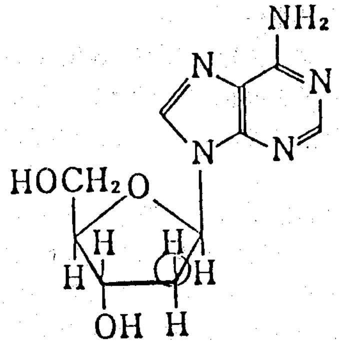


図 6.1 Fischer 投影式（非環式の糖類）　図 6.2 Haworth 投影式（環式の糖類）

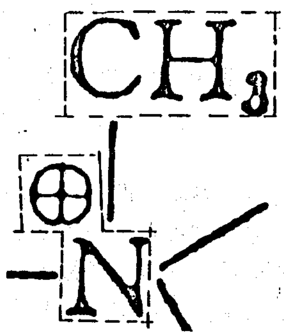
7.　文字の解読.

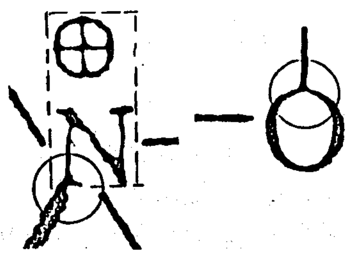
構造式で文字（英数字，記号）は非環式母環の頂点と鎖状構造の示性式のほか，総称表現の部分構造式（主として示性式，図3.2）に現れる．　文字は元素記号，総称表現（R，X，Mなど），修飾語（iso など）であって，大文字と小文字の認識が必須である．　数字は上付き，下付きのものを認識する必要がある（ただし並の数字と認識すればよい）．

記号は ASCII のほか，三重結合（恒等記号），上付きの＋，－が主なものであるが，○に＋，－の記号も使用され，特に意識しないで混用されている．　文字認識(OCR)のプログラムは ASCII 以外の記号も学習によって認識するものでなければならない．　上付き，下付きについては並の英数字と認識すればよく，上付き，下付きは事後処理で判定できる．

文字と結合との分離で重要な項目は文字／結合長比であるが，その詳細は予稿に譲る．印刷された構造式の作成には，一般に先ず線図を作成し，ついで四辺形の紙に写植した文字を線図と僅かな間隙を開けて張り込む．　これに対応して，結合線の領域を識別して，これに囲まれる四辺形の部分の画素（ドット）を切り出し，この中からＯＣＲプログラムで文字を識別する．　このとき，図7.1 のように四辺形からはみ出している記号を元素記号Ｎの付属物として認識することは汎用を狙う論理としては容易ではない．

また，図7.2，7.3 のように結合線と文字，文字と文字が融合していることも少なくはない．　前者は文字と結合線との見切りを付ける決断，後者はＯＣＲプログラムの能力にかかわっている．





(a)　(b)

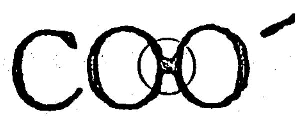


図7.1 文字の範囲　図7.2　結合線と文字の融合　図7.3 文字間の融合

8．化学構造式の多様性.

多様性というと聞こえは良いが，率直にいえばヒトの能力あるいは訓練に甘えて，自動解読にはなはだ不向きの構造式がすくなくない．　図8.1 は太線の架橋部分の書き方が不良で，自動解読が困難である．　また図8.2 の５員環の太線の方向性が不明で，誤った記述であろうか．

このような自動認識システムのポテンシャル・ユーザの一人は特許明細書の大量の構造式の処理であろう．　花井荘輔博士（富士写真フィルム㈱）のご好意で集めた日本・アメリカ・ＥＰＯの特許に現れた構造式の数例を図8.3-8.6 に示す．　構造式エディタやデータベースからの出力もあり，また側鎖の示性式の書き方が慣用から著しく外れたものもあり，総括すると，上に述べた要望事項はどこかで破られているといってよい．　また，特許には限らないけれども，特許に「一般式」と表現されている極端な総称表現や反応の表現までも面倒を見るならば，殆ど不可能といわざるを得ないのではなかろうか．

１ページに多数の構造式と文章が混在するのが常であろうが，これは現在の技術ではそれぞれの構造式に分離することが可能である．　現状のＳＦ／ＩＣＯＮは HBENZ（標準結合線長）と HCHARAC（文字の高さ）を構造式ごとに指定するようにしているが，実用化を図るためには，自動的にこれらを認識することが必要となるのではないか．

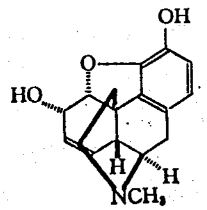


図8.1 悪い例 [K753]

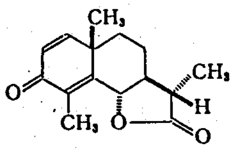


図8.2 意味不明の例 [K597]

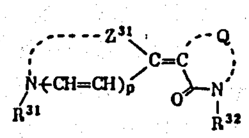


図8.3　特開平2-293839

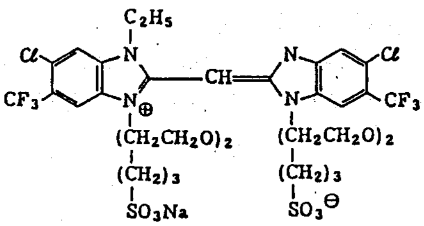


図8.4　特開平2-293839

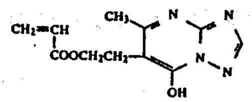


図8.5 USP 4,397,943

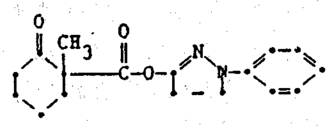


図8.6 EP 0 394 974 A2

9．　手書き構造式の解読.

予稿執筆の際に見落とした，４分の１世紀前の文献[4]はここで述べた多くの問題点を指摘している．　この論文は結合線および文字認識の要所々々についての洞察と若干の予備実験を報告しており，その当時のわが国の計算機環境を知るものには驚くべき先見性のあるものといってよかろう．　この続報は検索できなかったが，あるいは，ここで挫折したのであろうか．　その洞察のひとつに，「ＣＡＳの組織内での使用を前提とする時は，線図や文字の書き方が十分に統制できるので自動認識は可能と判断」している．　ＳＦ／Ｉ

ＣＯＮでも，書き手が一人のヒト（化学者）に限られる場合には，上記の多様な印刷構造式の解読よりも，可能性が高いかもしれない．　手持ちの手書き文字ＯＣＲプログラムは英字については大文字しか認識できないが，それでも使用可能であろう（もっとも，特殊な記号の認識は不可欠である）．

１０．　市販プログラムへの要望.

本題とずれるけれども，今までの経験から市販プログラムへの要望を述べたい．　共通的な要望はイメージ・スキャナー入力を除いて，すべてバッチ処理を行うオプションの整備である.

(1)ベクトル化：　現在，イメージ・スキャナーの解像度は２４０ｄｐｉであるが，図3.1を解読するためには４００ｄｐｉの解像度で，名詞大の図面のベクトル化が不可欠であろう．　これをパソコン，ＭＳ－ＤＯＳで処理することが望ましい．　また，細線化ベクトルを作成するとき，「当てはめ」を超「緩満」のオプション（多少の凹凸を無視して直線とすること）の追加も望ましい．

(2)光学的文字認識：　文字・記号の認識ではフォントの異なる複数の構造式をバッチで処理できること，認識率を向上させること，手書き文字の適用範囲を拡大すること，ASCIIに無い特殊な記号を認識できること，また望むべくは一字毎の認識を手続きとして主プログラムに組み込めることである.

(3)化学構造式エディター：　ξや絶対表現（Ｒ／Ｓ／Ｚ／Ｅなど）を含んですべての立体表示と，共役二重結合（円弧も），総称結合などを画面と結合関係表の両方に表示することが望ましい．　結合線の立体表示は方向性のある，くさび形の平行線（α）と黒いくさび形（β）に限定し，白いくさび形は使わないことが望ましい．　また，校正に当たって元の原子序数を保存すること，任意のコメントをファイルに記述できることが望ましい.

１１．蛇足

ＳＦ／ＩＣＯＮの実用化は可能と思うが，容易なことではない．　可能とする唯一の方法は多くの研究者の協力にあるのではなかろうか．　その一助としてＳＦ／ＩＣＯＮのソース・プログラム（FORTRAN 77）と ProFORTRAN でコンパイルした実行可能プログラムをあと半年ほどで最小限の整備をして無償で公開したい．　希望者は書面で申し込んで戴きたい.

<u>文献・注</u>

1) 米田 幸夫，第１３回情報化学討論会予稿集，p.33-36(1990).　2) 日本化学会(編)，「化学便覧」，改訂3版，基礎編，I，p.I.452-497(1984).　3) CSS: D.e. Meyyerm W.A. Warr(eds.)，"Chemical Structure Software for Personal Computers，" ACS(1988).　括弧の数字はそのページ．4) W.E. Cossum, M.E. Hardenbrook(CAS), R.N.Wolfe(IBM)，"Computer Generation of Atom-Bond Connection Tables from Hand-drawn Chemical Structures，" Proc. Amer. Doc. Inst., 269-75(1964)
[GEN$0-3A 901203]

海外動向

MEETINGS

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).

25-27 February 1991.
Biophysical Society Meeting.
San Francisco, CA.
Contact: Emily Gray, Biophysical Society, Room 3209, 9650 Rockville Pike, Bethesda, MD 20814 (301-530-7010; FAX: 301-530-7133).

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.

12-14 March 1991.
Advances in Biomolecular Simulations.
Strasbourg, FRANCE.
Contact: Mrs. C. Collombert, IBM France, 94-96, rue de Réaumur, 75002 Paris, FRANCE (FAX: 33-1-40-28-01-28; Earn Bitnet: UGCM018@FRORS12).

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).

17-19 April 1991.
Fourth Annual IMSL User Group European Conference.
Paris, FRANCE.
Contact: M. J. J. Berthelier, Chairman, IMSL User Group Europe, CNET-CRS, CRPE, 4, Avenue de Neptune, F-94107, Saint-Maur-des Fosses CEDEX, FRANCE (33-1-48861263; FAX: 33-1-48894433)or Laurie Portratz, IMSL User Group Liason, P. O. Box 4605, Houston, TX 77210-4605 (713-782-6060; FAX: 713-782-6069).

18-19 April 1991.
State-of-the-Art Technologies in Chemical Information Handling.
Faverges de la Tour, FRANCE.
Contact: Infornotics Ltd., 9a High St., Calne, Wilts. SN11 0BS, UK (44-249-816-407; FAX: 44-249-816-656).

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).

29-31 May 1991.
Symposium on Molecular Design and Modelling (as part of the ACS Joint Central-Great Lakes Regional Meeting).
Indianapolis, IN.
Contact: Dr. Donald B. Boyd, Lilly Research Laboratories, Eli Lilly and Company, Lilly Corporate Research Center, Indianapolis, IN 46285 (317-276-4262; FAX: 317-276-5431).

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 Symposium: 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.

7-11 July 1991.
International Conference on the Chemistry of the Organic Solid State.
Vancouver, BC, CANADA.
Contact: John Scheffer, Dept. of Chemistry, University of British Columbia, 2036 Main Mall, Vancouver, BC, CANADA (604-228-3496).

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.
202nd 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: 03-5487-2790)詳細は本号国際会議欄参照

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).

23-25 September 1991.
The Montreux International Chemical Information Conference & Exhibition.
Annecy, France.
Contact: Harry Collier, Infonotrics Ltd. 9A High St., Calne, Wiltshire SN11 0BS, U.K.

7-9 October 1991.
Second Symposioum on High Performance Computing.
Monpellier, France.
Contact: CNUSC, SHPC Secretariat, 950, rue de Saint Priest, BP 7229, 34184 Monpellier Cedex 4, FRANCE (33-67-14-14-14; FAX: 33-67-52-37-63; e-mail: SHPC@FRMOP11.Bitnet).

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).

9-13 February 1992.
Biophysical Society Meeting (Joint Meeting with ASBMB).
Houston, TX.
Contact: Emily Gray, Biophysical Society Room 3209, 9650 Rockville Pike, Bethesda, MD 20814 (301-530-7010; FAX: 301-530-7133).

5-10 April 1992.
San Francisco, CA.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

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.

23-28 August 1992.
204th ACS National Meeting.
Washington, DC.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

4-10 October 1992.
ELMAU 4: Computational Methods in Chemical Design.
Schloß Elmau, GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a. d. Ruhr, GERMANY (49-208-30-64-88; FAX: 49-208-30-46-07).

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

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1990年第5巻3号（9月） 論文題目、著者、頁

1990年第4巻（9月） 論文題目、著者、頁

This volume contains the proceedings of an International Conference on the theme "Mathematical Chemistry". (March 5-8, 1989 Texas)

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1990年第30巻4号（11月）論文題目、著者、頁

All the Papers in this issue were presented at the May 1990 Workshop on Computer Reaction Management in Organic Chemistry sponsored by the Beilstein Institute and held in Bozen (Bolzano), Italy.

COMPUTERS & CHEMISTRY

1991年第15巻第1号 論文題目、著者、頁

FLUOROPACK: a program package for automatic fluorimetric measurements, *M. T. Oms, R. Forteza, V. Cerdà, F. García-Sánchez and A. L. Ramos,* p. 87

Program for orientating crystal surfaces, *Gy. Dömötör and M. I. Bán,* p. 91

Determination of the position of an atom in space from three interatomic distances, *Peter Senn,* p. 93

Book Review
Expert System Applications in Chemistry: ACS Symposium Series 408, edited by B. A. Hohne and T. H. Pierce, *Peter Lykos,* p. 95

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

JANUARY 1990 Vol. 67, No. 1
Computer Series, 110 edited by James P. Birk
Least-Squares Fitting of Multillinear Equations, *Richard T. O'Neill and David C. Flaspohler,* p. 40

Visualization of Electron Clouds in Atoms and Molecules, *John E. Douglas,* p. 40

MAY 1990 Vol. 67, No. 5
Computer Series, 114: MO Theory Made Visible, *Carlo Mealli and Davide M. Proserpio,* p. 399

JUNE 1990 Vol. 67, No. 6
Journal of Chemical Education: Software: Abstract of "REDOX: A Tutorial on REDuction/OXidation Equations", p. 498

Computer Series, 115: Bits and Pieces, 44 edited by James P. Birk
Dynamic Data Storage in FORTRAN, *Alice Chung-Phillips,* p. 500

Applying KC? DISCOVERER in the INTRODUCTORY Chemistry Laboratory, *Ronald P. Furstenau and John R. Amend,* p. 500

The pH of Any Mixture of Monoprotic Acids and Bases, *D. P. Herman, K. K. Booth, O. J. Parker, and G. L. Breneman,* p. 501

Methods for Calculating the pH of Aqueous Solutions of Salts of Monoprotic Acids and Bases, *Edmund R. Malinowski,* p. 502

Calculating Percent Boundary Surfaces for Hydrogenlike S Orbitals —An Undergraduate Computer Assignment, *Leslie J. Schwariz,* p. 504

Distillation and the Macintosh: PT Nomograph, An "In-Lab" Utility, *R. Simon and T. Senecal,* p. 505

JULY 1990 Vol. 67, No. 7
Journal of Chemical Education: Software: Abstract on "Proton NMR Spectrum Simulatior", p. 589

Computer Series, 116 edited by James P. Birk
Student-Designed Experiments in General Chemistry Using Laboratory Interfacing, *John R. Amend, Ronald P. Furstenau, and Kathleen Tucker,* p. 593

AUGUST 1990 Vol. 67, No. 8
Computer Series, 117: An Inexpensive Computer Station for Undergraduate Laboratories Using the Atari 800 XL, *Edwin F. Meyer,* p. 696

SEPTEMBER 1990 Vol. 67, No. 9
BCM Primer: A Guide to Computational Methods in Superconductivity Theory, *Devaraj Sahu, Andreas Langner, and Thomas F. George Theory,* p. 738

Computer Series, 118: Instructional Computing as Replacement for Recitations in Freshman Chemistry, *James D. Spain and Joe F. Allen,* p. 766

Journal of Chemical Education: Software: Abstract of of Volume IIIB, Number 2, p. 770

会員の広場

みっつの提案

東海大学開発技術研究所　米田 幸夫

1．情報化学談話会（？）を開きませんか．

わが情報化学部会のニューズレター CICSJ BULLETIN は第9巻を迎え，編集委員会のご努力で部会としては大変充実したものとなり，また年1回の情報化学討論会と年2回の年会をはじめ，いくつかのワークショップも開催されるようになったのは，ご同慶の至りである．　研究発表の場である討論会と年会は時間の関係でゆっくりと議論をする暇も無くまた，それなりにフォーマルであるので，着想の開発途上で語り合うのにはやや不適切であり，ワークショップは特定のテーマで，どちらかといえば，そのテーマの周辺の専門家の会議であろう．　そこで，不特定のテーマで比較的少人数の会合を各地で定期的に開催することが，特に海外において進歩の著しい，情報化学の分野では是非必要ではないだろうか．　これが仮称「情報化学談話会」の提案である．

談話会は首都圏ならば，とりあえず年2回ぐらいから始め，或る日の午後または夕方，大学などの会場費のかからないところで開催する．　BULLETIN で日時を予告し，発表希望者が世話人のところへ発表を申し込む．　そのプログラムを BULLETIN の会告で部会員に知らせる．　場所が許せば，会費前払いで簡単な懇親会を開いてもよかろう．　談話会は研究発表会ではないので，予稿を強制しないし，また発表文献として自他ともに引用しないこととし，討論会・年会と区別する必要があろう．

どなたか，世話人（1回ごとに変わっても良い）はいませんか．

2．CICSJ BULLETIN の葉書版を出しませんか．

これは幹事会へのお願い．　現在，BULLETIN は隔月刊で，当面これ以上の発行回数を希望することはいろんな面から無理だろうと思う．　一方，ワークショップや仮称談話会などを開催する世話人の立場となると，2か月おきの連絡では間延びがするし，また BULLETIN の発行が遅れることもある．　毎月出る「化学と工業」の会告があるが，どうもなじまない．それで，必要な時に限って， BULLETIN の刊行されない月に葉書（41円）で BULLETIN の号外を出すことを提案したい．

3．国内外の情報化学関連の総説，単行本の文献紹介をして頂けませんか．

これは編集委員会へのお願い．　BULLETIN には毎号，海外の多様な学術雑誌の文献紹介が掲載されている．　その雑誌を購読していない部会員には大変有用なものである．　総説となると，このような専門雑誌以外に，たとえば，合成設計ならば有機化学関係の雑誌に，発表されることが多い．　また，国内の雑誌の場合はなんと言っても読み易いし，入手し易い．　ところが，専門違いの雑誌の情報化学関連の総説を発見することは容易ではない．　単行本，とくに国際会議の議事録は，これまた発見が容易ではない．　単行本の場合は，歯に衣を着せない書評があればなお有難いが，出たということだけでも有用であろう．

これらの提案についてのご意見を紙面で，または提案者まで，お伺いしたい．

YONEDA Yukio
所在地：151　東京都渋谷区富ヶ谷2-28-4　03(3467)2211，内線475　FAX　03(3467)6177

[GEN$0-3B　910110]

編集後記

9巻1号をお届けします．この号にはニューラル・ネットワークの特集ほか多くの記事が載っています．服部 忠先生（名古屋大学）と鬼頭繁治先生（愛知工業大学）には，お忙しい中この特集専任で編集委員をお願いいたしましたが，お蔭さまで立派な特集となりました．ありがとうございました．

ところで，この号が私にとって最後の編集になります．本誌の刊行を軌道に乗せ，今の姿に発展させた前編集委員長筑波大学の鈴木功先生の後を継いで2年．最初のうちは今一つ感じが掴み切れなかったのですが，当時の部会長米田幸夫先生のお言葉「とにかく，頁数を増やすこと．部会員に多くの情報を伝えることが第一だ．お金のことは気にしないでよい」に励まされ，有能な編集委員の方々や事務局の助力により，これまで何とかやってくることができました．お蔭さまで，昨年刊行された8巻はトータル 346頁，なかでも8巻3号は84頁と新記録を更新しました．このように頁数を増やすことができたのは，お忙しい中をご執筆くださった方々のお蔭です．8巻にご執筆いただいた方は延べ 129人に上ります．本当にありがとうございました．

次の編集委員長には現副委員長の四居靖彦さん（第一製薬）が予定されています．本誌の一層の発展のため，今後とも御支援御鞭撻のほど何卒宜しくお願い申し上げます．

（編集委員長　石塚英弘）

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)3258-9813

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 9, Number 2
March 1991

目　　次

部会行事

第１４回情報化学討論会

主催　日本化学会情報化学部会
共催　日本化学会、日本薬学会、日本農芸化学会、日本分析化学会、日本化学プログラム交換機構
日時　１９９１年１１月２７日（水）、２８日（木）、２９日（金）
会場　（財）川口総合文化センター　リリア(Lilia)
〒３３２　埼玉県川口市川口３－１－１　ＴＥＬ　０４８２－５８－２０００
ＦＡＸ　０４８２－５８－２１００
交通　ＪＲ京浜東北線川口駅下車　西口駅前
（ＪＲ川口は東京から京浜東北線で３０分、新宿から埼京線経由赤羽乗換で約２０分）
なお、本討論会は第１９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　7月１５日（月）
１件ごとにＢ５判（縦）の用紙に横書きで次の事項を記入の上、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下さるようお願いすることがあります）
講演要旨締切　9月２０日（金）
講演１件について所定の用紙４枚まで。他に半ページの英文要旨を添付して下さい（用紙や記入要領は申込みを受理したのち送付します）。
懇親会　１１月２８日（木）１８時より、銀座アスター川口賓館（リリア１４階）で、第１９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　６，０００円　　当日　７，５００円
講演要旨集（構造活性相関シンポジウム要旨集と合本）１冊を含みます。学生の方は事情によってはウエーバー方式をとりますので、予約申込みの時お知らせ下さい。
講演要旨集の前送を希望される方は送料として１０００円追加。
懇親会費　予約　６，０００円　　当日　７，０００円
参加登録・懇親会各予約及び要旨集前送申込締切　１０月１５日（火）
予約及び申込方法　Ｂ５判（縦）用紙に横書きで、氏名・勤務先・住所（電話、ファクシミリ）、懇親会出欠、要旨集前送希望の有無をご記入の上、下記宛お送り下さい。なお、予約及び申込の方は締切日までに下記銀行口座へ所定の金額をお振込み下さい。確認後、確認書をお送りします。
申込及び予約先　〒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
情報化学討論会　細矢治夫
銀行口座　銀行名　住友銀行大塚支店
口座番号　普通預金　６３０９０２
名義　情報化学構造活性実行委員会
問合せ先　電話 03-3943-3151(代表)　内線　細矢553 平野551 鷹野559 藤枝562
ファクシミリ 03-3942-2815（宛先個人名を明記して下さい）

第４回 情報化学夏期セミナー

主催　日本化学会情報化学部会

日　時　1991年７月25日（木）～26日（金）〔１泊２日〕
会　場　蔵王ハイツ（宮城県刈田郡蔵王町遠刈田温泉字上の原128 、電話0224-34-2311）
〔交通〕東北新幹線白石蔵王駅または仙台駅からバスで遠刈田温泉下車

参加申込締切　定員（70名）になり次第
プログラム
〔25日〕

12：00～13：00	受付・ご案内	
13：10～13：40	田中一雄（旭リサーチ）	これまでのコンピュータケミストリー
13：40～14：40	梅山秀明（北里大）	核酸の三次構造
14：40～15：40	国沢　隆（東京理科大）	遺伝子情報とデータベース
16：00～17：00	山崎千春（日本電子）	蛋白質の構造とＮＭＲ
17：00～18：00	藤田真作（富士フイルム）	有機合成反応情報
18：30～	夕食・自由討論	

〔26日〕

7：00～ 8：30	朝食	
9：00～10：00	吉田元二（住友化学）	化学情報処理と統計学
10：00～11：00	宗像弘明（菱化システム）	コンピュータ化学の応用

対　象　この方面の現状を把握したいすべての指導者、予算執行者、管理職、研究者、学生（昨年は受講者の1/5 が上級管理職／上級研究指導者の方々でした）
参加費（資料代・宿泊代・食事代を含む）　部会員18000 円、学生10000 円、一般25000 円
参加申込方法　「第４回情報化学夏期セミナー」と標記のうえ、①氏名、性別、年齢、②勤務先、職名、③会員資格、④連絡先、電話番号を明記のうえ、下記あてお申込みください。

申込先・問合せ先　992 米沢市城南4-3-16　山形大学工学部電子情報工学科　工藤喜弘（電話0238-22-5181内線417または453 、FAX 0238-22-8009）、312 勝田市市毛882 日立計測エンジニアリング㈱テクノリサーチセンタ　橋本正雄（電話0292-74-5093、FAX 0292-74-2466）

第4回 情報化学部会 ワークショップ
「化学構造式の自動解読」

参加者募集

（社）日本化学会情報化学部会

CICSJ Bulletin, vol.9, No.1, p.52(1991) に予告しましたように，情報化学部会の行事として，上記のワークショップを開催しますので，参加者を募集いたします．

「化学構造式の自動解読」の詳細は上記 Bulletin に述べた通りであります． このシステムの基礎的なアルゴリズムや技術，実用化の条件などについて，ポテンシャル・ユーザや要素技術関連のソフト・ハウスを交えて，下記プログラムのように気楽に情報を交換するワークショップを計画しました． 多数のご参加を期待致します． 下記のようにお申し込み下さい．

プログラム

1．結合表入力法の諸問題．
　富士写真フイルム㈱ 足柄研究所 主任研究員 花井 荘輔
2．文献等に現れる化合物図形の特徴と問題点について．
　日本科学技術情報センター 主任情報員 荒木 啓介
3．化学構造式認識における諸問題
　東海大学 開発技術研究所 教授 米田 幸夫
4．化学構造式認識におけるベクトル化ソフトの役割(Quick Trace)
　㈱アイシーエル
5．化学構造式認識におけるＯＣＲソフトの役割(PCR SWAN/ENGLISH)
　㈱バーズ情報科学研究所 プロジェクト・マネージャー 前田 恒男
6．化学構造式認識における構造式エディターソフトの役割(「441」)
　㈱テクノシステム システム部 内山 峰隆

記

(1) 日時： １９９１年５月１０日(金) １３．３０〜１８．００（終了後懇親会)
(2) 会場： 東海大学 会議棟 第１会議室（２階）
交通： 営団地下鉄 千代田線 代々木公園前駅下車（代々木八幡側出口）
　小田急 代々木八幡駅下車
　いずれも，徒歩１０分． 各駅に地図があり，付属高校前を通って正門から入る．
(3) 参加資格： 情報化学部会の正部会員，準部会員，または法人部会員の関係者が優先する． ただし，それ以外でも可．
(4) 参加費： １，０００円． 懇親会費： １，０００円． いずれも，当日戴きます．
(5) 参加申し込み： Ａ４ の用紙に，姓名，所属，連絡先（所在地，電話，FAX），部会員の種類，**懇親会の出欠**を記入して下記までご郵送ください．
締切： **１９９１年 ４月２５日（木）．**
(6) 参加人員： 話題提供者を含み，約３５名（先着順）．
(7) 連絡先： 151 東京都渋谷区富ヶ谷2-28-4 東海大学 開発技術研究所 米田 幸夫
03(3467)2211,内線475 FAX 03(3467)6177 [GEN$0-5D 910311]

部会記事

平成３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〕	相島鐵郎	キッコーマン
	荒木啓介	日本科学技術情報センター
	板井昭子	東京大学薬学部
	今井　賢	立正大学教養部
	岩沢まり子	㈱紀伊國屋書店
	梅山秀明	北里大学薬学部
	岡田　孝	関西学院大学情報研究センター
	岡本康子	住友化学㈱筑波研究所
	奥山　徹	豊橋技術科学大学
	柏木　浩	九州工業大学
	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
	中野英彦	姫路工業大学
	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	お茶の水女子大学理学部
	深澤義正	広島大学理学部
	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
	細矢治夫	お茶の水女大理
	松浦育敏	中外製薬㈱御殿場研究所
	宮下芳勝	豊橋技術科学大学
	谷中幹郎	呉羽化学㈱生物医学研究所
	山崎　昶	電気通信大学㈱
	山田明文	長岡技術科学情大学工学部
	四居靖彦	第一製薬㈱研究開発情報部
〔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１９回構造活性相関シンポジウム

日時　１９９１年１１月２７日（水）、２８日（木）、２９日（金）
会場　（財）川口総合文化センター　リリア（Lilia）
　　〒３３２　埼玉県川口市川口３－１－１　ＴＥＬ　０４８２－５８－２０００
　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　ＦＡＸ　０４８２－５８－２１００
　　交通　ＪＲ京浜東北線川口駅下車　西口駅前
　　　　（ＪＲ川口は東京から京浜東北線で３０分、新宿から埼京線経由赤羽乗換で約２０分）
　　なお、本討論会は第１４回情報化学討論会と併催されます。
共催　日本化学会、日本薬学会、日本薬学会関東支部、日本農芸化学会、日本農薬学会、日本生物物理学会、構造活性相関懇話会
討論主題　生理活性に関連した構造活性相関
講演申込締切　７月１５日（月）
　１件ごとにＢ５判（縦）の用紙に横書きで次の事項を記入の上、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)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下さるようお願いすることがあります）
講演要旨締切　９月２０日（金）
　講演１件について所定の用紙４枚まで。他に半ページの英文要旨を添付して下さい（用紙や記入要領は申込みを受理したのち送付します）。
懇親会　１１月２８日（木）１８時より、銀座アスター川口賓館（リリア１４階）で、第１４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　６、０００円　　当日　７、５００円
　講演要旨集（情報化学討論会要旨集と合本）１冊を含みます。学生の方は事情によってはウェーバー方式をとりますので、予約申込みの時お知らせ下さい。
　講演要旨集の前送を希望される方は送料として１０００円追加。
懇親会費　　予約　６、０００円　　当日　７、０００円
参加登録・懇親会各予約及び要旨集前送申込締切　１０月１５日（火）
予約及び申込方法　Ｂ５判（縦）用紙に横書きで、氏名・勤務先・住所（電話、ファクシミリ）、懇親会出欠、要旨集前送希望の有無をご記入の上、下記宛お送り下さい。なお、予約及び申込の方は１０月１５日（火）までに下記銀行口座へ所定の金額をお振込下さい。確認後、確認書をお送りします。
申込及び予約先　〒112　東京都文京区大塚 2-1-1　お茶の水大学　理学部化学教室
　　　　　構造活性相関シンポジウム　　細矢治夫
銀行口座　銀行名　　住友銀行大塚支店
　　　　　口座番号　普通預金　６３０９０２
　　　　　名義　　　情報化学構造活性実行委員会
問合せ先　電話 03-3943-3151（代表）　内線　細矢553 平野551 鷹野559 藤枝562
　　　　　ファクシミリ 03-3942-2815（宛先個人名を明記して下さい）

学会報告

CCS展&セミナーに参加して

世の中には、反応設計をやってくれるコンピュータシステムがあるという。自分の属する部所の命題は、有用物質(薬)を(工業的に、品質よく、安く、そして早く、速く)いかに合成するかということであり、もしそんなシステムがあるなら欲しくないわけがない。むしろ、今後は、開発途上の化合物数の増加、構造の複雑化等の理由から絶対に必要となる。

春めいた温かい日に、CCS展の基調講演に駆け付けたら、両日(3/19、20)とも超満員だった。汗だくになりながら前の方に進み、ダンディな田辺先生、少しロマンスグレーの紳士佐々木先生の講演を立見で拝聴した。両先生は、先日成果発表会があった科学技術庁振興調整費による研究でも中核となって活躍された。またCASINO,AIPHOSは、自分のような素人でも聞いたことはある。佐々木先生の講演の中で一瞬ではあったが、AIPHOSでクロルプロマジンの合成経路を考えている様子を見せていただいた。幸いなことに質問用紙(化学工業日報社アンケート用紙の裏側)を受け付けてくれたので知りたいことをギッシリ書いた。

システム展の方ものぞてみた。CCS関連のパッケージソフトは無数にあるが反応設計の市販ソフトはやはり存在しない。あるコンピュータメーカーでは勉強会を開いたり、あるメーカーではかのSECSの移植をアシストした実績はある、とのことだったがパッケージソフトの開発計画はいまのところない。

反応設計システムは、完全には実用化段階には到達していない。しかし、コンピュータハード面の進歩、国家的プロジェクト、化学系企業グループとの共同プロジェクトなどにより急速に進歩していることは事実である。

有機化合物は無限に考えられる。有機化学にもそれだけの可能性がある。しかし実際にモノをつくり実証するための見かけのスタイル(うすよごれた実験台の前で考えてはコツコツとモノトリをする)は何十年も前から少しも進歩していない。　人間とコンピュータのそれぞれの長所を生かした共同作業と化学畑の人がコンピュータケミストリー分野に積極的に参画することの重要性を強調された両先生の言葉を思い出しながら九段下の坂道を降りた。

第一製薬（株）生産技術研究所　　金内　徹

MEETINGS

17-19 April 1991.
Fourth Annual IMSL User Group European Conference.
Paris, FRANCE.
Contact: M. J. J. Berthelier, Chairman, IMSL User Group Europe, CNET-CRS, CRPE, 4, Avenue de Neptune, F-94107, Saint-Maur-des Fosses CEDEX, FRANCE (33-1-48861263; FAX: 33-1-48894433)or Laurie Portratz, IMSL User Group Liason, P. O. Box 4605, Houston, TX 77210-4605 (713-782-6060; FAX: 713-782-6069).

18-19 April 1991.
State-of-the-Art Technologies in Chemical Information Handling.
Faverges de la Tour, FRANCE.
Contact: Infornotics Ltd., 9a High St., Calne, Wilts. SN11 OBS, UK (44-249-816-407; FAX: 44-249-816-656).

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).

29-31 May 1991.
Symposium on Molecular Design and Modelling (as part of the ACS Joint Central-Great

Lakes Regional Meeting).
Indianapolis, IN.
Contact: Dr. Donald B. Boyd, Lilly Research Laboratories, Eli Lilly and Company, Lilly Corporate Research Center, Indianapolis, IN 46285 (317-276-4262; FAX: 317-276-5431).

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 Symposium: 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.

7-11 July 1991.
International Conference on the Chemistry of the Organic Solid State.
Vancouver, BC, CANADA.
Contact: John Scheffer, Dept. of Chemistry, University of British Columbia, 2036 Main Mall, Vancouver, BC, CANADA (604-228-3496).

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.
202nd 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: 03-5487-2790)詳細は本号国際会議欄参照

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).

23-25 September 1991.
The Montreux International Chemical Information Conference & Exhibition.
Annecy, France.
Contact: Harry Collier, Infonotrics Ltd. 9A High St., Calne, Wiltshire SN11 OBS, U.K.

7-9 October 1991.
Second Symposioum on High Performance Computing.
Monpellier, France.
Contact: CNUSC, SHPC Secretariat, 950, rue de Saint Priest, BP 7229, 34184 Monpellier Cedex 4, FRANCE (33-67-14-14-14; FAX: 33-67-52-37-63; e-mail: SHPC@FRMOP11.Bitnet).

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).

9-13 February 1992.
Biophysical Society Meeting (Joint Meeting with ASBMB).
Houston, TX.
Contact: Emily Gray, Biophysical Society Room 3209, 9650 Rockville Pike, Bethesda, MD 20814 (301-530-7010; FAX: 301-530-7133).

5-10 April 1992.
San Francisco, CA.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

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.

23-28 August 1992.
204th ACS National Meeting.
Washington, DC.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

4-10 October 1992.
ELMAU 4: Computational Methods in Chemical Design.
Schloß Elmau, GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a. d. Ruhr, GERMANY (49-208-30-64-88; FAX: 49-208-30-46-07).

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

本号迄の紹介文献一覧

CICSJ Bulletin 掲載号	
Vol. 8, No. 3	Computers & Chemistry 1990 年Vol. 14, No. 2
	Journal of Chemical Education 1989 年Vol. 66, No. 11 ～ No. 12
	Journal of Molecular Structure 1989 年Vol. 199～206, Vol. 212 ～214, Vol. 216 ～220
	Journal of Molecular Graphics 1990 年Vol. 8, No. 1
	Tetrahedron Computer Methodology 1989 年Vol. 2, No. 3
Vol. 8, No. 4	Computers & Chemistry 1990 年Vol. 14, No. 2～3
	Journal of Chemical Education 1990 年Vol. 67, No. 2～No. 4
	Journal of Mathematical Chemistry 1990 年Vol. 5, No. 1
	Tedtrahedron Computer Methodology 1989 年Vol. 2, No. 4
	Journal of Chemical Information and Computer Sciences 1990 年Vol. 30, No. 2
Vol. 8, No. 5	Journal of Chemical Information and Computer Sciences 1990 年Vol. 30, No. 3
	Tedtrahedron Computer Methodology 1989 年Vol. 2, No. 5 ～No. 6
	Journal of Molecular Graphics 1990 年Vol. 8, No. 2
	Journal of Computational Chemistry 1990 年Vol. 11, No. 3～No. 5
	Journal of Molecular Structure 1989 年Vol. 221～222
	Journal of Mathematical Chemistry 1990 年Vol. 5, No. 2
Vol. 8, No. 6	Quantitative Structure-Activity Relationships 1989 年Vol. 8, No. 4 ～1990年Vol. 9, No. 2

Computers & Chemistry
1990 年Vol. 14, No. 4

Journal of Molecular Structure
1989 年Vol. 223～224

Journal of Computational Chemistry
1990 年Vol. 11, No. 6～No. 9

Journal of Molecular Graphics
1990 年Vol. 8, No. 3

Vol. 9, No. 1

Journal of Mathematical Chemistry
1990 年Vol. 5, No. 3 ～No. 4

Journal of Chemical Information and Computer Sciences
1990 年Vol. 30, No. 4

Computers & Chemistry
1991 年Vol. 15, No. 1

Journal of Chemical Education
1990 年Vol. 67, No. 1, No. 5 ～No. 9

本　　号

Quantitative Structure-Activity Relationships
1989 年Vol. 9, No. 3

Journal of Chemical Information and Computer Sciences
1991 年Vol. 31, No. 1

Journal of Chemical Education
1990 年Vol. 67, No. 10 ～No. 12

Journal of Mathematical Chemistry
1991 年Vol. 6, No. 1

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

1990年第9巻3号 論文題目、著者、頁

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1991年第31巻第1号（2月） 論文題目、著者、頁

BOOK Reviews
A Guide to Standards. By Albert L. Batik, Reviewed by *David R. Lide,* p. 170

Expert System Application in Chemistry, Reviewed by *Craig S. Booher,* p. 170

Acronynms and Abbreviations in Molecular Spectroscopy: An Enzyclopedic Dictionary. By Detlef A. W. Wendisch, Reviewed by *Robert S. McDonald,* p. 170

Name Reactions and Reagents in Organic Synthesis. By Brandford P. Mundy and Michael G. Ellerd, Reviewed by *Roger Beckman,* p. 170

Interfacing and Scientific Computing on Personal Computers, By J. N. Demas and S. E. Demas Reviewed by *Steve Musser,* p. 171

Handbook of Chemistry and Physics, 71st ed, Reviewed by *G. W. A. Milne,* p. 171

LIMS: Applied Information Technology for the Laboratory. By Richard R. Mahaffey Reviewed by *Raymond E. Dessy,* p. 172

Chemical Structure Informationh System: Interfaces, Communications, and Standards, Reviewed by *David Bawden,* p. 172

Laboratory Lotus: A Complete Guide to Instrument Interfacing. By Louis M. Mezei, *Reviewed by Ed Vitz,* p. 172

A Computer Approach to Chemistry. by David M. Hirst, Reviewed by *Richard W. Counts,* p. 173

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

OCTOBER 1990 Vol. 67, No. 10
Teaching FFT Principles in the Physical Chemistry Laboratory, *Colin Steel, Thomas Joy, and Tom Clune,* p. 883

Computer Series, 119
Extensive Student Use of a Spreadsheet in Quantitative Analysis, *Jerome L. Mullin and Robert J. Eierman,* p. 878

NOVEMBER 1990 Vol. 67, No. 11
The Group Equivalent Reaction: An Improved Method for Determing Ring Strain, *Steven M. Bacharach,* p. 907

Introducing On-Line Searching of *Chemical Abstracts* in the Undergraduate Curriculum: An Alternative Approach, *Howard M. Dess, M. Kesselman, and G. M. Muha,* p. 946

Computer Series, 120
A Computer-Based A Computer-Based Approach to Teaching Quantum Dynamics, *John J. Tanner,* p. 917

A Suggested Improvement for the Computer-Aided Optical Metting-Point Devices, *Michael Masterov and Jde Sylvestre,* p. 963

Computer Series, 121: Bits and Pieces 45 edited by James P. Birk
Teaching Biotechnology, *Helen Brooks, Sheldon M. Schuster, and Dwane E. Wylie,* p. 1033

Simulation of the Infrared Spectrum of HCl, *Qian Pu,* p. 1034

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1991年第6巻第1号 論文題目、著者、頁

編集後記

9巻2号をお届します。発行日から稍経過しましたことをお詫びします。この号ではこの春から秋にかけて部会が主催する3件の主要な部会行事を掲載することが出来ました。部会員の皆様はもとより、職場の方々にも参加をお勧めいただく際の資料としてお役立て下さい。

さて、長らく部会幹事を務められ、特にこの2年間は編集委員長として質量共に本誌の充実をはかってこられた図書館情報大学石塚英弘先生が前号を最後に編集委員を退任されました。本当に御苦労様でした。本号からはこれまでの今井　賢（立正大学）、小出昭夫（日本ＩＢＭ）、四居靖彦（第一製薬）に新たに宮下芳勝（豊橋技術科学大学）を加えた4名で後を引き継ぐことになりました。これまでと同様、御支援御鞭撻のほどお願い申し上げます。

（四居靖彦）

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 9, Number 3
May 1991

目　　次

部会行事

第１４回情報化学討論会

主催　日本化学会情報化学部会

共催　日本化学会、日本薬学会、日本農芸化学会、日本分析化学会、日本化学プログラム交換機構

日時　１９９１年１１月２７日（水）、２８日（木）、２９日（金）

会場　（財）川口総合文化センター　リリア(Lilia)

〒３３２　埼玉県川口市川口３－１－１　ＴＥＬ　０４８２－５８－２０００

ＦＡＸ　０４８２－５８－２１００

交通　ＪＲ京浜東北線川口駅下車　西口駅前

（ＪＲ川口は東京から京浜東北線で３０分、新宿から埼京線経由赤羽乗換で約２０分）

なお、本討論会は第１９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　７月１５日（月）

１件ごとにＢ５判（縦）の用紙に横書きで次の事項を記入の上、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下さるようお願いすることがあります）

講演要旨締切　９月２０日（金）

講演１件について所定の用紙４枚まで。他に半ページの英文要旨を添付して下さい（用紙や記入要領は申込みを受理したのち送付します）。

懇親会　１１月２８日（木）１８時より、銀座アスター川口賓館（リリア１４階）で、第１９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　６，０００円　　当日　７，５００円

講演要旨集（構造活性相関シンポジウム要旨集と合本）１冊を含みます。学生の方は事情によってはウエーバー方式をとりますので、予約申込みの時お知らせ下さい。

講演要旨集の前送を希望される方は送料として１０００円追加。

懇親会費　　予約　６，０００円　　当日　７，０００円

参加登録・懇親会各予約及び要旨集前送申込締切　１０月１５日（火）

予約及び申込方法　Ｂ５判（縦）用紙に横書きで、氏名・勤務先・住所（電話、ファクシミリ）、懇親会出欠、要旨集前送希望の有無をご記入の上、下記宛お送り下さい。なお、予約及び申込の方は締切日までに下記銀行口座へ所定の金額をお振込み下さい。確認後、確認書をお送りします。

申込及び予約先　〒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

情報化学討論会　　細矢治夫

銀行口座　銀行名　　住友銀行大塚支店

口座番号　普通預金　６３０９０２

名義　　情報化学構造活性実行委員会

問合せ先　電話 03-3943-3151(代表)　内線　細矢553 平野551 鷹野559 藤枝562

ファクシミリ 03-3942-2815（宛先個人名を明記して下さい）

第5回情報化学部会 国際ワークショップ
「国際的視野から見た情報化学の現状と将来」
参　加　者　募　集

日本分析化学会創立４０周年記念事業として、ＩＣＡＳ'９１（IUPAC International Congress on Analytical Sciences 1991）の開催が、平成３年8月２５～３１日に幕張メッセで予定されています。討論主題4に「Chemometrics and Robotics」があり、その中でミニシンポジウム「Recent Analytical Approach in Chemometrics and Computer Chemistry」（オーガナイザーは藤原譲教授（筑波大））が8月２９～３０日に開催され、次の外国からの参加者が予定されています（5月上旬現在）。

来日予定者（順不同、敬称略）

Bruce R. Kowalski (Univ. Washington, USA)
N. Otto (Bergakademie Freiberg, Germany)
G. R. Eaton & S. Eaton (Univ. of Denver, USA)
Xiaoru Wang (Xiamen Univ., P. R. China)
Johanna Smeyers-Verbeke (Vrije Univ. Brussel, Bergium)
Sergey V. Medvedev (Moscow Sci. Prod. Ass. "NIOPIK", USSR)
Vijama Raju Kurimella (Andhra Univ., India)
Wolfhard Wegscheider (Graz Univ. Tech., Austria)
John Kalivas (Idaho State Univ., USA)
Lloyd A. Currie (Nat. Inst. Stand. Tech., USA)
Shouzhno Yao (Hunan Univ., P. R. China)
Mikhail Elyashberg (All Union Res. Inst. Org. Syn., USSR)

情報化学部会では、この同じ時期に、情報化学に興味をもつ外国からの参加者もまじえてワークショップを開催し、国際交流の場を一層広げたいと考えています。8月末のご多忙なときですが、皆様方、大勢をお誘い合せの上、ご参加をお願いいたします。

日　時：　平成３年8月２９日（木）午後～夕方（懇親会も予定しています）

会場・プログラムなど詳細は次号でお知らせします。お問い合わせなどは、恐縮ですが、書面で下記へお願いします。

〒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　藤枝修子宛
電話 03-3943-3151 ext.562　ファクシミリ 03-3942-2815 （藤枝宛を明記）

ワークショップ報告

第２回ケモメトリックス・ワークショップ

平成３年２月１５日（金）午後１時より表題のワークショップが豊橋技術科学大学で開かれました。当日は二つの低気圧が通過し、強い雨風のあいにくの天候でしたが４８名が参加され、活発な討論が行われました。このケモメトリックスに関する第１回のワークショップは平成２年１月２２日（月）お茶の水女子大で藤枝修子先生が世話人となって開催されています。今回は豊橋技術科学大学の佐々木愼一学長がまず開会のあいさつをおこないました。続いて藤枝修子先生がケモメトリックスに関する国内の動向と今後予定されている国内で開かれる国際学会ＩＣＡＳ'９１およびＣＡＭＳＥ'９２について述べられました。この二つの学会にはケモメトリックスのセッションが含まれています。続いて前半の三つの講演に移り座長を髙木達也先生（大阪大学）にお願いしました。コーヒーブレイク後、三戸邦郎氏（三井東圧化学）に後半の二つの講演の座長をお願いしました。講演終了後学内の談話室でなごやかに懇親会が開かれました。今回は化学パターン認識、ケモメトリックスの食品化学へ応用、ＰＬＳ法と実験計画法、多変量解析による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でした。

第３回のワークショップは髙木達也先生（大阪大薬）と山川眞透氏（塩野義製薬）が世話人となって開かれる予定です。次回のワークショップを開催するにあたって、とり上げてほしいテーマやソフトウェア、および紹介したいソフトウェア等についてのご意見を参考にしたいと思います。是非下記宛に御連絡下さい。

〒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
宮下芳勝　Tel 0532-47-1111

化学パターン認識と計量化学

（豊橋技術科学大学）宮下芳勝

計量化学(Chemometrics)とは統計学および数学の化学への応用として定義される新しい研究分野である。今回は計量化学のうちパターン認識の化学への応用を中心にした研究を紹介した。パターン認識には判別分析や学習機械の様なクラス識別を志向したアプローチと、ＳＩＭＣＡやＰＬＳの様なモデル化志向のアプローチが有る。ＰＬＳ法の利点を生かした構造ー活性相関研究を二つ紹介した。Ｎーニトロソ化合物の構造と発ガン性の相関をＰＬＳ判別分析法で解析した。肝臓および食道に対してＮーニトロソ化合物の構造を物理化学的パラメータで表現し発ガン性のモデル化をおこなった。モデル式より標的臓器の選択性に関する知見を得ることができた。次にセリンプロテアーゼであるエラスターゼに対する基質ペプチド Suc-A-B-Ala-PNA のlog kcat および log kcat/KmについてＰＬＳ解析をおこなった。ＡおよびＢの位置を天然のアミノ酸残基が占めるペプチドのデータでＰＬＳモデル式を得た。このモデル式の妥当性を検討するためにＡ，Ｂを非天然のアミノ酸残基が少なくとも一つ占めているペプチドについて log kcat, log kcat/Kmの予測をおこなった。その結果良好な予測がおこなわれたことから、ＰＬＳ法はモデル式の開発のみならず予測にも優れていることが明かとなった。最後に計量化学の新しい分野として注目されているファジー理論とニューラルネットワークの応用を簡単に紹介した。

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（株）研究本部）　相島鐵郎

複雑な多成分系である食品の分析データは本来多次元性を有する。つまり食品分析データからの情報抽出には、パターン認識などのケモメトリックス的な手法を適用する必然性がある。まずパターン認識のケモメトリックスにおける位置付けをし、各種手法の概念を簡単に紹介した。次に食品の官能特性のうち化学感覚である香りと味を呈する成分の機器分析の現状を概説した。パターン認識の適用例として、香りに関しては複数半導体ガスセンサーの応答パターンに基づく香気識別について、味に関しては近赤外分光（ＮＩＲ）データによる資料の分類、識別を紹介した。複雑な香気成分組成からなるコーヒー、酒類、精油に対するガスセンサー応答パターンのクラスタ分析、線形判別分析により試料が高い精度で分類、識別できることを示した。またセンサー応答と官能的な特性との対応付けの可能性も示唆した。さらにＮＩＲスペクトルのクラスタ分析、因子分析、判別分析により種類やばい煎度合の異なるコーヒー豆が高い精度で分類、識別できることを示した。最後に、欧米の一神教的な考え方を土台にして発展してきたケモメトリックスに対し今後、多神教文化の影響を受けた日本の科学がどのように貢献できるかの問いかけを行った。

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

タンパク質のアミノ酸配列からその高次構造を予測しようとする様々な試みがなされているのは周知の通りである。この場合の一つの大きな問題は、配列中での各アミノ酸残基の環境を如何に記述するかと言った点にある。ここでは、二次構造予測に関連して、タンパク質中の各アミノ酸残基の配列上での周辺環境を記述するために、対応するアミノ酸の種々の物理化学的特性値に基づくベクトル表現を用いた試みについて述べた。配列上の識別目標とするアミノ酸（標的アミノ酸）について、前後ｍ残基すなわち２ｍ個の周辺残基に注目し、各残基をｐ種の異なる特性値で表現すると、標的アミノ酸の周辺環境は２ｍ×ｐ個の要素からなる一つの多次元ベクトルとして記述できる。言い替えれば、これはまた注目する残基環境をこれらの多次元特性空間における一つのパターン点と見なすことができる。従って、このことからその環境の差異による高次構造（ここでは二次構造）との関係をパターンクラス分類の観点から検討することが可能であることを述べると共に、そこでは様々な手法が適用可能であることを紹介した。

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

（住友化学工業株式会社）勝見広幸

実験での特性値最適化問題を効率的に進めるための統計的手法に焦点を当てた。具体的には、薬物設計での構造活性相関や材料設計での構造物性相関、さらに反応条件最適化問題等について、それらの実験デザインから結果の解析・最適値予測にいたる過程に含まれる問題点を挙げた。実験デザインについては、これが不適当な場合には冗長な実験となる例や実験結果から有効な情報を得られない例を示し、実験から的確に情報を得るためには元の実験デザインそのものの良否が重要な鍵となる事を示した。次に実験結果のモデル化手段として広く用いられる重回帰分析法について触れ、重回帰モデルは単純で解釈が容易な反面、変数の数の制限や変数間相関及びChance Correlation等の問題があり、系が複雑で予めその物理化学的作用機作の仮定が困難な問題への適用は難しい事を示した。　これらの問題点を解決するために、新規に開発した実験デザインと解析・予測のためのシステムSPECTRE（(伊)L'Aquila大学，Mario Marsili教授との共同開発）について述べた。ここではまず、最小の実験から有効に情報を得ることを目的とし、既に実施されている実験に問題がある場合の追加実験計画作成法などについて述べた。解析と予測については、ＰＬＳ法をベースに、複雑で予備知識が少ない系のモデル化を可能とし、その物理化学的要因の抽出を行うためのモデル化手法について述べ、最後に本システムの活用例について触れた。

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）山川眞透

主として定量的構造活性相関(QSAR)解析を用いて医農薬がどのように設計されるのかについて実例に基づいて解説した。出席者は必ずしも製薬関係の人とは限らないので最初に実際に開発に用いた典型的な例を二例取り上げて入門的解説を行なった。キノロン系合成抗菌剤における成功例を示し、疎水性パラメータの重要性を指適した。次にアルドステロン誘導体のミネラロコルチコイド受容体への親和性のQSAR解析を例にあげて、分子の三次元立体構造がどのように親和性と関連しているか、また、どのような立体パラメータによって、それを表現すればよいかについて述べた。続いて、実際にQSAR解析を行なうにあたり必要になるより高度なテクニックについて解説した。生物活性が離散量で表現されている場合の取り扱い方法としてのロジスティック回帰法、サンプル数に比べて説明変数が多い場合の解析法の一つとしての主成分回帰法について適用例を示して説明した。最後にこれからの発展が期待される3D-QSARの分野からPLS法を利用したCoMFA法を取り上げて紹介した。

情報化学部会　第１回講習会 報告

「シニアケミストのための化学パーソナルコンピュータ利用講習会」

平成3年3月19日（火）の10時から16時30分まで、放送大学東京第二学習センター（東京都文京区大塚、旧東京教育大学校舎）のご協力をえて、上記テーマの講習会を開催した。参加者は40代～60代の12名で、民間企業と自営業の方々であった。キーボードには今までに全くご縁が無かった方から、欧文タイプライターに経験のある方までの広がりはあったが、この機会にぜひ学びたいという熱意に燃えた方々のように見えた。

午前中は講義形式で、はじめ藤枝が最近のパーソナルコンピュータ（パソコン）情報、日本語ワープロ事情、ＯＳ関係など全般的なことを説明し、次いで山崎から化学の分野でのパソコン利用、ソフトのコピーライト、参考書などの話があった。

昼食後、実習用機材として、ＮＥＣ　ＰＣ－９８０１ＶＭ２１が教師用を含めて１３台設置された実習室を拝借した。シニアケミストの特徴として参加者により興味の在り方が大幅に異なるであろうと考え、何年か前に、日本化学会へＮＥＣからパソコンを借用して行った第０回講習会の経験などもふまえ、大学の授業とは違うであろうという予想のもとに、日本語ワープロ（一太郎　Ｖ．３）の練習用ディスクを準備し、実習はそれに沿って個人対応で進めた。当日、梶川博司（電通大）、新谷紀子（お茶女大）の両氏がアシスタントを務めて下さったので、疑問点に対する即応態勢は好評であった。話はやや悲しくなるが、老眼でも疲れずにワープロを続けるためのノウハウの披露も行った。欧文ワープロのＴｅｃｈｎｏＭａｔｅ２も実習を予定していたが、やや時間不足であった。

今回の参加者から意見や希望を聞いて、次回以降に活かすために、講習会終了後簡単な懇親会を開いた。最寄りのお茶女大から細矢治夫先生と平野恒夫先生がご出席下さった。参加者からは、年齢制限による同世代の集りであったこと、講師も同世代であったことが良かったというご意見があり、通信、ネットワークなど色々なテーマで開催して欲しいというご希望もあった。情報化学部会の会員の方も何人か参加して下さったが、学生達と違って、横の連絡が難しい世代や、職場におられる方にとって、雑誌や本に書いてないような情報や、よもやま話的内容の人手が望まれていることを感じた。

（電通大　山崎　昶、　お茶女大　藤枝修子）

年会報告

第61春季年会報告

２Ｃ５０７：ＮＭＲスペクトル・データベースーファクト・データベースの一例としてー

化学技術研究所で継続的に行われている有機化合物のＮＭＲスペクトル・データベースの現状報告であった。また、同じ化合物について ^{1}Hと^{13}Cのスペクトルが納められていることにより ^{2}D－ＮＭＲのシミュレーション的な利用法が出来るとの興味ある実例も示された。また、測定装置が当初の 90MHzから400MHzに移行しつつあるとの報告は同様の仕事をしている筆者にとっては大変羨ましいものであった。

２Ｃ５１０：パソコン通信による化学情報の交換

日本化学会がやっと重い腰を上げて会員のための通信ネットワークサービスを始めるという歓迎すべき報告があった。商用ネットワークを利用することによる制限はあっても、迅速な情報交換が出来るようになったことは大きな進歩であろう。今後の発展が期待される。また、化学構造式の通信というこのコミュニティ独特の問題に取り組まれているとのことで、むしろこの話題を中心とした突っ込んだ議論が欲しかった。

（豊橋技術科学大学　阿部　英次）

２Ｃ５１４　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（４）パソコンシステムの開発　（化技研）田辺和俊，田村禎夫，（ＦＨＬ）上坂博亨

ニューラルネットワーク技術を利用した赤外パターン認識の続報である。この発表は，情報処理技術として話題のニューラルネットワークが情報化学の分野でどのように応用されるのか，多くの研究者が関心を寄せ，成果に期待している研究である。その高い注目度は質問者の数の多さ，および質問内容からも推し量れよう。３層構造のニューラルネットにより，０．１秒以内という極めて短時間の内に１０００件の赤外スペクトルとの照合，認識が可能との報告であったが，スペクトル件数の増加に伴い学習に要する時間がかなりかかるのではないかとの実用化への問題点の指摘があった。

２Ｃ５１５　分析スペクトル情報管理システムの開発　第１報
（三井石化）西村竜一，中村玲子，山崎徹

約４万件の赤外吸収スペクトル情報の検索システムの開発現状の報告である。システムの機能として部分構造を含む構造検索，構造同定のためのスペクトル検索および分子式などのデータ項目検索並びに，表示・印刷機能を有する。本報告に類する研究は情報化学討論会で幾たびか発表されてきた。これら既報の業績に対して主張できるオリジナリティの開発と今後のネットワーク化への進展に期待したい。

２Ｃ５１６　レセプターサイト推定のためのタンパク質ポケット領域の探索法
（豊橋技科大）Carlos A. Del Carpio，高橋由雅，佐々木慎一

タンパク質分子の溶媒接触可能表面を多面体頂点によって近似するアイデアと，３次元空間に浮かんだ点集合を対象にタンパク質構造中のポケット領域を探索するアルゴリズムとは共に科学的独創性に富んだ傑作といえよう。このグループの常日頃の科学的感性を高める研究姿勢をうかがい知ることができる。

２Ｃ５１７　ＰＬＳ法によるフェニルピリジン系抗不整脈剤の構造ー活性相関
（興和（株）東京研究所・豊橋技科大）長谷川清，執行洋陸，蘇木宏之，宮下芳勝，佐々木慎一

本報告は，Partial Least Squares Method によりフェニルピリジン系化合物の抗不整脈作用発現のための識別関数を示したものである。ベンゼン環上の置換基の体積，角度，またＰＫａ値が抗不整脈作用に関与することを定量的に明らかにすると共に，従来の仮設を支持するものとして意義深い。

（立正大教養　今井　賢）

２Ｃ５２５　シクロデキストリンの分子認識　βＣＤ－ｄ，ｌマンデル酸系
（神奈川科学技術アカデミー、東京農工大）岡崎、山下、赤池、安川

シクロデキストリンの特異的分子認識メカニズムの研究で、β－シクロデキストリンとｄ－，ｌ－マンデル酸メチル（MM）の包接化合物形成自由エネルギー差を光学異性体につき分子動力学摂動法で計算した。ガス相と水分子共存（水溶液）系の動力学シミュレーションにより、MMが取り込まれるときのエステル基の向きの関係が分かりやすく示された。

２Ｃ５２６　化学物質の分解性の予測　分子軌道法による置換基定数σ_1の推算
（化技研）田辺、都築、小野

σ_1と電子密度に高い相関があることを利用し、σ_1未知の置換基のσ_1を求める方法を検討した。σ_1既知の置換基をもつ分子の半経験的分子軌道法で電子密度を計算した。ＣＯＯＨ基の例では高精度でσ_1の推算が行われた。

２Ｃ５２７　数式処理を利用した化学動力学計算の自動化　　（大阪電通大）藤田岩男

反応機構にいくつか可能性があるとき、それぞれで式を立てて実験結果と一致するものを選ぶことを行うが、この自動化を行う巧妙な試みである。化学反応式を入力し、求める分子種濃度を反応物濃度の関数で表し、方程式を解いている。複雑な例として、Ｈｅ－ＣＯ混合気体の放射線照射によるＣＯ$^{\cdot}$生成機構を報告した。

２Ｃ５２８＊　有機化合物ＩＵＰＡＣ命名支援システムの開発
（豊橋技科大）阿部、高橋、佐々木

有機化合物の構造式を入力し、正しいＩＵＰＡＣ名を得るシステムの開発で、学部卒業程度の知識で使えることを目標にしている。プログラムは官能基検索、鎖の命名、環の命名から成り、最後の詳細が報告された。構造式の入力に既存のグラフィック入力プログラムとインターフェイスがとれる。身近な日常的利用や教育用にも使えれば有難いと思いながら聴いていた。

（お茶女大　藤枝修子）

２Ｃ５３１
ミニフォーラム「化学構造式の自動解読にまつわる諸問題」（東海大）米田幸夫

印刷あるいは手書きの化学構造式をイメージスキャナーで読み取って結合関係表を自動的に作成するパソコンシステムについて、そのアルゴリズムおよび問題点に関する発表である。印刷の構造式よりは手書きの方が解読しやすいというのは意外である。大部分の構造式の解読には成功しているようであるが、構造式の表記法の多様性のために、完全なシステムを追求するとシステム開発の労力は莫大なものになろう。演者が提案しているように共同開発する必要があろう。

２Ｃ５３４
ミニフォーラム「プログラム（ＢＡＳＩＣ、ＰＡＳＣＡＬ、Ｃ）をつくるソフトの開発とコンピュータ教育」（工学院大）渡部正利

中学校のコンピュータ教育のために、画面の上で文字や図形を書くことによって、ＢＡＳＩＣなどのプログラムを自動的に作成するソフトを開発した経緯に関する発表である。プログラムの文法の勉強をいかに軽減させてプログラムの作成に慣れさせるかという難しい問題に対する１つの対策であろう。「他人の作ったプログラムを解読する方が大変ではないのか」、「プログラムを自動的に作成すると冗長にならないか」などの質問があった。

化学技術研究所　田辺　和俊

部 会 記 事

情報化学部会 常任幹事会(第一回)議事録

日時: 1991年3月15日(金) 10:00–13:00
会場: 日本化学会仮事務所会議室
出席者: [部会長] 藤原　譲、[副部会長] 吉田　元二、
[幹事] 藤枝修子、藤田眞作、山崎 昶、四居　靖彦、
[事務局] 保倉　光邦

議題

常任幹事会の初回なので，役割分担の確認，関係規程類の確認，会員数の確認を行ったのち　次の事項を協議した。

年間スケジュールの検討　平成2年度の活動状況を確認したのち、平成3年度の事業計画を検討した。

部会長改選方法　実態を踏まえた選出手順をまとめ、役員会(3月30日)にて決定することにした。

予算の確認　事務局より説明。事業費のうち講習会・講演会費は、パソコンソフト1セット(20組)(講習会用)の購入に充てる。

各担当幹事の報告　総務(藤枝幹事)，編集(四居幹事)，企画(山崎幹事)より報告。

その他
- 部会賞を設けることの提案(吉田副部会長)があり，次年度を目標に検討を始めることとした。
- 年会の情報化学分野の研究発表の件数が少ないことに関して議論があった。情報化学の意味する専門分野がはっきりしないという問題点が指摘された。情報化学の包含する分野を列挙して会員増強に資することが必要。

(藤田　眞作記)

情報化学部会　総会（平成３年度第１回）報告

平成３年３月３０日開催

日本化学会第６１春季年会が３月２９日（金）～４月１日（月）に慶応義塾大学日吉校舎（横浜市）で開催された。２日目の「化学情報と計算機化学」の講演とミニフォーラムが終了した後、引き続いて３時から１時間余り、情報化学部会総会が行われた。

平成３年はじめての総会であり、藤原部会長の挨拶で開会した。各委員会からの議事として、

企画から：平成２年度の部会活動はやや低調であったので、今年度はもっと活発にするため、いくつかの講習会が提案された。

１）データベース利用講習会　（DIALOG，JOIS，CAS-ONLINE，STN など）各担当として、紀伊国屋、JICST、JAICIの先生方に依頼。
企業の方々に利用者側のノウハウを盛り込んでいただくよう、協力依頼があった。

２）パソコン利用講習会　３月１９日（火）にシルバーエイジ対象に東京で第１回開催の報告があった。
シニア、若手など対象別に行うこと、地域性とそこで要請される内容の検討を地域からの先生方に検討していただく。

３）ネットワーク利用講習会　化学会が NIFTY-Serve に「化学の広場」を開設したので、遠隔地の幹事の先生方に、利用方法講習会の検討・企画のお世話をお願いする。

第４回ワークショップ「化学構造式の自動解読」を５月１０日（金）、東海大で開催予定（世話人は米田幸夫（東海大）先生）。

編集から：平成２年発行のVol.8 （総頁数 348）と、平成３年のVol.9　No.1 （特集ニューラルネットワーク）の報告、No.2 には部会員名簿掲載、次号以後の計画予告があった。

総務から：年会時の化学情報・計算機化学の会場へ入る人のプロフィールを知るためのアンケートを行った。
平成２年度の活動報告、決算・予算関係、部会員数（前回報告数462，入会140 退会29，除籍2，合計571）の報告があった。
平成３年度は部会長改選の年にあたる。例年通り部会の年間スケジュールを作り、その説明があった。

第１４回情報化学討論会関係　平成３年１１月２７日（水）～２９日（金）に、（財）川口総合文化センター（リリア）で開催を予定しており、第１９回構造活性相関シンポジウムと同時同会場で開催することを、実行委員長（細矢治夫教授（お茶女大））から報告され、準備状況の説明があった。そして、会場は、埼玉県とは言うものの、東京から３０分、新宿から２０分の便利なところであり、大勢の方々の参加を希望された。

討論議題として、１．賞をつくる件

２．春年会時の「化学情報・計算機化学」の今後の進め方

の２つが一応提案された。１の意見は無く、２で大変に活発な意見交換が行われ、関心の高さが示された。その主な内容は、

○この年会では、一般講演の件数が比較的少なく、「見かけ上」低調な分野のように見られるかもしれないが、現在の年会のやり方では、１人１件の条件があり、情報化学部会の人も別の分類項目に出さざるを得ない。従って、化学情報・計算機化学の研究発表は、討論会に出すことになる。

○情報化学討論会と年会の間が比較的短いこと。

などの理由から、春の年会はミニフォーラムを主体とする進め方がよいと言う意見があった。

○図書館関係の化学情報を扱う人達も参加できる部分が必要だ

というご意見もあった。

今回の総会は時間的にも比較的余裕があり、大勢学生のいる研究室と孤軍奮闘の研究室にまで話が進んだ。大勢の方の発言があり、十分意見が出し合えたと思う。春年会時の運営は、日本化学会とも関係するので、次回から検討しようと言うことになり、散会した。

（総務担当　藤枝修子（お茶女大））

情報化学部会収支報告書

（平成２年３月１日〜平成３年２年28日）

〔収　入　の　部〕　　　　　　　　　　　　　　　　　　（単位：円）

科　　　目	予　算　額	実　績　額	差　　　異
部　　会　　費	4,020,000	4,316,088	296,088
正部会員（会　員）	(600,000)	(833,000)	(233,000)
正部会員（非会員）	(90,000)	(135,000)	(45,000)
学生部会員	(30,000)	(18,500)	(△ 11,500)
法人部会員	(3,300,000)	(3,329,588)	(29,588)
事　　業　　費	250,000	16,500	△ 233,500
広告掲載料	550,000	450,000	△ 100,000
合　　　計	4,820,000	4,782,588	△ 37,412

〔支　出　の　部〕　　　　　　　　　　　　　　　　　　（単位：円）

科　　　目	予　算　額	実　績　額	差　　　異
Ｂｕｌｌｅｔｉｎ費	2,280,000	2,733,947	△ 453,947
事　　業　　費	1,000,000	180,983	819,017
会　　議　　費	752,000	480,609	271,391
事　　務　　費	193,000	172,617	20,383
事務負担金	595,000	595,000	0
合　　　計	4,820,000	4,163,156	656,844

収支差額	0	619,432	619,432

関連行事

第19回構造活性相関シンポジウム

日時　1991年11月27日（水）、28日（木）、29日（金）
会場　（財）川口総合文化センター　リリア（Lilia）
　〒332　埼玉県川口市川口3－1－1　TEL　0482－58－2000
　　　　　　　　　　　　　　　　　　FAX　0482－58－2100
　交通　JR京浜東北線川口駅下車　西口駅前
　　（JR川口は東京から京浜東北線で30分、新宿から埼京線経由赤羽乗換で約20分）
　なお、本討論会は第14回情報化学討論会と併催されます。
共催　日本化学会、日本薬学会、日本薬学会関東支部、日本農芸化学会、日本農薬学会、日本生物物理学会、構造活性相関懇話会
討論主題　生理活性に関連した構造活性相関
講演申込締切　7月15日（月）
　1件ごとにB5判（縦）の用紙に横書きで次の事項を記入の上、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)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下さるようお願いすることがあります）
講演要旨締切　9月20日（金）
　講演1件について所定の用紙4枚まで。他に半ページの英文要旨を添付して下さい（用紙や記入要領は申込みを受理したのち送付します）。
懇親会　11月28日（木）18時より、銀座アスター川口賓館（リリア14階）で、第14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　6、000円　　　当日　7、500円
　講演要旨集（情報化学討論会要旨集と合本）1冊を含みます。学生の方は事情によってはウェーバー方式をとりますので、予約申込みの時お知らせ下さい。
　講演要旨集の前送を希望される方は送料として1000円追加。
懇親会費　　予約　6、000円　　　当日　7、000円
参加登録・懇親会各予約及び要旨集前送申込締切　10月15日（火）
予約及び申込方法　B5判（縦）用紙に横書きで、氏名・勤務先・住所（電話、ファクシミリ）、懇親会出欠、要旨集前送希望の有無をご記入の上、下記宛お送り下さい。なお、予約及び申込の方は10月15日（火）までに下記銀行口座へ所定の金額をお振込下さい。確認後、確認書をお送りします。
申込及び予約先　〒112　東京都文京区大塚 2-1-1　お茶の水大学　理学部化学教室
　　　構造活性相関シンポジウム　細矢治夫
銀行口座　銀行名　　住友銀行大塚支店
　　　　　口座番号　普通預金　630902
　　　　　名義　　　情報化学構造活性実行委員会
問合せ先　電話 03-3943-3151（代表）　内線　細矢553 平野551 鷹野559 藤枝562
　　　　　ファクシミリ 03-3942-2815（宛先個人名を明記して下さい）

講習会「分子力場計算の基礎と応用」

主　催　日本化学会関東支部

日　時　平成３年10月４日（金）　９時30分〜17時30分

会　場　日本化学会７階ホール　（東京都千代田区神田駿河台１－５）
〔交通〕ＪＲ、地下鉄とも“お茶の水”駅下車、徒歩５分

主　旨　物質の物性や反応性あるいは分子間の相互作用を予測する手段として、分子力場計算法は化学や薬学などの諸分野で活発に利用されるようになっております。本講習会では、この計算法を実際に使おうとしている研究者の立場にたって、それぞれの分野でご活躍中の先生方にわかりやすく解説していただきます。多数の方のご参加をお待ちしております。

内　容

１．分子力場計算法の現状と見通し
（分子力学法全般にわたる問題点、見通し、とくに分子動力学法との関連、溶媒効果のとりいれについて述べる）
（９：30〜10：50）　豊橋技術科学大学知識情報工学系　大澤　映二　氏

２．配座変換と分子力場計算
〔配座間のエネルギー障壁を分子力場計算により予測する〕
（11：00〜12：20）　東京大学理学部化学教室　山本　学　氏

３．分子力場法の有機合成への応用
〔ＭＭ２計算による安定配座エネルギーの決定と反応の選択性の予測〕
（13：40〜14：50）　東京工業大学工学部化学工学科　高橋　孝志　氏

４．薬品開発を指向したバイオケミカル　エキスパートシステムへの応用
〔受容体の立体構造を基礎とした薬物 — 受容体相互作用のコンピューターを利用した理論的研究〕
（14：50〜16：00）　北里大学薬学部製薬学科　梅山　秀明　氏

Coffee break（16：00〜16：20）

５．機能性高分子の分子設計
〔結晶軌道法計算による導電性・強磁性などを持つ機能性高分子の設計〕
（16：20〜17：30）　京都大学工学部石油化学教室　田中　一義　氏

参加費　（講演要旨代含む）　会員１３，０００円、学生７，０００円、非会員２０，０００円
ただし、参加者自身が非会員でも勤務先が日本化学会法人会員の場合は、会員扱い（１３，０００円）といたします。

参加申込方法　ＦＡＸ、葉書または適当な用紙に「分子力場計算講習会」と標記し、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・部署名（役職名）・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 口座番号 358469 名義：㈳日本化学会関東支部）〕を明記のうえ下記宛お申し込み下さい。（原則として、請求書発行は省略させて戴きますが、どうしても必要とする場合は、その旨明記して下さい。）
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週間前にお手元に届くようお送り致します。

申込先　〒１０１　東京都千代田区神田須田町１－９　教信木田ビル　㈳日本化学会関東支部
講習会係　電話（０３）３２５８－９８１３　ＦＡＸ（０３）３２５８－９８１０

国内の動き

日本化学プログラム交換機構（ＪＣＰＥ）について

田辺　和俊

日本化学プログラム交換機構（略称ＪＣＰＥ）が発足してほぼ２年が経過しました。設立の趣旨などについては本誌の７（１）１６（１９８９）、および７（５）４１（１９８９）に紹介されていますので、その後の状況を記します。

本機構では幾つかの事業を行うことにしていますが、中心は機構の名前が示すとおりのプログラム交換です。ＱＣＰＥと同じように、研究者が自作したプログラムを本機構に寄託してもらい、希望者に実費程度の金額で頒布します。本年３月末に発行されたニュースレターの最新号にはＭＭ２やＭＯＰＡＣをはじめとして４５本のプログラムが掲載されています。これに対してプログラム頒布の申込はすでに総計で１４００本以上きています。代表的なプログラムの頒布状況は、ＭＯＬＭＯＬ（Ｐ００８）１７６本、ＧＵＭＭＯＳ（Ｐ０２３）１１１本、ＭＤＯＲＴＯ・ＸＤＯＲＴＯ（Ｐ０２９）９３本、ＭＭ２（Ｐ００１）７５本、ＭＯＰＡＣ（Ｐ０１６）６２本、ＭＯＰＡＣ（Ｐ０２８）６２本、ＭＯＰＡＣ（Ｐ０１５）５８本、ＡＭＰＡＣ（Ｐ０２２）５１本、ＥＸＴＯＩＮ（Ｐ００２）５０本などとなっています。本機構が目的通りに機能できるか否かは化学関連のよい国産のプログラムを多数収集できるかどうかにかかっています。そのためには国内の計算機化学研究者の協力が必要です。ぜひお手持ちの自作プログラムを寄託して下さい。

会員にはニュースレター（季刊）を配布するほか、本機構でプログラムの使用法や基礎原理などに関する講演会、講習会を開催しています。ニュースレターにはＪＣＰＥ登録プログラムのほかに、この分野に関連した項目に関するレビューなども随時掲載されます。講演会、講習会、ワークショップ、シンポジウムなども開催しております。

本機構は１９８９年４月１日から正式に発足し、活動を開始しました。現時点で会員数は７５０口を越えています。本機構は学界、産業界からの会員の会費だけで運営されています。年会費は個人会員２，０００円、団体会員２０，０００円、賛助会員（１口）５０，０００円です。照会などは下記の事務局にお願いします。

本機構がＱＣＰＥのように発展するために、皆さんのご支援をお願いします。

事務局　〒１１３　東京都文京区弥生２－４－１６　学会センタービル
（社）化学情報協会内　　電話　０３－８１６－３５８１、３５８２

最新コンピューターケミストリーシステム一覧

(平成3年5月現在)

*この表は平成3年5月21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
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 Macintoshシリーズ	1,400万円 600万円	87年 91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	
Spec Info	〃	独ケミカルコンセプト社	NMR、IR、MASSスペクトルのデータベースシステム。第二世代のデータベースで、データの集積、検索だけでなく、化学構造式からスペクトルの推定も可能	VAXシリーズ	1,200万円～	91年	
SPARTAN	センチュリリサーチセンタ	WAVEFUCTION INC	3次元グラフィックインターフェースを備え、手軽に利用できるGAUSSIANタイプの非経験的分子軌道計算プログラム。これまで、不可能と考えられていた比較的大きな分子までEWS上にて計算可能とした	IRIS—4Dシリーズ	300万円	91年4月	
GEMS/PREP	〃	センチュリリサーチセンタ	分子設計支援システムGEMSシリーズのグラフィックインターフェースで、3次元分子構造の作成や表示が会話形式で簡単なマウス操作でできる。なお、分子動力学プログラムGEM/MDも近日リリース予定。	IRIS—4Dシリーズ	50万円	91年4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	CONVEX、IRIS、IBM6000	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	98万～350万円(アライントFX予価700万円)	89年12月	
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	
MOLDA&GRIMMVer5.15/5.1J	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
RODRAST-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-2	〃	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シリーズ	6万円	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／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 ＰＣ—Ｈ98m70	19万円	88年7月	
パソコンMOPAC/386（基本プログラム）	〃	〃	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(V5.0)を、32ﾋﾞｯﾄパソコンに移植したプログラム	ＰＣ—9801シリーズ(32ﾋﾞｯﾄ) ＰＣ—98ＸＬ² ＰＣ—Ｈ98m70	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	ＩＲＩＳ４Ｄ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	
ＰＣ—Ａｓｐ	〃	〃		ＰＣ—9801シリーズ(32ﾋﾞｯﾄ)	19万円	91年6月予定	
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ＣＯＳＭＩＳＣ力場を利用	ＩＲＩＳ４Ｄシリーズ ＶＡＸシリーズ	200万円	90年10月	
PC-Cobra	〃	〃		ＰＣ—9801シリーズ(32ﾋﾞｯﾄ)	25万円	91年7月予定	
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。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	290万円	91年6月予定	
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ェア。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	
MOLTS-PROTEIN	〃	〃	たん白質の立体構造(ＰＤＢデータ)を豊富なモデルにより表現。研究支援に加え、論文やプレゼンテーション資料の作成にも力を発揮します	Ｍａｃｉｎｔｏｓｈシリーズ	9万8,000円〜14万8,000円	91年7月（予定）	
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
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	

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
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	〃	３万6,000円	88年４月	120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	110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欠落、パラメータ自動補填、ＭＯ用Ｚ—ＭＡＴＲＩＸ自動生成、ＩＲ、ＮＭＲ、ＵＶ各スペクトル予測等、実務に最適なシステムを低価格で実現	ＳＵＮ, ＮＥＷＳ, ＹＨＰ9000	500万円〜	88年11月	30本
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		
HAZARDEXPERT(ハザードエキスパート)	〃	〃	プログラムは、微生物から哺乳動物にいたるまでの八段階の生物に対して有機化合物の予想した危険効果を有毒物質制御法とともに評価する。毒性予測のツールに最適	ＩＢＭＰＣ/ＡＴ、ＰＳ55、ＰＳ2、ＡＸマシン、Ｊ—3100シリーズ	350万円	90年６月	
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	1,300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500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)		85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)		170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)		70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)		55台
GENETYX-SQ	〃	〃	ＤＮＡシーケンサーで決定された核酸配列の結合部分を自動検索するとともに、結合部分をシーケンサーの波形データを比較しながら結合	〃	50万円	91年５月	
GENETXY-MAC/1	〃	〃	マッキントッシュによる遺伝子解析ソフトウエア	マッキントッシュ	20万円	91年４月	60本
GENETXY-MAC/CD	〃	〃	マッキントッシュ用核酸配列データベース、たん白質データベースの検索ソフト	〃	22万円	91年４月	40本
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800本 海外1,500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400台 海外500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15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	545万円 727万円	88年1月	35台
DNASIS-Mac	宝酒造、日製産業	〃	マッキントッショ用遺伝子入力解析システム。従来のDNASISのマッキントッシュ版	アップルMacintosh Plus/SEKSE«çKIIシリーズ/CLASSIC/Portable	90万円	91年8月	
FMBIO-100	宝酒造	〃	蛍光バイオイメージアナライザー。蛍光物質で標識したDNAやたん白質を電気泳動後直接セットすることにより短時間で画像解析を行う装置	アップルMacintoshIIシリーズ	1,450万円	91年7月	
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。8年の実績	PC-9801シリーズ	32万円	82年	約300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	
CRYSTAN-G	マック・サイエンス	マック・サイエンス	低分子結晶構造解析のパッケージ。Open Window GUIを用い、直接法による位相決定から解析結果の表示まで一貫処理。豊富な分子グラフィックスにより解析の過程、結果を即座に確認できる	SUN SPARC2 TITAN	500万円 600万円	91年4月 90年4月	
CAChe システム	ソニー・テクトロニクス キヤノン・スーパーコンピューティングS.I.	ソニー・テクトロニクス キヤノン・スーパーコンピューティングS.I.	3次元の分子設計モデリングシステムを使い易いMACインターフェースによりMOMAC ZINCO MH2等のアプリケーションを利用できる	MacintoshIIfx(8MBメモリ)(X,Ci,Cx,Siでも可) RP88コプロセサポート	183万8,000円	91年4月	
PC/GENE	帝人 和科盛商会	米インテリジェネティクス	核酸からアミノ酸までの全てを網羅した配列情報解析システム。年1〜2回のバージョンアップ。セキュリティー機能あり	PC-9801シリーズ、IBMPC/XT、ATPS/2、互換機	84万円	90年10月	海外含め800本
SEQCODER	帝人	帝人 国立遺伝研	核酸・アミノ酸配列データの登録による個人データベース。構築ツール(主要データベースフォーマットをサポート)	PC-9801シリーズ	7万円	91年3月	
SETPRO	〃	帝人	EWSによるたん白質の1次−2次−3次構造を系統的に予測するたん白質分子設計支援システム(データ入力はパソコン運用)	SUN/PC-9801	〜900万円	91年5月	
Mac Molly	アロカ	独ベルリン自由大学	遺伝子情報解析システム。シーケンス入力・編集から制限酵素サイト探索、シーケンス比較・結合、データベース検索、文献整理などの機能を持つ	マッキントッシュ			

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	化合物、情報データベースの蓄積・検索から立体構造モデルの構築・表示、さらにMO/MM計算・QSARを包含したコンピュータケミストリ統合システム	ACOS−4系	6,500万円	85年12月	
BIOCES〔E〕	〃	日本電気	蛋白工学と医農薬設計のための支援システム。受容体の立体構造の推定から薬物−受容体間の相互作用解析までの機能を提供	EWS4800シリーズ+PS390またはESVシリーズ(E&S社) IRIS	400万〜1,600万円	89年2月	
AMOSS	〃	〃	非経験分子軌道計算に基づく総合計算化学システム。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・化学的性質の解析、予測が可能	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〕	〃	〃	ファインケミカルな分野を対象とする分子設計支援システム。分子モデリング、形状解析、MM/MO計算とエネルギー状態表示などの機能をEWSで実現	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、解析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1,200本
Micro-RESEARCHER II	〃	〃	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。MM・MO計算インターフェースを提供	FACOM VP、M、Aシリーズ Sーファミリ(SUN)	2,900万円 800万	86年6月 89年10月	
ANCHOR/α	〃	富士通	MOPACの計算結果を情報の一括表示メディア(ハイパーウインドウ)により様々な角度から解析・比較・評価することができる分子設計支援システム	Sーファミリ(SUN)	140万	90年11月	
Lead Maker	〃	富士通、呉羽化学工業	製薬、有機材料向け分子設計支援システム。分子計算結果解析、一覧表示が煩雑な手続きを要さずダイレクトに得られる。分子計算一括処理、多重度制御機能を装備	Sーファミリ(SUN)	280万	91年7月	
MACCSII	〃	米モレキュラーデザイン	統合化合物情報管理システム。化合物に関する種々の情報を登録/管理し、高速に検索することが可能	FACOM VP、M、Aシリーズ	2,500万円〜	83年11月	
REACCS	〃	〃	反応情報管理システム。反応式や反応条件で高速にDBを検索することができる。反応に関する各種データベースが提供可能	〃	1,600万円〜	85年5月	
ADAPT	〃	〃	パターン認識による構造活性相関(QSAR)研究支援システム。パターン認識の結果と構造式の重ね表示が可能	FACOM VP、M、Aシリーズ SUNーファミリ(SUN)	830万円〜 600万	86年7月 91年7月	
CHEMTERM/MM-MO	〃	富士通	パソコン用理論化学計算支援システム。コンピュータ・ケミストリーの入門システムとして利用できるため、教育等に手軽に活用できる	FMR−30、50、60、70、80シリーズ PC−98シリーズ	30万円	89年11月	
G³term/FM	〃	富士通ビーエスシー	ソニーテクトロニクス社のT4105型と富士通F9430型のグラフィック端末エミュレータ。Ethernet型LANにも対応	FMR-30、50、60、70、80シリーズ	25万円	89年10月	
MOLBESS-F	〃	富士ファコム制御	「DNA・蛋白質関連のデータベースの構築、またDNAから蛋白質までの一連の実験シミュレーション」を行うことにより、研究者のルーチンワークの軽減とスピーディな業務の遂行を支援	FMR-60、70、80シリーズ	180万円	89年11月	
KAMELO	〃	富士通	スプレッドシート型で化学構造式を中心とした情報を扱える化学OAシステム。シートをベースとして、研究者間の円滑なコミュニケーションも支援	Sーファミリ(SUN)	300万円	91年4月	
LATOX-F	〃	富士ファコム制御	医薬品開発時に実施される安全性試験を「GLP基準」に沿ってサポートする総合パッケージ。一般毒性試験、生殖試験をサポート	FACOM Aシリーズ、FMRシリーズ	1,200万〜	86年4月	
CRYSTRUCT	ファコムハイタック、富士通	ファコムハイタック	結晶構造設計支援システム。結晶構造のモデリング、解析等の機能を持つ。超伝導物質や強磁性体等の無機材料設計を強力に支援	Sーファミリ(SUN)	150万円	90年9月	
SINCA	富士通	富士通	分子進化学に基づく遺伝子情報の解析システム。超高速のホモロジー検索機能から進化系統樹作成までの一連の機能をサポート	Sーファミリ(SUN)	19万8,000円	90年12月	

SINCAIDEN	〃	〃	ＳＩＮＣＡの海外版		1,980^{F}ル	91年７月	
AUTO-ALIGNAR	〃	〃	マルチプルアラインメント支援ツール。複数の遺伝子配列を高速に自動アライメントする	Ｓ－ファミリ（ＳＵＮ）	18万円（予定）	91年９月	
MALSEED	〃	〃	マルチプルアラインメント支援ツール。アラインメント専用の配列エディタ機能を持つ。カラー表示により視覚による判断が容易	Ｓ－ファミリ（ＳＵＮ）	９万8,000円	91年７月	
SYNAPS	〃	〃	蛋白質の表示/操作システム。アミノ酸の一次配列と三次構造の連動機能、各種の立体構造の解析機能を持つ	Ｓ－ファミリ（ＳＵＮ）	80万円	91年７月	
SODHO	〃	〃	スーパーコンピュータでGen Bankの全データを解析した高付加価値データベース。類似配列のアラインメント結果を収録。ＣＤ－ＲＯＭで提供	ＭＳ－ＤＯＳ	６万円	91年７月	
理論化学計算入門CAL（MM2編）	富士通九州システムエンジニアリング	富士通九州システムエンジニアリング	理論化学計算MM２学習システム	ＰＭＲ50、60、70、80	２万4,000円	90年11月	
同（MOPAC編）	〃	〃	理論化学計算ＭＯＰＡＣ学習システム	ＰＭＲ50、60、70、80	２万4,000円	90年11月	
同（MO解析）	〃	〃	ＭＯＰＡＣより得られる情報をビジュアライズするシステム	ＰＭＲ50、60、70、80	９万8,000円	90年11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	14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	54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	
CU/6000	〃	〃	ＲＳ/6000上で稼働する分子設計支援システム。低分子から高分子までを幅広くサポートし、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・管理できる	ＩＢＭ ＲＩＳＣシステム/6000シリーズ	350万円	91年７月（予定）	
CU/HOST	〃	〃	ＣＵ/6000を補助するプログラム。ホスト上で大規模シミュレーション・プログラムの実行や、ＣＵ/6000で生成されたデータの管理などができる	ＩＢＭ ＥＳ/9000シリーズ	250万円	91年10月（予定）	
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	ＣＯＭＴＥＣ４Ｄシリーズ、ＩＲＩＳ-４Ｄ/ＧＴシリーズ	700万円～	87年７月	
MOL-GRAPH/MS	〃	〃	低分子、素材設計エントリーシステム	ＣＯＭＴＥＣ４Ｄシリーズ	システム価格１千万円以下	91年８月	
Uni Chem	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	2,400万円	90年12月	
INTERMOL	分子	分子	モンテカルロ法、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静電ポテンシャル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、ＩＢＭＲＳ/6000、Apollo DN 10000	700万～2,000万円	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	〃	米モレキュラーシミュレーション	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	860万円～	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	〃	1,280万円～		
Mac Vector	〃	米インターナショナルバイオテクノロジー社	Macintoshの操作性を完全にサポートした高機能、高操作性、遺伝子情報解析ソフトデータベースは、ＣＤ－ＲＯＭでも利用可能	Macintoshシリーズ	98万円	91年５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
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				
MMA/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ス	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	シミュレーションテクノロジー	米モレキュラーシミュレーション	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。グラフィックスコンピューターとの組み合わせで、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シリーズ IRISシリーズ IBMパワーステーション ESV—5等	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、機械的及び熱的物性算出等が可能	〃	〃	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	
Polaris	〃	〃	たん白質、酵素等を主対象にしたプログラム溶媒自由エネルギー計算、静電ポテンシャル計算等が可能	〃	〃	91年4月	
Enzymix	〃	〃	たん白質、酵素等の機能研究プログラム	〃	〃	〃	
Cerius	〃	〃	材料設計用の統合パッケージ。無機材料、結晶等を含むモデリング及びX線解析データとの照合等を実行。現在9種類のモジュールで構成されており、分売も可能	IRISシリーズ	〃	〃	
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	物産アバンストシステム	トライポス	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	VAXシリーズ、IRIS4D/GTシリーズ、Sun—4、コンベックス、クレイ、ESVシリーズ、IBMRS6000シリーズなど	各600万円〜(1ユーザー限定)	88年5月	
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				
Biopolymerモジュール			たん白質、核酸等の生体高分子操作				
QSARモジュール			定量的構造活性相関操作			89年2月	
Polymerモジュール			合成ポリマー専用モデリング操作			〃	
QSPRモジュール	〃	〃	定量的構造物性相関解析	〃	〃	91年2月	
Composer	〃	〃	たん白質のホモロジーモデリングプログラム。ロンドン大学ブランデル教授開発	〃	約450万円	91年2月	
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	

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	
CONCORD	〃	〃	変更スマイル表記法を利用した簡易三次元指標生成プログラム	VAXシリーズ、IRIS4D/GTシリーズ、Sun-4、ESVシリーズ	約150万円(SYBYLユーザー)、約580万円(非SYBYLユーザー)	88年2月	
DISCOVER	菱化システム、三菱商事	米バイオシム	エネルギー計算、ダイナミックス手法を用いた分子設計プログラム。コンソーシアムで吟味した独自のパラメータを採用	IRIS、VAX、CRAY、CONVEX、ALLIANT、IBM、ESV	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	〃	〃	局所密度近似をとり入れたAb―initio分子軌道法プログラム。有機化合物・金属クラスター・無機物にも適用可能。	CRAY、IRIS、VAX、CONVEX	1,040万～2,490万円	89年3月	
INSIGHTⅡ	〃	〃	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、ESV、IBM(Power Station)	1,870万～3,370万円(DISCOVERとセット)	87年4月	
Homology	〃	〃	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	IRIS	520万―1,040万円	90年4月	
Open Interface	〃	〃	強力な3DーグラフィックスINSIGHT Ⅱに、ユーザー独自のソフトを組み込むインターフェース	IRIS	未定	91年7月	
ポリマーコンソシアム	〃	〃	合成高分子の物性推算分子設計用ソフトの開発を目的とするコンソシアム。現在会員募集中			89年7月	
QSPR	〃	〃	構造式とデータベースから、構造と物性の相関を求めるプログラム		未定	91年7月	
RIS	〃	〃	Floryの理論に基づきポリマーの種々の物性を統計的に推算するプログラム		未定	91年7月	
Phase Diagram	〃	〃	ポリマー溶液またはブレンドにおける種々の相図を、Flory Hugginsの理論に基づき作成するプログラム		未定	91年7月	
Amorphous Cell	〃	〃	アモルファス状に高分子を組み立てて、種々の物性を推算するプログラム		未定	91年7月	
Polymerizer	〃	〃	リピートユニットを用いてホモポリマー、コポリマーを作成するプログラム		未定	91年7月	
Interphases	〃	〃	DillのLattice法を用いてInterPhaseの物性を求めるプログラム		未定	91年7月	
触媒・吸着コンソシアム	〃	〃	機能材料用の実用的な分子設計ソフトの開発を目的とするコンソシアム。現在会員募集中			90年10月	
ポテンシャルエネルギー関数コンソシアム	〃	〃	ポテンシャルエネルギー関数の改善・評価を目的としたコンソシアム。現在新会員募集中			91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
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	DEC、SUN、HP、APOLLO、HP、IBM	220万円～(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	

ＣＣＳの紹介

統合研究開発支援システム（ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ）

関西日本電気ソフトウェア株式会社
上村　一平

はじめに

従来の研究支援システムでは、単一目的のシステムを個々に利用する形態がほとんどであった。しかしながら、徐々に各種実験データベースが整備されるに従い、実験データベースをシステム上の核とし、研究者はあたかも執務室の机上で作業を行うがごとく各種データの検索，作表，作図，解析，報告書作成を行える研究デスクともいえる統合研究開発支援システムが必要となってきている。

本稿では、このようなシステム化ニーズからオープンシステムを目指して開発された統合研究開発支援システム「ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ」の概要と特徴を紹介する。

１．現状のＬＡシステムのかかえる問題点

各種計測機器には計測機器制御や、データ解析、データの一次的なバッファ装置としてパーソナルコンピュータが利用されている。しかしながら、まだまだ個別のデータ処理装置としての利用形態が多く、各パーソナルコンピュータで処理されたデータを研究所，研究グループで集約し、共有利用するという利用形態はなかなか進んでいない。

ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯでは、ＵＮＩＸマシン上で稼働するデータベースシステムを中心とし、データの共有利用と、研究者個人のデータ利用のバランスをとったシステムを提供している。

２．統合研究開発支援システム（ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ）とは

ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯは、研究者の日常活動上で必要な情報や、情報の整理手段を個人のみならず、ある一定の集団においても活用を可能とするシステムである。

ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯでは、幅広い研究に関連する業務のうち図１に示した網掛けの範囲内の業務を主としてサポート対象としている。

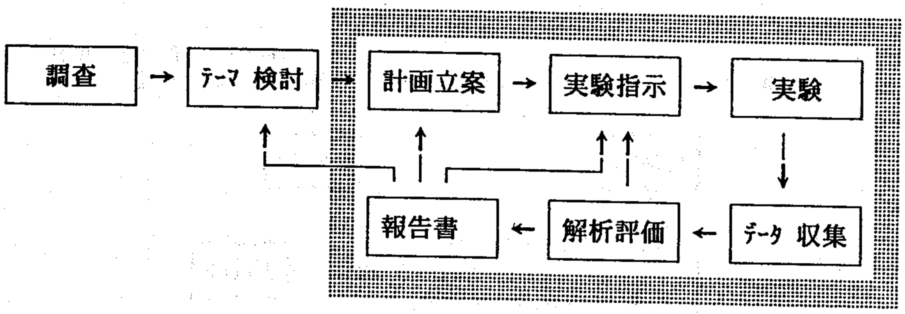


図1．研究業務の流れ

ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯでは、各種市販ソフトウェアを生かしつつ、様々なメーカのハードウェア，ネットワーク機能を融合化させたシステムインテグレーション（ＳＩ）手法を用いてシステム化を図っている（図２，図３）。

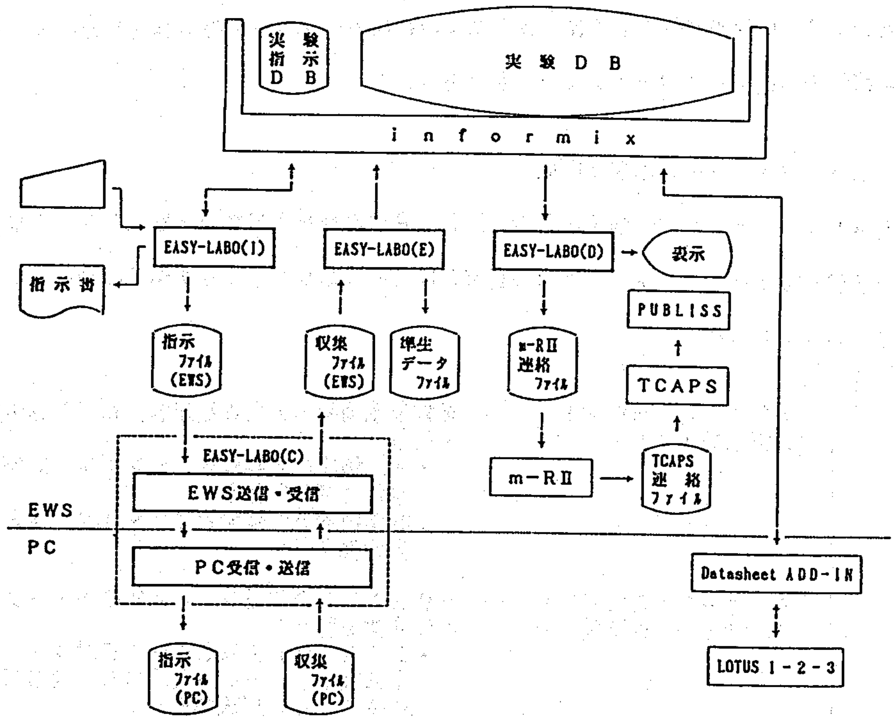


図２　ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯのシステム関連図

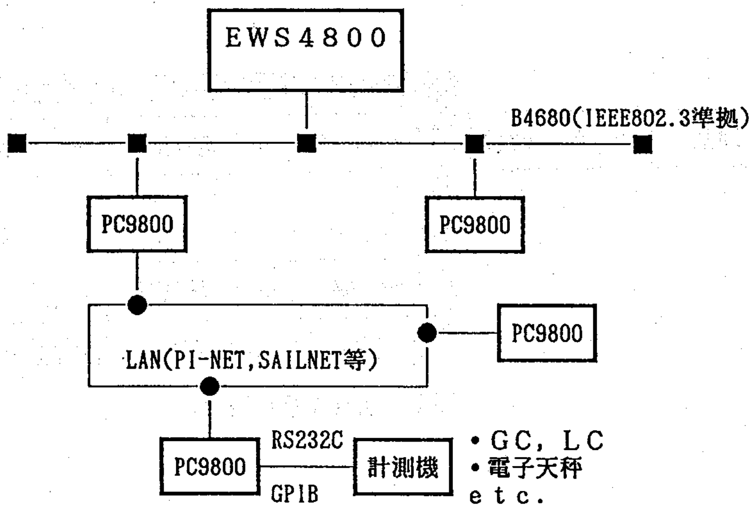


図３　ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯのシステム構成図

ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯのシステム適用対象業務としては、本来の実験を中心とした研究業務を想定している。また、ＧＬＰ試験などの公的試験に対しては対処していない。

本システムの適用事例としては、ゴム関係の物性データベースを中心としたシステム，金属疲労の実験データベースシステム等がある。

３．ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯの機能構成

ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯは、前述のとおりＰＣやＥＷＳをＬＡＮで組上げたシステム構成であり各種パッケージソフトウェアの接着剤となる４つのソフトウェアがその中核となる。

ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ

- ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｉ）［実験指示ＡＰ］… 実験指示情報の入力と指示書，指示ﾌｧｲﾙの出力を行う
  - 指示情報は実験計画，サンプル，計測機器単位で管理を行う
  - 計測機器単位に測定項目マスタで測定項目を管理を行う
- ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｃ）［EWS-PCデータ送受信ＡＰ］… ＥＷＳとＰＣの間でファイル単位でデータを転送受信を行う
  - ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯデータ転送ファイル形形式（ｍｉｃｒｏ－ＲＥＳＥＡＲＣＨＥＲ連絡ファイル形式準拠）
- ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｅ）［データベース登録ＡＰ］… 測定データをＩｎｆｏｒｍｉｘで管理されたデータベースに登録を行う
- ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｄ）［簡易データ検索表示ＡＰ］… データベース上のデータ検索を行い、解析ソフトウェアｍｉｃｒｏ－ＲＥＳＥＡＲＣＨＥＲへ検索データのファイル出力を行う
  - 検索条件のカタログ登録が可能
  - 表形式による検索結果の表示

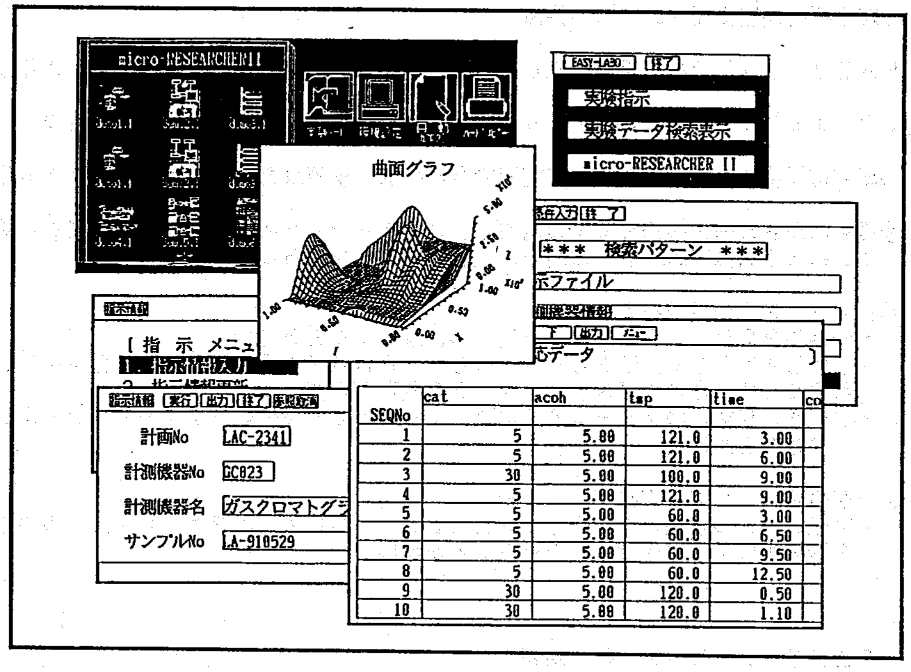


図4　ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯの画面イメージ
実験指示（ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｉ）），簡易データ検索表示ＡＰ（ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｄ）），ｍｉｃｒｏ－ＲＥＳＥＡＲＣＨＥＲⅡを同時動作

４．ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯの機能分散

ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯでは市販ソフトウェアをリンクしたシステム構成をとっているため標準的なシステム構成では以下の機能分散（ソフトウェアリンク）をとっている。

①実験指示入力	…	ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｉ）
②実験指示データデータベース登録	…	ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｉ）
③実験指示書，実験指示ファイル出力	…	ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｉ）
④実験指示データ，測定データ転送受信	…	ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｃ）
⑤測定データ送信ファイル編集	…	ユーザ作成ＡＰ
⑥測定データデータベース格納	…	ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｅ）
⑦実験データベース管理	…	Ｉｎｆｏｒｍｉｘ
⑧実験データ検索・表示	…	Ｉｎｆｏｒｍｉｘ
	…	Datasheet ADD-IN ＋ LOTUS 1-2-3
	…	ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯ（Ｄ）
⑨実験データ入力	…	Datasheet ADD-IN ＋ LOTUS 1-2-3
⑩実験データ解析（グラフ化，統計）	…	ｍｉｃｒｏ－ＲＥＳＥＡＲＣＨＥＲⅡ
⑪グラフデータ変換	…	ＴＣＡＰＳ／ＤＣＴ
⑫報告書作成	…	ｍｉｃｒｏ－ＲＥＳＥＡＲＣＨＥＲⅡ
	…	Ｐｕｂｌｉｓｓ

ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯでは、上記機能分散を適宜抽出したシステム構成を構築することが可能である。例えば、実験データは自動収集しないとした場合、⑦～⑫でデータ管理から報告書作成までの業務がシステム化可能である。

５．統合研究開発支援システムの特徴

ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯは、用途に応じてパッケージソフトウェア，ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯソフトウェアを組み合わせることによりシステム構築を行え、次の４つの特徴をもつ。

①研究室単位のシステムから研究室間の水平分散・垂直統合システムまでシステム化

②埋もれがちな個人の研究成果の活用と、ローテーションによるノウハウの損失を防ぐことにより類似実験・解析の防止，実験の効率化を図ることが可能

③ＥＷＳ－ＰＣの活用を標準化
- 既存のＰＣ９８００をそのまま活用し、束ねることが可能
- 基幹ＬＡＮとして標準となりつつあるＢ４６８０（ＩＥＥＥ８０３．２準拠）を使用するため、各社のＵＮＩＸマシンとの共存が可能
- データの収集，検索データのインタフェースとして標準のファイル形式を設定しデータ互換を共通化

④一連の処理としての実験データの扱い
- 実験データの収集から報告書作成までをデータの再入力，フロッピィ渡し等の手順を踏まずにデータ受け渡しを行うことが可能

６．ＥＡＳＹ－ＬＡＢＯの今後の課題

近年、ハードウェウや基本ソフトウェアの著しい発達と、各種規格の標準化（ＬＡＮ，データベース，言語等）が進展するに連れオープンアーキテクチャを基本としたシステム構築が必須となってきている。今後は、イメージデータの取り込み，化学構造式の表現，研究業務の周辺業務（ＯＡ，ＦＡ）とのリンクが課題となる。

海 外 動 向

MEETINGS

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 Symposium: 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.

7-11 July 1991.
International Conference on the Chemistry of the Organic Solid State.
Vancouver, BC, CANADA.
Contact: John Scheffer, Dept. of Chemistry, University of British Columbia, 2036 Main Mall, Vancouver, BC, CANADA (604-228-3496).

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.
202nd 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: 03-5487-2790)詳細は本号国際会議欄参照

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).

23-25 September 1991.
The Montreux International Chemical Information Conference & Exhibition.
Annecy, France.
Contact: Harry Collier, Infonotrics Ltd. 9A High St., Calne, Wiltshire SN11 OBS, U.K.

7-9 October 1991.
Second Symposioum on High Performance Computing.
Monpellier, France.
Contact: CNUSC, SHPC Secretariat, 950, rue de Saint Priest, BP 7229, 34184 Monpellier Cedex 4, FRANCE (33-67-14-14-14; FAX: 33-67-52-37-63; e-mail: SHPC@FRMOP11.Bitnet).

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).

9-13 February 1992.
Biophysical Society Meeting (Joint Meeting with ASBMB).
Houston, TX.
Contact: Emily Gray, Biophysical Society Room 3209, 9650 Rockville Pike, Bethesda, MD 20814 (301-530-7010; FAX: 301-530-7133).

5-10 April 1992.
San Francisco, CA.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

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.

23-28 August 1992.
204th ACS National Meeting.
Washington, DC.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

4-10 October 1992.
ELMAU 4: Computational Methods in Chemical Design.
Schloß Elmau, GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a. d. Ruhr, GERMANY (49-208-30-64-88; FAX: 49-208-30-46-07).

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

JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY

VOLUME 11/ NUMBEWR 2/ MARCH 1991

VOLUME 12/ NUMBEWR 2/ MARCH 1991

COMPUTERS & CHEMISTRY

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE

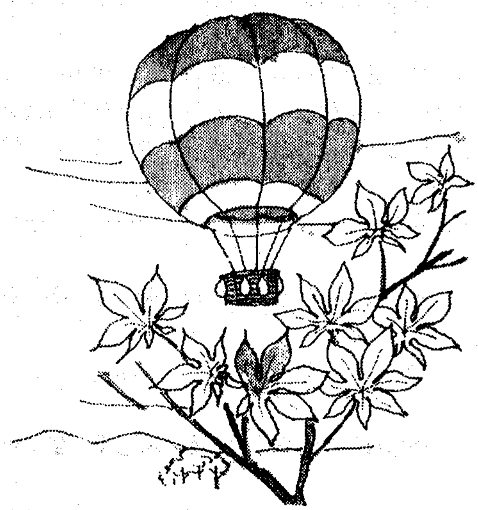
Vol. 237, 1990

Special Issue: Horizons in Hydrogen Bond Research. Proceedings of the IXth Workshop, Zeist, The Netherlands, 10–15 September 1989

Short Communication

Vol. 242, 1991

Special Issue: Molecular Spectroscopy and the Structure of Biological Systems — A Collection of Invited Papers in Honour of Professor Masamichi Tsuboi



話　題

パソコン通信フォーラム「化学の広場」を開設しました

日本化学会と会員、会員と会員の情報交流手段として、商用パソコン通信ネット「ＮＩＦＴＹ－Ｓｅｒｖｅ（以下ＮＩＦＴＹと略）」の中にオープンフォーラム（ＳＩＧ）として「化学の広場」を４月６日より開設致しました。パソコン、モデム、通信ソフトがあり、ＮＩＦＴＹの会員に登録されれば、全国どこからでも同一料金でご利用出来ます。

今回開設しました「化学の広場」は、ＮＩＦＴＹに約２００ある、いわゆるサークル活動の場であるフォーラム（ＳＩＧ）の１つで、２０万人いるＮＩＦＴＹの会員であれば、誰でもＮＩＦＴＹの基本利用料金（１分間１０円）〔それ以外にＮＴＴの市内電話料金３分１０円がかかります〕でご利用できます。

情報化学部会部会員の皆様は、既に、ＪＵＮＥＴ、つくばＮＥＴなどの公的情報交換機構やＰＣ－ＶＡＮのＳＩＧ「化学とコンピュータ」、ＮＩＦＴＹのフォーラム「サイエンス」などをご利用されている方々が多いと思いますが、日本化学会会員の中に占めるパソコン通信経験者は必ずしも多くはありません。

パソコン通信による情報は、加工や整理が簡単な文字情報（が主）で、迅速に割安に気軽に入手できる便利な情報であり、今後の研究活動、学会活動、生活の中においても重要な通信手段の１つとなることは間違いありません。

今回の「化学の広場」開設は、日本化学会からの情報提供の場であるのみならず、一般社会への化学啓蒙の場であり、日本化学会会員の方々のパソコン通信練習の場であり、化学を通しての人と人との交流の場になるよう試行として実施されたものです。

概要案内

●○●○●○●○●○●○●○●○●○●○●○●○●○●
○　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　○
●　　　　化 学 の 広 場 へ よ う こ そ　　　　●
○　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　○
●○●○●○●○●○●○●○●○●○●○●○●○●○●

このフォーラムは、化学（含境界領域科学）に関するいろんな情報を提供したり、いろんな意見、いろんなアイデアを交換したり、わからないことにお答えしたりして、化学に興味ある人たちの交流の場となるように、社団法人日本化学会がサポートして運営しております。

もちろん、フォーラム内での主役はＮＩＦＴＹ－Ｓｅｒｖｅの本フォ

ーラム会員の皆様ですから、積極的に参加して下さい。
化学に興味のある方なら、どなたでもご入会いただけます。
「１．お知らせ」、「３．電子会議室1.日本化学会からのお知らせ」、
「３．電子会議室5.ONLINE「化学と工業」「化学と教育」」以外は、
すべて会員が直接書き込むことが出来る場所です。

＊＊＊＊＊＊＊＊＊＊＊＊ 概　要 ＊＊＊＊＊＊＊＊＊＊＊＊＊＊

1．お知らせ
フォーラムに関するＳＹＳＯＰからのお知らせを掲示しています。
2．掲示板
4週間掲示ですので、短期的なお知らせにご利用下さい。
3．電子会議室
（1）日本化学会からのお知らせ
日本化学会に関することやお知らせを掲示しています。
（2）自己紹介
このフォーラムに入会さた方の自己紹介をする場所です。
気楽に最初に書き込んで下さい。
また、異動や近況などもこの欄で紹介して下さいね。
（3）学会・講演会・新刊・新製品情報
年会、研究発表会、討論会、シンポジウム、講演会、講習会、セミナー、国際会議など年間 500以上の事業についてのご案内と、新刊図書に関する情報、新製品に関する情報を掲示する場所です。
（4）学協会・企業・大学・研究室紹介
化学関連学協会連合協議会および日本工学会会員の各学協会を中心に、各学協会の概要のご案内と、企業（研究所、研究部門、工場など）、大学（研究室、学科、研究所、大学院など）、研究所（国公立研究機関など）の紹介を掲示する場所です。
（5）ONLINE「化学と工業」「化学と教育」
日本化学会会報の「化学と工業」「化学と教育」の目次、および、ちょっとした記事の案内や本文を掲示しています。
（6）特定テーマ「論文の電子投稿」
今、日本化学会で検討がはじまった「論文の電子投稿」について、このフォーラムで意見を交換し、電子投稿の基準を考えようという会議室です。
（7）化学宝石箱（フリートーク）
会員の方々が、雑談として、自由きままに書き込むことが出来る場所です。特にテーマなどはありません。アットランダムに発言して下さい。
本フォーラムにアクセスしたら、1行であっても、この会議

室に書き込んでいっていただける雰囲気（習慣）にしたいと考えています。

（8）Q＆A

化学に関する質問についてお答えしております。化学についてわからないことがあったら、この会議室を利用して下さい。質問に関して会員の誰かが答えてくれたり、アドバイスをくれます。

（9）〔表示されていません〕

予備の会議室です。

(10) STUDENT　CLUB

学生および卒業後１～３年ぐらいの人たちが中心となって、雑談をする場所です。

4．データライブラリ

（1）会議室記録
（2）［予備］
（3）日本化学会関係情報
（4）［予備］
（5）PDSライブラリ
（6）［予備］
（7）学会・討論会プログラム
（8）［予備］

5．会員情報

このフォーラムに登録している会員の利用者IDと氏名の一覧が表示出来ます。

6．リアルタイム会議

フォーラム内に設けられたCBシミュレーターで、不定期に開催しております。

7．SYSOP 宛メール

通常の電子メールより簡単にSYSOP宛にメールが出せます。日本化学会事務局宛の連絡としてもご利用いただけます。

8．オプション

このフォーラムにおけるメニュー表示、ページ制御、フォーラムに登録している氏名の変更が出来ます。

実際の内容を少し見てみますと、下記のとおりで、３番の電子会議が中心となって情報交流を行っています。

>GO FCHEM　←　NIFTYプロンプト（>）の後に　GO FCHEM　と打って下さい。

(^_^) 化 学 の 広 場 へ よ う こ そ (^_^)

<化学の広場>　FCHEM

1:お知らせ	2:掲示板	3:電子会議	この部分はＮＩＦ
4:データライブラリ	5:会員情報	6:リアルタイム会議	ＴＹのフォーラム
7:SYSOP 宛メール	8:オプション	E:終了	統一メニューです

>3　　　←　コマンドは原則として数字や簡単な英文字を打つだけです。

何でもいいですから、７番会議室の化学宝石箱に書き込みをして行って下さいネ！

番号	発言	(未読)	最新	会議室名
1	9	(0)	04/19	日本化学会からのお知らせ
2	104	(0)	05/19	自己紹介
3	147	(0)	05/01	学会・講演会・新刊・新製品情報
4	89	(0)	03/26	学協会・企業・大学・研究室情報
5	4	(0)	04/30	ONLINE「化学と工業」「化学と教育」
6	67	(0)	05/10	特定テーマ「論文の電子投稿」
7	176	(0)	05/20	化学宝石箱（フリートーク）
8	23	(0)	05/19	Ｑ＆Ａ
10	11	(0)	05/17	ＳＴＵＤＥＮＴ　ＣＬＵＢ

>3　　　←　３番会議室「学会・講演会・新刊・新製品情報」を選択する。

電子会議（1:発言　改行のみ: 読む）通常モード

>RT 200　　←　RT200 のコマンドは会議室の 200番以降のタイトル一覧を表示する

<タイトル一覧>

番号	ID	登録日	TO	CO	題名
200	SDI00573	05/20 19:04		0	ＩＳＣＦ－ＣＯ2－９１ Nagoya － [12/2-4]
201	SDI00573	05/20 19:05		0	第42回ポリ塩化ビニル（ＲＶＣ）討論 [12/6]
202	SDI00573	05/20 19:05		0	表面技術総合展－METEC '91 [5/24-27]
203	SDI00573	05/20 19:06		0	日本学術振興会第116 委員会 [6/11]
204	SDI00573	05/20 19:07		0	SENKEN ONE-DAY SYMPOSIUM [5/24]
205	ABC01234	05/21 11:30	010	0	第８回液体クロマト春季討論会 [ﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑ]
206	ABC01234	05/21 11:31	013	0	第10回光がかかわる触媒化学シン [ﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑ]
207	ABC01234	05/21 13:15	015	1	[ｺﾒﾝﾄ] #15 のプログラムはライブラリーに
208	ABC01234	05/21 13:16		1	第８回フォトポリマーコンファレ [6/18-21]
209	ABC01234	05/21 13:18	208	0	[ｺﾒﾝﾄ] #208 のプログラムはライブラリーに
210	ABC01234	05/21 13:19	048	0	[ｺﾒﾝﾄ] #48 のプログラムはライブラリーに
211	ABC01234	05/21 13:20		0	国際イオン交換会議'91 [10/2-4]
212	ABC01234	05/22 9:38	207	0	[ｺﾒﾝﾄ] ﾃﾞｰﾀﾗｲﾌﾞﾗﾘｰ の番号間違い #7->#4

＞#178
178/213　SDI00573　石鍋　正俊　　　第４回情報化学夏期セミナー［7/25-26
(3)　91/05/20 18:46

第４回情報化学夏期セミナー
主催　日本化学会情報化学部会
日　時　７月25日（木）、26日（金）〔１泊２日〕
会　場　蔵王ハイツ（宮城県刈田群蔵王町遠刈田温泉字上の原128
電話（0224）34-2311 ）
〜〜

現在１０会議室（９番は保守用）ですが、２０会議室に増設できますので、例えば、研究分野ごと、支部ごとに会議室を持ち、交流、歓談することができます。

新しい情報通信手段としてパソコン通信を是非お試しください。
会員の皆様の積極的な参加をお待ちしております。

〔全般的なお問い合わせ〕
㈳日本化学会会員部　石鍋正俊　電話０３－３２９２－６１６９（ダイヤルイン）
〒101 東京都千代田区神田駿河台１－５　　　　〔６月24日から〕

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 9, Number 4
July 1991

目　　　次

部会行事

第１４回　情報化学討論会

主催　日本化学会情報化学部会
共催　日本化学会、日本薬学会、日本農芸化学会、日本分析化学会、日本化学プログラム交換機構
日時　平成３年１１月２７日（水）～２９日（金）
会場　（財）川口総合文化センター　リリア（Lilia）
〒３３２　埼玉県川口市川口３－１－１　ＴＥＬ　０４８２－５８－２０００
ＦＡＸ　０４８２－５８－２１００
交通　ＪＲ京浜東北線川口駅下車　西口駅前
（ＪＲ川口は東京から京浜東北線で３０分、新宿から埼京線経由赤羽乗り換で約２０分）

本討論会は第１９回構造活性相関シンポジウムと併催されます。
参加登録・懇親会各予約及び要旨集前送申込締切　１０月１５日（火）
一般講演の講演時間２３分（講演１８分、討論５分）

第1日（１１月２７日（水））
一般講演
９：４５～１０：５４　［座長］市川　紘
２７Ｉ０１　ＡＮＡＬＯＧＳのニューロネット・システムによるレセプター・マッピング（第３報）（東京農工大工）○山野辺進、佐藤克則、安川民男　（大正製薬総研）角谷重幸、北村一泰　（阪薬大）石田寿昌
２７Ｉ０２　アニーリング法による蛋白質の高次構造予測システムの開発（第１報）（東京農工大工）○唐沢琢郎、原田善之、泉沢潤司、安川民男
２７Ｉ０３　ニューラルネットによる物性予測（愛知工大）○鬼頭繁治　（名大工）服部忠、村上雄一
１１：０４～１１：５０　［座長］安川民男
２７Ｉ０４　ニューラルネットワークにおける入力層ニューロンの独立性に関する検討（星薬大）○市川　紘　（日立ＣＥ）青山智夫
２７Ｉ０５　タンパク質二面角構造予測におけるニューラルネットワークの適用（図書館情報大）○中山伸一、吉田政幸
休憩　１１：５０～１３：００
特別講演Ｉ
１３：００～１４：００　［座長］大澤映二
Recent Advances in Force-Fields, the Development of Class II Force Fields
(BIOSYM Technologies, INC) Arnold T. Hagler
一般講演
１４：１５～１５：２４　［座長］朝永　惇
２７Ｉ０６　化学名（体系的名称）から平面構造式を生成するシステムの構築（中外製薬）松浦育敏

２７Ｉ０７　ＮＩＳＴ－ＭＳＤＢにおけるＣＡＳ化合物名の側鎖部分（その３）　括弧（　）を含む化合物名の処理（筑波研究学園専門学校）○仲久保正人、仲久保公子　㈱ＤＢＳ）和知孝宣　（東京家政学院筑波短大）前田浩五郎

２７Ｉ０８　分子力場データベースに基づく分子振動計算システムＭＶＩＢのユーザーインターフェースの開発（広島大理）○吉田　弘、松浦博厚

１５：３４～１６：４３　［座長］前田浩五郎

２７Ｉ０９　有機合成設計システムＡＩＰＨＯＳの開発（４）（豊橋技科大）○船津公人、佐々木慎一

２７Ｉ１０　有機合成設計システムＡＩＰＨＯＳの開発（５）　知識ベースの構造と機能（豊橋技科大）船津公人　（積水化学）是本敏宏　（田岡化学）白石喜久（日本合成化学）○西村拓郎　（日本触媒化学）高橋由幸　（住友化学）銅金巌　（豊橋技科大）佐々木慎一

２７Ｉ１１　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（２）（呉羽化学）朝永　惇

１６：５３～１８：０２　［座長］高木達也

２７Ｉ１２　化学物質の分解性予測（２）　カルバメートなどの加水分解速度の予測（化技研）○田辺和俊、都築誠二

２７Ｉ１３　ＰＬＳ法によるノルボルナン類のＣ－１３ＮＭＲ化学シフトデータの解析（東北大工）○石山純一、（豊橋技科大）宮下芳勝、佐々木慎一

２７Ｉ１４　パターン認識を用いた写真用カブリ抑制剤の構造特性相関（コニカ）○台場信一、飯塚宏之、加藤　正、平林茂人、益田功策　（豊橋技科大）宮下芳勝、吉田浩士、佐々木慎一

第２日（１１月２８日（木））

一般講演

１３：００～１３：４６　［座長］柏木　浩

２８Ｉ１５　自由エネルギー摂動法計算における分子変換の新しい方法－多重変換基底自由エネルギー摂動法計算（北里大薬）○米田茂隆、梅山秀明

２８Ｉ１６　原子間力顕微鏡によるアスピリン結晶表面分子像の観察とシミュレーション（京大薬）真崎規夫、○町田勝之輔　（松下中研）加道博行、横山和夫、任田隆夫

１３：４６～１４：３２　［座長］宮下芳勝

２８Ｉ１７　拘束系分子動力学のための拘束条件入力方式（富士通九州ＳＥ、富士通[1]）酒井広太、竹内宗孝[1]、山本優子、福田育夫[1]、三上益弘[1]

２８Ｉ１８　タンパク質シークエンス解析のエキスパートシステム（北里大薬）○菰岡仁志、梅山秀明

１４：４２～１５：２８　［座長］町田勝之輔

２８Ｉ１９　核酸二重らせん及び三重らせんのモデリング法（東大薬）○富岡伸夫、板井昭子

２８Ｉ２０　大腸菌とバクテリオファージの転写単位におけるプロモータコンセンサス配列の保存特性の相違（山形大工）○金谷重彦、工藤喜弘

１５：２８～１６：１４　［座長］飯島　洋

２８Ｉ２１　レセプターサイト推定のためのタンパク質ポケット領域の探索法（２）　ポケット領域の電子的環境（豊橋技科大）○Carlos A. Del Carpio、高橋由雅、佐々木慎一

２８Ｉ２２　生命科学のための教育研究用ネットワークシステム（九工大情報工）○柏木浩、岡本正宏、米谷快男児

ポスターセッション

１０：３０～１６：００

２８Ｐ０１　フタレイン系呈色指示薬の化学平衡－化学因子分析法および半経験的分子軌道法による吸収スペクトルの解析（兵庫教育大）森川宏司、尾関　徹、○木原寛

２８Ｐ０２　局在化分子軌道を用いた Through-Bond, Through-Space 相互作用による反応性解析（東大工）○里見昌記　（お茶大理）平野恒夫

２８Ｐ０３　エネルギー計算によるフラーレンの安定構造（４）　C_{76}, C_{78}, C_{84}などの安定構造の予測（化技研）田辺和俊、○都築誠二　（豊橋技科大）大澤映二

２８Ｐ０４　Ｚ－インデックスとメリフィールド・シモンズインデックスの逆相関の解析（お茶大理）○細矢治夫　（クラグエヴァッツ大）Ｉ．Ｇｕｔｍａｎ

２８Ｐ０５　分子動力学シミュレータのためのワークベンチ：ＣＯＭＤＥＰ　その２　解析システムの機能とヒューマンインタフェース（富士通）並木武文　（西肥情報サービス）大谷正尚　（富士通九州ＳＥ）山本優子　（富士通青森ＳＥ）石戸橋　眞　（富士通）三上益弘

２８Ｐ０６　分子動力学計算システムＧＲＯＭＯＳの入出力プログラムの開発（群馬大教養）中田吉郎

２８Ｐ０７　数式処理を利用した化学動力学計算の自動化（２）　数値計算との連携（大阪電通大）藤田岩男

２８Ｐ０８　ジベンゾモノ、ジアゼピンのメチル化反応の位置選択性（近畿大理工）○高橋紘一、藤原宗孝

２８Ｐ０９　化学構造式通信のためのコード化手法の検討（姫路工大工、国際基督教大[1]）○中野英彦、吉野輝雄[1]、山名一成、三軒　斉

２８Ｐ１０　化学構造記述のための意味辞書の構築（神奈川大理）中山　尭

２８Ｐ１１　ＣＨＥＭＩＣＳとスペクトルデータベースＳｐｅｃＩｎｆｏとの結合（豊橋技科大）○船津公人、佐々木慎一　（BASFドイツ）W.Fachinger、R. Neudert

２８Ｐ１２　トポロジカルインデックスに基づく^{13}Ｃ－ＮＭＲ化学シフトの予測（豊橋技科大）○長田英世、高橋由雅、佐々木慎一

２８Ｐ１３　ファジイ推論による水温制御アルゴリズム（お茶大理）○藤枝修子、田中志保

２８Ｐ１４　計算機統計学的手法の開発と化学、薬学への応用（３）　シフト検定法の正

準判別分析、回帰判別分析への応用（阪大薬）○高木達也、北条典子、和田千佐、藤原英明

２８Ｐ１５　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（９）　赤外スペクトル1000件同定用パソコンシステムの開発と総合評価（化技研）○田辺和俊、田村禎夫　（ファコムハイタック）上坂博享

２８Ｐ１６　有機合成設計システムＡＩＰＨＯＳの開発（６）　立体化学知識ベースの構造と機能（豊橋技科大）船津公人　（鐘淵化学）上山　昇、守川壮一　（塩野義製薬）○渡辺正道　（ダイキン工業）根岸良夫　（鐘淵化学）大橋武久　（豊橋技科大）佐々木慎一

２８Ｐ１７　有機合成設計システムＡＩＰＨＯＳの開発（７）　戦略部位獲得プログラム（豊橋技科大）船津公人　（大阪市工研）大野敏信　（ハリマ化成）磯崎昌史　（山本化成）○堀内健一郎　（住友化学）銅金　巌　（豊橋技科大）佐々木慎一

２８Ｐ１８　有機合成設計システムＡＩＰＨＯＳの開発（８）　反応データベースシステムの開発（豊橋技科大）船津公人　（オリエント化学）○北村　覚　（鐘淵化学）千波　誠　（住友化学）内田　透　（住友精化）木村　聡　（鐘淵化学）大橋武久（豊橋技科大）佐々木慎一

２８Ｐ１９　有機合成研究用情報ベースシステムに於ける学習とルール制御（筑波大）藤原　譲、大保信夫、于　旭、王　忠清　（名大）早川直宏

２８Ｐ２０　化学構造式の類似性の検討とデータベース検索への応用（豊橋技科大）○奥山　徹、橋詰裕行、阿部英次、佐々木慎一

２８Ｐ２１　^{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－実用化の検討（日立計測）○橋本正雄、佐久間晃子　（日立那珂）笹淵　仁

２８Ｐ２２　化学構造ハンドリングのための汎用ライブラリの開発と入力システムへの応用（田辺製薬・解技セ）○朝尾正昭、西端芳彦、宮城島利一　（田辺製薬・生化研）清水　良、松本和男

２８Ｐ２３　二群データに基づくレセプターコアの抽出（石原産業中央研）赤木俊夫

２８Ｐ２４　受容サイトにおける分子認識機構（第８報）　リゾチームによる糖鎖の識別（東京農工大工）○野崎義人、安川民男、（神奈川科学技術アカデミー）岡崎秀美、赤池敏宏

２８Ｐ２５　ＤＮＡモデリングのエキスパートシステム（北里大薬）○四宮和子、梅山秀明

２８Ｐ２６　球内残基数を用いた蛋白質立体構造予測の試み（旭化成）戸澗一孔

特別講演Ⅱ

１６：３０～１７：３０　［座長］細矢治夫

コンピュータグラフィックスにおける４次元モデリング（東大理）國井利泰

アトラクション

１７：４０～１８：００　パイプオルガン演奏　（ソニー）佐野羊奈子

懇親会　（構造活性相関シンポジウムと合同で開催します。）

１８：１５～２０：００　銀座アスター　川口賓館（リリア１４階）

第３日（１１月２９日（金））

一般講演

９：２０～１０：２９　［座長］船津公人

２９Ｉ２３　有機構造解析におけるＮＭＲスペクトル照合結果の利用法の見直し（山形大工）○工藤喜弘、小林敦志、森　正人、山際春樹、長谷川　隆、佐藤典子

２９Ｉ２４　ゼオライト系三次元フレームワーク上でのＳｉ，Ａｌ分配とＮＭＲスペクトル（群馬大工）佐藤満雄

２９Ｉ２５　虚遷移構造の二節部分グラフ（富士フィルム足柄研）○竹内雅志、藤田眞作

１０：３９～１１：４８　［座長］工藤喜弘

２９Ｉ２６　反応情報システムＦＯＲＴＵＮＩＴＳの開発（富士フィルム足柄研）○藤田眞作、花井荘輔、宮川正美、竹内雅志、中山章子、保田敏雅

２９Ｉ２７　金属イオンの溶媒抽出データベースＳＥＤＡＴＡの開発（東北大理）○塚原聡、斎藤紘一、鈴木信男

２９Ｉ２８　スペクトル情報の知識ベース化における一つの試み　－高分子のC-13 ＮＭＲを例にして－　（神奈川工大情工）○巽　久行　（前神奈川工大情工）西岡篤夫

休憩　１１：４８～１３：００

一般講演

１３：００～１４：０９　［座長］田辺和俊

２９Ｉ２９　アスコルビン酸分子内水素結合が存在するときのａｂ　ｉｎｉｔｉｏ法とＰＭ３によるコンホメーション解析の比較（（有）分子）藤田忠男

２９Ｉ３０　電子伝達系蛋白質の電子状態（関学大理）○中川博之、小山　泰　（関学大情報セ）岡田　孝

２９Ｉ３１　巨大次元行列の対角化について（分子研）長嶋雲兵

パネルディスカッション

１４：２０～１６：００　［司会］平野恒夫

計算化学の将来とワークステーション

［パネリスト］板井昭子、岩田末廣、大澤映二、田辺和俊、他

日本化学会情報化学部会総会　１６：００～１６：４０

参加登録費　構造活性相関シンポジウムと共通、講演要旨集（構造活性相関シンポジウム講演要旨集と合本）１冊を含みます。

予約　６，０００円　　当日　７，５００円

学生の方は事情によりウェーバー方式をとります。予約申込の時お知らせ下さい。

講演要旨集の前送を希望される方は送料として１，０００円追加

懇親会費　予約　６，０００円　　当日　７，０００円

予約申込方法　Ｂ５版（縦）用紙に横書きで、氏名・勤務先・連絡先住所（電話、ファクシミリ）、懇親会出欠、要旨集前送希望の有無をご記入の上、下記宛お送り下さい。なお、締切日までに下記銀行口座へ所定の金額をお振込下さい。確認後、確認書をお送りします。

予約申込先　〒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
　　　　　　情報化学討論会　細矢治夫宛
銀行口座　銀行名　　住友銀行大塚支店
　　　　　口座番号　普通預金　６３０９０２
　　　　　名義　　　情報化学構造活性実行委員会
問合せ先　電話　03-3943-3151(お茶大代表) 内線 細矢553 平野551 鷹野559 藤枝562
　　　　　ファクシミリ 03-3942-2815 (宛先個人名を明記して下さい)

第5回情報化学部会 国際ワークショップ 「国際的視野から見た情報化学の現状と将来」 開催のお知らせ

すでに、CICSJ Bull., 9, No.3(May), 2 (1991)でワークショップ開催の予告をしましたが、下記の要領で行いたいと思います。日本分析化学会創立４０周年記念事業として、ＩＣＡＳ'９１ (IUPAC International Congress on Analytical Sciences 1991) が、平成３年８月２５～３１日に幕張メッセで開催され、討論主題4「Chemometrics and Robotics」では、情報化学に関心を持つ国内・国外の研究者がかなり大勢集まる予定です。８月末のお忙しい時期で、首都圏からやや離れた会場ですが、この機会にぜひみんなで集まって、交流を深め、情報交換をしたいと考えました。どうぞふるってご参集ください。

日　時　：　平成３年８月２９日（木）　１７：３０～２０：３０
会　場　：　幕張メッセ　国際会議場　２階　２０２号室
　　　　　　千葉市中瀬２－１　電話０４７２－９６－０００１
　　　　　　ＪＲ京葉線東京駅（地下ホーム　ディズニーランド、幕張メッセ方面の案内あり）から、快速で約３０分、海浜幕張駅下車。海側へ徒歩５分です。
会　費　：　軽食代　１０００円　（当日会場で）

参加ご希望の方は、日本化学会情報化学部会宛、氏名・所属・連絡先電話・ファクシミリなどを、８月２０日（火）までにご連絡ください。なおご希望の方には、交通案内をさしあげます。
お問い合わせなどは、恐縮ですが、書面で下記へお願いします。
〒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　藤枝修子宛
電話 03-3943-3151 ext.562　ファクシミリ 03-3942-2815 （藤枝宛を明記）

第4回 情報化学部会 ワークショップ
報 告

「化 学 構 造 式 の 自 動 解 読」

（社）日本化学会情報化学部会

(1) 日時：　１９９１年5月１０日(金)　１３．３０～１８．００

(2) 会場：　東海大学　　会議棟　第１会議室（２階）

プ ロ グ ラ ム

1．結合表入力法の諸問題．　［３０分］
富士写真フイルム㈱　足柄研究所　主任研究員　花井　荘輔

2．文献等に現れる化合物図形の特徴と問題点について．［３０分］
日本科学技術情報センター　主任情報員　荒木　啓介

3．化学構造式認識における諸問題　［４０分］
東海大学　開発技術研究所　教授　米田 幸夫

4．化学構造式認識におけるベクトル化ソフトの役割(Quick Trace)　［３０分］
㈱ＩＣＬ　代表取締役　小平　昌邦

5．化学構造式認識におけるＯＣＲソフトの役割(PCR SWAN/ENGLISH)　［３０分］
㈱バーズ情報科学研究所　プロジェクト・マネージャー　前田　恒男

6．化学構造式認識における構造式エディターソフトの役割(「441」)　［３０分］
㈱テクノシステム　システム部　内山　峰隆

結合表入力法の諸問題　（富士フイルム　足柄研究所）　花井　荘輔

化合物の２次元構造情報のコンピュータ処理のために，いわゆる結合表と呼ばれる形式で，分子の各原子とその結合相手および結合の種類を表現する必要がある．

そのコンピュータへの入力法には次の方法がある．

①体系名や記号表記を作成し，文字と記号を入力したあとプログラムで変換する

②結合表を手で作成し文字と記号を入力する

③グラフィックディスプレイ上で組み立てて入力する

④ケミカルタイプライタで文字と記号を入力しプログラムで変換する

⑤イメージリーダで読み取りプログラムで文字認識し解析して変換する

それぞれの方法には利害得失があり，どの方法を選ぶかは次の要因をよく検討して決めることになる．

ａ．全体の目的　　：なにに使うのか

ｂ．対象化合物の数　　：数件と数万件とではちがう

ｃ．実現の技術的可能性　　：魅力があっても不可能ではどうしようもない

ｄ．チャレンジ性　　：開発する価値があるかどうか

ｅ．作業の知的要因　　：工夫や美意識を織り込めるか

ｆ．担当者の技術レベル　　：専門知識が必要か否か

ｇ．将来の発展性　　：環境の変化に耐える永続性のあるシステムでありたい

参考書

花井，　小野修一郎編「コンピュータ ケミストリ」第4章，　丸善（１９８８）

文献等に現れる化合物図形の特徴と問題点について

（ＪＩＣＳＴ　化合物辞書）荒木啓介

構造図形そのものの問題（結合すべきでない線がクロスしている場合がある，図形中に文字や下付き文字が混在，ベンゼン環の多様な表現，糖などのＨａｗｏｒｔｈ表現，立体化学表現の多様さなどなど）の他に，文献特有なものとして，図示した共通構造に対して表等の形で変異構造部分を示す表現方法の問題があり，これに対する対応が実用的な化学構造自動読みとりのキーポイントであるとおもわれる．

共通構造の表現方法もバラエティーがあり，環の中にＸやＹを描いて表によりその内容を特定するもの，環の中央まで線を描き環外までのばしたその先にＲをつけたもの，などを含む．　特定構造部分も，名称，示性式，構造図などで表現されており，正しい認識や構造の復元にそれなりの人手を要すると思われる．部分構造に対する名称や示性式のテーブルを用意し，図形入力と名称入力の長所を取り入れたマーカッシュ表現の簡易入力法を新たに開発する必要がある．

これらについて例をあげるとともに，ＪＩＣＳＴで開発したマーカッシュ名称入力法に触れ，上記の開発の一助としたい．

GEN$0-5I

化学構造式認識における諸問題

東海大学　開発技術研究所　教授　米田 幸夫

化学構造式の自動解読とは，文字を含む，印刷または手書きの化学構造式を自動認識をして，各種の立体化学表示を含めて，結合関係と元素記号などを認識し，入力と同じ水準の結合関係表を作成することある．　このシステムは化学構造式（望むべくは複数の構造式と文章を含む文書）をイメージ・スキャナーで読み取り，それ以後は総てバッチ処理で，(1)ベクトル化，(2)光学的文字認識，(3)化学構造式エディターの専門的な技術と，結合線認識と文字の切り出し，線図（グラフ）と文字との統合，の二つのアルゴリズムを更に統合することにより，化学構造式を結合関係表に変換する．

システムの対象である現実の化学構造式の書き方は極めて多様で，意外に混乱しており，このようなバッチ処理を可能とするためには多くの課題が残されている．　また，研究者がその着想を手書きの構造式にサラサラと書き，これから各種のデータベースやシステムに直ちにアクセスできれるとすれば，手書き解読もまた重要な対象である．

このシステムの基礎的なアルゴリズムや技術，実用化の条件などを話題として，実用化のための問題点を述べて，討論の材料を提供する．

化学構造式認識におけるベクトル化ソフトの役割(Quick Trace)

㈱ＩＣＬ　代表取締役　小平　昌邦

ＱｕｉｃｋＴｒａｃｅ，ＰａｉｎｔＵｐ，真名のベクタライズ抽出方法について

１．微小凹凸の除去方法：スキャンニングして入力された図形は、紙上にかかれた図形の輪郭がたとえ直線であっても凹凸して入力されています。この凹凸は本来のフォントの輪郭とは異なります。真名ではこのような凹凸を除去してあてはめを行なうことができます。①凹凸除去度合いの意味：除去の対象となる凹凸の大きさを、ドット単位として実数で指示します。　②凹凸除去の設定方法：凹凸除去を大きくするほど、元図に対してラフなあてはめを行ないます。直線の凹凸除去を大きくすれば、直線をあてはめる確率が高くなります。逆に曲線の凹凸除去を大きくすれば、曲線をあてはめる確率が高くなります。　③適当な凹凸除去のパラメータのあたえかた：

２．許容誤差について：　読み込まれた図形への直線・曲線のあてはめ度合→抽出許容誤差を、直線・曲線独立に設定できます。　①抽出許容誤差の意味：あてはめられる直線を曲線が、下のドットの輪郭より離れて良い距離をドットを単位で実数にて表示します。抽出許容誤差とあてはめられる直線の関係を示す原理例を示します。　②抽出許容誤差の設定方法：●抽出許容誤差を大きく設定するほど、元図に対してラフなあてはめを行ないます。　●直線の抽出許容誤差を大きくすれば、直線をあてはめる確立が高くなります。逆に、曲線の抽出許容誤差を大きくすれば、曲線をあてはめる確率が高くなります。
③適当な抽出許容誤差の範囲.　④凹凸除去と抽出許容誤差の関係：凹凸が連続した場合、凹凸除去範囲であれば、誤差と考えずに許容誤差内か否かの判定に加えません。これにより細かな凹凸が連続していても長い区間に直線や曲線をあてはめる事が可能となります。

３．細線化処理について：　細線化の注意点：原形に忠実な細線化

４．機能拡張について：　１．直線と直線の結合.　２．線と線の結合

化学構造式認識におけるＯＣＲソフトの役割

（株）バーズ情報科学研究所　　前　田　恒　男

現在市販されているＯＣＲソフトは、独自にメニュー画面を持っている為、化学構造式認識プログラムの中で文字認識部分だけを利用することができない。今回化学プログラムから直接呼べる文字認識プログラムを開発したので以下報告する。

○化学構造式認識プログラムから呼べる文字認識プログラム

（１）呼出手順

①文字ﾊﾟﾀｰﾝのｱﾄﾞﾚｽをｾｯﾄする(複数可)

②認識文字列の拡納ｱﾄﾞﾚｽをｾｯﾄする

③文字認識ﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑを起動する

④結果が認識文字列にｾｯﾄされて戻る

（２）現在の認識範囲

ＡＳＣＩＩコードにあるもの

・英数字（大文字，小文字）

・＝，＋，－等

（３）問題点

①ＡＳＣＩＩコードにない文字の取扱い　　（ＥＸ．α，≡）

（４）課　　題

今回は、活字を対象にしたが、将来的には手書き文字も考えている

化学構造式認識における構造式エディターソフトの役割（４４１）

（テクノシステム(株)システム部）　内山　峰隆

化学の分野において化学構造式を計算機で取り扱う場合、化学構造式が研究者に多くの情報をもたらすため、化学構造式の入力方法、及び情報の獲得形式は非常に重要な要素である。にもかかわらず多様な目的のために使用されるため、ある標準的な入力方法、計算機内での情報の統一化はなされていない。また、個人レベルで容易に使用したいというニーズも高まっている部分でもある。ここでは、別途開発したパソコン用分子モデリングシステム４４１の構造入力モジュール（ＭＯＬＩＮ）の化学構造式エディタとしての機能について紹介する。

本システムの入力装置は主にマウスを用い一部キーボードの入力も含む。化学構造式の入力方法は、マウスによって直接作画する方法とテンプレートメニューを選んで入力する方法を併用して行う。各原子種、結合種は、すべて炭素原子、単結合を置換する方法をとり、チャージ、ラジカル情報も入力可能である。またユーザ定義の構造を登録しテンプレートとして使用するする事もできる。システム内部の構造情報は、原子数、結合表、画面座標で表現される。システム４４１は、マウスを中心とした非常に簡単な操作で使用できるので、化学構造式を取り扱う各分野の入口として多様な使い道があると思われる。また、当日はこの種の代表的ソフトの一つであるＣｈｅｍＤｒａｗとの比較についても触れ、話題提供としたい。

ワーク・ショップを終えて

米田 幸夫

老骨に鞭を打って開催した，ワーク・ショップ「化学構造式の自動解読」を無事おえて，開催の約束である，報告書を執筆する頃となった．　このテーマは私自身が永年の夢とし おり，関連するパソコン・ソフトがやっとのことで市販されるた昨年春から夏にかけて，統合プログラムを作成した．　話題提供者の一人，花井氏が＜究極の入力法＞と称されるように，確かに化学者にとって有用なシステムであると信じている．

ワーク・ショップの構成の手始めに，CICSJ BULLETIN に話題提供者の募集広告を出したところ，やはり応募者はなかった．　それで，話題提供者を頼み込んでプログラムを編成し，BULLETIN の No.2 に参加者を募集したところ，その出版と締切の間の日数が不足であったことも重なってか，参加者は話題提供者を含めて１５名にとどまった．　私の思い入れほどには情報化学者の興味を引かないのかと，残念に思わなかったわけではないが，少人数だけに講演もゆっくりと聞け，討論も盛んで，ワーク・ショップとしては，かえって成功かと思う．

ここに話題提供者各位に御礼申し上げるともに，先見の明ある参加者の芳名をここに留めたい．　山崎　昶（電通大），尾崎　剛（同），高橋　由雅（豊橋技科大），松浦　育敏（㈱中外製薬），藤枝　修子（お茶女子大），川人　順子（同），前田　知子（ＪＩＣＳＴ），志村　和樹（同），金子　修（㈱高電社）（敬称略，受付順）．

一方，公約である，ＳＦ／ＩＣＯＮのソフトの公開が夢にならないよう，私は現在，最小限のメモを作成している．　近い内に，広告できると思う．

年会プログラム

日本化学会第62秋季年会
情報化学関連講演

日時　1990年9月22日（日）～25日（木）
場所　北海道大学教養部

Ａ１会場
〔化学情報・計算機化学〕
9月23日(13:30～14:30)

２Ａ１０９　半経験的分子軌道法を用いた静的および動的分極率の計算（１）原子分極率補正項のパラメトリゼーション（早大理工・昭和電工情報システム部）NIKITA Arif Kamka○時末康弘・森　和英・伊藤礼吉

２Ａ１１０　^{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実用化の検討（２）巨大ピークの存在による合致度低下の問題（日立計測・日立那珂）橋本正雄・笹淵　仁

２Ａ１１１　ＬＡＮを用いたＮＭＲデータ管理およびオンライン処理システムの開発（三共分析代謝研・三共活性物質研）○皆川勝弘・矢島美由紀・春山英幸・桑野晴光・成戸俊二

２Ａ１１２　有機合成設計システムＣＡＳＩＮＯの開発（１４）キラルシントン選定モジュールの実行検証例（化技研・富士通）○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・八幡史子・樋高　透

２Ａ１１３　デオキシミオグロビンの圧力変形（京大理・名大理）○倭　剛久・妹尾康喜郷　信広

２Ａ１１４　ＡＬＳ法によるゴキブリ誘引摂食化合物の定量的構造活性相関（大正総合研・北里薬）川島　豊○山田由紀・富沢一雪・荻野一正・漆崎文男・島村治夫

〔超伝導〕

１Ａ１１８　Layer-by-Layer　成長多層膜の微細構造：分子動力学とコンピューターグラフィックスによる検討（京大工）○服部敬由・宮本　明・乾　智行

１Ａ１２５　$SrTiO_3$ (100)面の原子層ホモエピタキシャル成長の機構：分子動力法とコンピュータグラフィックスによる検討（京大工）宮本　明・○武市健太郎・服部敬由・乾　智行

１Ａ１２６　ペロブスカイト型複合酸化物基板の格子定数と表面構造：分子動力学とコンピュータグラフィックスによる検討（京大工）宮本　明・松原一文・服部敬由・乾　智行

〔化学教育・化学史〕

２Ａ１０５　化学ＣＡＩ教材の作成と授業への利用（北理研化教育コンピュータ利用研グ

ループ）松崎祥一・羽柴宜宏○杉山剛英・酒井智史・井上貴志・伊藤　洋・荒井英志・阿部益太郎

２Ａ１０８　化学情報データベースにおけるシステムの改良と再構築―情報の包活的処理に向かって（埼玉大理）○田中威朗・下沢　隆

〔天然物化学〕

３Ａ１０９　β－フルクトフラシノダーゼ（Asp.Oryzae由来）の糖転移反応における動力学的研究（２）（明大理工）吉弘芳郎○杉山和典・白楽哲也・前田宏治・室田明彦

Ａ３会場

〔有機化学―物理有機化学〕

４Ａ３０３　化学因子分析法によるフェノールタレインの酸―塩基平衡の検討（兵庫教育大）○森川宏司・尾関　徹・木原　寛

４Ａ３０５　ab initio 分子力場パラメータの開発(I) ―ＮＭ２フッ素パラメータの補完（日立中研・日立小田原）○丸泉琢也・石原平吾

Ｂ１会場

〔物理化学―構造〕

１Ｂ１０３　非経験的分子軌道法による振動回転定数の計算（化技研）○杉江正昭・青柳睦・竹尾陽敏・松村　知

１Ｂ１０５　液晶の分子動力学シミュレーションその１（富士通）○酒井広太・福田育夫・竹内宗孝・三上益広

〔物理化学―物性〕

２Ｂ１０３　多中心モデル二酸化炭素流体の計算機シミュレーション（京大工・松下電器中研）○稲垣文択・岸本良雄・北尾　修・田中秀樹・中西浩一郎

Ｃ１会場

シンポジウム〔機能設計と錯体化学〕

２Ｃ１０９　招待講演　インテリジェントロボットホスト分子の設計（広島大医総合薬）木村榮一

Ｃ２会場

シンポジウム〔機能設計と高分子〕

１Ｃ２０８　重合反応に用いる分子レベル空間の設計（岐阜大工）○宮田幹二・佐田和己

１Ｃ２０９　招待講演　光学分割機能を有する高分子の設計と合成（名大工）岡本佳男

２Ｃ２０４　依頼講演　活性種制御によるオレフィンおよびジオレフィン類の重合を利用した高分子設計（阪市大工）圓藤紀代司・大津隆行

２Ｃ２１０　依頼講演　マイクロリソグラフィー用レジスト材料―化学増幅レジストの分

子設計（山形大工）上田　充

シンポジウム（共役系ポリマーにおける機能発現）

３Ｃ２０９　周期構造をもつ不飽和共役炭化水素ポリマーネットワークの状態密度のトポロジー依存性の解析（お茶女大理）○細矢治夫・高　顯多

４Ｃ２０１　ＮＢＭＯネットワークの分子設計―有機強磁性体にむけて（広島大理）○青木百合子・今村　詮

４Ｃ２０８　依頼講演　導電性高分子におけるポーラロン，バイポーラロン，ソリトン（東大理）古川行夫

Ｄ２会場

シンポジウム〔理論化学の基礎と展開〕

１Ｄ２１２　依頼講演　電子構造と分子場のコンピューターグラフィックス（九大工・分子研・中京大）○柏木　浩・伊奈　諭・泰野　世

シンポジウム（凝縮系の理論化学）

４Ｄ２０１　n－ブタン溶液の計算機シミュレーション（京大工）○林　治尚・田中秀樹・中西浩一郎

４Ｄ２１０　分子力場パラメータの最適化（39）ab initio 分子軌道法で計算した分子間ポテンシャルに基づく炭化水素のV.D.W.パラメータの最適化（化技研・センチュリリサーチセ）○都築誠二・田辺和俊・内丸忠文・桑島　聖

４Ｄ２１９　ＤＮＡ塩基配列データ（遺伝情報）の数理解析：数量化法によるmRNA前駆体体スプライス信号配列の解析（北大理）飯田陽一

Ｇ１会場

〔機能物質〕

４Ｇ１２４　有機非線形光学材料の合成デザイン(10)分子内ＣＴ型複素環化合物（阪府大工）松岡　賢○古庄　勝・飯田幸子・北尾悌次郎

４Ｇ１２５　ＰＰＰ分子軌道法による近赤外吸収色素の分子設計と合成（東工芸大工）渡辺信二・笠原宏明○松本利彦・黒崎尋一

４Ｇ１２７　新規なポリイミドの分子設計と電子構造（京大工・基礎化研）○中島啓造・田中一義・山邊時雄

＊今回は情報化学のセッションでの発表件数が少数だったため、他のプログラムから関連発表を抜粋いたしました。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）

部会記事

アンケート調査の結果について

情報化学部会では年会中の去る３月30日、化学情報・計算機化学の会場において簡単なアンケート調査を実施しました。少々遅くなりましたがその結果を御報告致します。

回答を下さった方は34名（うち部会員23名）、40代男性が中心で女性は１名のみであった。

１）まず、情報分野で最も関心のある内容について次の中から３つ以内で選んでいただいた。

1. 量子化学	2. 分子力学	3. 分子動力学	4. 分子設計
5. 反応設計	6. エキスパートシステム		7. ＡＩ
8. 知識ベース	9. データベース	10.ネットワーク	11.構造解析
12. ＱＳＡＲ	13. ケモメトリックス一般		14.パターン認識
15. ニューラルネット		16.ファジィ	17.ＣＡＩ
18. グラフィックス		19.ＬＡ	20.その他

延べ回答数123 件（１項目あたり平均6.15件）があり、その中で高い関心を集めた内容と寄せられた件数は次の通りであった。

1. データベース	(15)	4. エキスパートシステム	(8)
2. 分子設計	(12)	4. ＡＩ	(8)
3. ネットワーク	(10)	7. 知識ベース	(7)
4. 分子力学	(8)	7. ニューラルネット	(7)

また20項目を理論化学、ＣＡＤ（Ｄ）、データベース、新技術・課題、その他にあえてまとめた上でそれぞれに寄せられた回答を集計すると概ね各区分とも25件前後（即ち回答者の70～80％）となった。

２）次にワークショップ、講習会それぞれについてどのようなテーマと内容を希望するか記述式で回答をいただいた。その結果、ワークショップと講習会に特に違いがみられなかった為、ここでは両方の回答をまとめて次に示す。

1．研究者にとって化学情報はどう役立っているか
2．ワークステーション、パソコン等ハードウェアの進歩
3．ＵＮＩＸ
4．ファイルの圧縮、ファイル構造の規格化
5．分子力学、分子動力学、計算化学入門
6．化学知識表現

7. ＳＧＭＬによる論文誌全文ＤＢ作成
8. ソフトウェアの紹介、比較
9. 化学ＤＢの利用
10. 高分子設計における計算機化学の役割
11. 情報化学とその応用面の展望
12. ケモメトリックス
13. 初心者、シニアケミスト向け講習会
14. 同一物性をもつ化合物群の構造類似性
15. 異機種間のファイル送受信

これらのうちいくつかについては情報化学部会として既に何らかの形で取り上げているがそうでないものも多い。それらについては今後部会活動に十分反映させていきたい。

尚、「化学の広場」に対する関心の度合いについても質問したところ時々見るを含め全体の70％強の人が化学の広場に興味を示された。さすがというべきか。

最後に回答を寄せて下さった皆様に心から感謝致します。

ありがとうございました。

関連行事

第19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、日本薬学会関東支部、日本農芸化学会、日本農薬学会
　　　日本生物物理学会、構造活性相関懇話会
日時　平成3年11月27日（水）～29日（金）
会場　（財）川口総合文化センター　リリア（Lilia）
　　　〒332　埼玉県川口市川口3－1－1　TEL　0482－58－2000
　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　FAX　0482－58－2100
　　　交通　JR京浜東北線川口駅下車　西口駅前
　　　　（JR川口は東京から京浜東北線で30分、新宿から埼京線経由赤羽乗り換で約20分）

本シンポジウムは第14回情報化学討論会と併催されます。
参加登録・懇親会各予約及び要旨集前送申込締切　10月15日（火）
一般講演の講演時間25分（講演18分、討論7分）

第1日（11月27日（水））
一般講演
　9：35～10：25　［座長］赤羽健司
27S01　脂肪族化合物の置換基エントロピー定数σ_s^0の推算（阪大名誉）佐々木喜男、（阪大薬）○高木達也
27S02　油水分配のエネルギー側面の考察から構造活性相関のための新しい疎水性定数π_Hおよびπ_Sの導出へ（阪大薬）○亘　永忠、神崎康治、田中恭子、木村敦臣、鹿野哲司、藤原英明
　10：35～11：50　［座長］川島豊
27S03　ガスクロマトグラフィーにおける自由エネルギー変化（近畿大薬）川木秀子
27S04　アミノ酸の疎水パラメータの解析（日本新薬）○外松朋子、荻野昭男　（京大農）赤松美紀、藤田稔夫
27S05　ファジィ適応最小二乗法（FALS91）によるQSAR解析（北里大薬）○森口郁生、劉　謙、広野修一、松下泰雄、中込　泉
　休憩　11：50～13：00
特別講演I
　13：00～14：00　［座長］大澤映二
Recent Advances in Force-Fields, the Development of Class II Force Fields (BIOSYM Technologies, INC) Arnold T. Hagler
一般講演
　14：20～15：35　［座長］高山千代蔵
27S06　ニューラルネットワークにおける入出力相関指数の構造活性相関研究への応用（星薬大）○市川紘　（日立CE）青山智夫
27S07　ニューラルネットワークの構造－活性相関への適用における留意事項（富士通）○湯田浩太郎、中山徹、井関京子

２７Ｓ０８　殺虫性ジベンゾイルヒドラジン類の定量的構造活性相関（京大農）○及川信宏、中川好秋、西村勁一郎、藤田稔夫

１５：４５～１６：３５　［座長］多田幸雄

２７Ｓ０９　合成ピレスロイド系殺虫剤のノックダウン活性における定量的構造活性相関（京大農）○西村勁一郎、赤松美紀、藤田稔夫　（ダイセル化学）長部広和、後藤達乎

２７Ｓ１０　Gramicidin S Analog の疎水性と構造および活性との関係（京大農）○片山　忠、中尾和也、赤松美紀、藤田稔夫

１６：４５～１８：００　［座長］古谷利夫

２７Ｓ１１　薬物構造展開事例応用システム（ＥＭＩＬ）　第１報　構造展開事例データベースの構築（田辺製薬）朝尾正昭、清水　良　（日本新薬）足立道弘、荻野昭男（ミドリ十字）井上佳久　（日本曹達）岩滝　功、汲田　泉　（阪大産研）植田育男　（宝酒造）梅田芳久　（中外製薬）大田雅照、古賀　弘、小林孝光（三井東圧）小田研悟　（大塚製薬）木戸　勝　（鐘紡）坂本文夫　（三菱化成）関　谷哲雄　（住友化学）○高山千代蔵　（サントリー）深見治一　（日産化学）牧野健二　（理研）吉岡宏輔　（日本農薬）吉田正徳　（塩野義製薬）山川真透（三共）吉本昌文　（玉川大農）若林　攻　（京大農）藤田稔夫、赤松美紀

２７Ｓ１２　薬物構造展開事例応用システム（ＥＭＩＬ）　第２報　新規殺ダニ性ピレスロイドのデザイン合成と生理活性（京大農）程　志明、西村勁一郎、○藤田稔夫　（理研）吉岡宏輔　（大日本除虫菊）南手良裕、勝田純郎

２７Ｓ１３　薬物構造展開事例応用システムＥＭＩＬ　第３報　等価変換構造ライブラリの構築（ミドリ十字中研）○井上佳久、山浦康成　（京大農）藤田稔夫

第２日（１１月２８日（木））

一般講演

９：１０～１０：２５　［座長］寺田弘

２８Ｓ１４　タンパク質複合体構造のモデリング（北里大薬）○北澤聖子、米田茂隆、梅山秀明

２８Ｓ１５　レニンの立体構造の新規構築とレニン阻害剤の結合様式に関する動的解析（北里大薬）三井士子、神谷健秀、米田茂隆、○梅山秀明

２８Ｓ１６　トロンビンＸ線構造が示唆する特異的阻害機構（三菱化成）○久保寺英夫、佐々木千津子、宮川麻由子、奥村千英子、菊本亮二、松崎尹雄

１０：３５～１１：５０　［座長］板井昭子

２８Ｓ１７　薬物分子の動的構造を用いた構造活性相関（徳島大薬、徳島大工[1]、徳島文理大薬[2]）○後藤　了、堀　均[1]、平良全栄[2]、寺田　弘

２８Ｓ１８　Ｄｉｓｔａｎｃｅ　Ｇｅｏｍｅｔｒｙモデルによる塩基性フェニルエステル類のキモトリプシン阻害活性に関する構造－活性相関（豊橋技科大）○長谷川清、宮下芳勝、佐々木慎一、（興和東京研）横尾信夫、渡辺好一郎、平田光輝

２８Ｓ１９　殺虫性 Dioxatricycloalkene 類および関連化合物の三次元定量的構造活性相関　（京大農）○赤松美紀、藤田稔夫　（島根大環境）尾添嘉久、持田和男、中村利家　（UC Davis）松村文夫

休憩　１１：５０～１３：００

（１３：００～１６：１０までは情報化学討論会の講演を行います。
ポスター会場では１０：３０～１６：００情報化学討論会のポスターを掲示してあります。）

特別講演Ⅱ

１６：３０～１７：３０　［座長］細矢治夫

コンピュータグラフィックスにおける４次元モデリング（東大理）國井利泰

アトラクション

１７：４０～１８：００　パイプオルガン演奏　（ソニー）佐野羊奈子

懇親会　（情報化学討論会と合同で開催します。）

１８：１５～２０：００　銀座アスター　川口賓館（リリア１４階）

第３日（１１月２９日（金））

一般講演

９：１０～１０：００　［座長］松崎尹雄

２９Ｓ２０　サイトカインの受容体結合部位の推定法開発（北里大薬）○山下憲文、神谷健秀、米田茂隆、菰岡仁志、梅山秀明

２８Ｓ２１　セリンプロテアーゼの触媒部位と結合部位の動的解析（北里大薬）○神谷健秀、梅山秀明

１０：００～１０：５０　［座長］高橋由雅

２９Ｓ２２　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（その２）（東大薬）○西端芳彦、岩間年治、斉藤昭一、板井昭子

２９Ｓ２３　コンピュータによる新規骨格の活性構造構築法の開発（東大薬）○井上　篤、金沢孝記、板井昭子

１１：００～１１：５０　［座長］西岡孝明

２９Ｓ２４　Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA) 法をもちいた立体パラメータ Ｅｓ（ＡＭＤ）の解析（中外製薬探索研）小林孝光

２９Ｓ２５　Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA) 法をもちいた Quinolone 系抗菌剤１位置換基の receptor mapping （中外製薬探索研）○大田雅照、古賀 弘

休憩　１１：５０～１３：００

１３：００～１４：１５　［座長］松浦育敏

２９Ｓ２６　光要求性除草活性を示すピリドンカルボン酸アニリド類とｏ－Ｃｌジフェニルエーテル類の３－ＤＱＳＡＲ解析（ＣｏＭＦＡ解析）（ダイセル化学総研）○長部広和、後藤達乎、（京大農）藤田稔夫

２９Ｓ特２７　Recent Advance in QSAR: Comparative Molecular Field Analysis (Tripos Associates, Inc.) R. Cramer, D. Patterson, and P. Hecht

パネルディスカッション

・１４：２０～１６：００　［司会］平野恒夫

計算化学の将来とワークステーション

［パネリスト］板井昭子、岩田末廣、大澤映二、田辺和俊、他

参加登録費　情報化学討論会と共通、講演要旨集（情報化学討論会講演要旨集と合本）１冊を含みます。

予約　６，０００円　　当日　７，５００円

学生の方は事情によりウェーバー方式をとります。予約申込の時お知らせ下さい。

講演要旨集の前送を希望される方は送料として１，０００円追加

懇親会費　予約　６，０００円　　当日　７，０００円

予約申込方法　Ｂ５版（縦）用紙に横書きで、氏名・勤務先・連絡先住所（電話、ファクシミリ）、懇親会出欠、要旨集前送希望の有無をご記入の上、下記宛お送り下さい。なお、締切日までに下記銀行口座へ所定の金額をお振込下さい。確認後、確認書をお送りします。

予約申込先　〒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
構造相関シンポジウム　細矢治夫宛

銀行口座　銀行名　住友銀行大塚支店
口座番号　普通預金　６３０９０２
名義　情報化学構造活性実行委員会

問合せ先　電話　03-3943-3151(お茶大代表) 内線 細矢553 平野551 鷹野559 藤枝562
ファクシミリ 03-3942-2815（宛先個人名を明記して下さい）

第６回化学ＰＣソフトウェア研究討論会の開催要領

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　（申請中）
後援　ＮＥＣ　新潟県教育委員会　長岡市　長岡市教育委員会　（申請中）
日時　１９９１年１１月３０日（土）午後，１２月１日（日）
会場　長岡工業高等専門学校　視聴覚教室，１１１教室
　所在地：〒９４０　長岡市西片貝町８８８
　交　通：上越新幹線　長岡駅下車　同駅東口よりバス１５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　演題　未定
　講師　長岡技術科学大学　化学系　山田明文教授
発表申込　7月３１日（水）締切　（必着）
　一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（連絡者，住所，電話番号，ＦＡＸ番号）
　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（月）締切　（必着）
　ヘッダー＋要旨でＡ４判２枚
懇親会　１１月３０日（土）17:00～18:30　長岡工業高等専門学校　食堂
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	学生会員	１５００円
懇親会費	３５００円		

参加申込　１０月１０日（木）締切　（必着）
　郵便またはＦＡＸで，氏名，勤務先，住所，電話番号，FAX番号をご記入の上，下記宛に会費とご一緒に現金書留でお送り下さい．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　〒９４０　長岡市西片貝町８８８
　長岡工業高等専門学校　工業化学科　関沢　恒男
　電話　０２５８－３４－９２５５
　FAX　０２５８－３６－６１８３　（関沢宛を明記して下さい）

薬物受容体構築と医薬品設計シンポジウム

とき　平成3年12月10日（火曜日）　9.30-17.00

ところ　北里大学薬学部H6教室（港区白金5－9－1）

［交通］JR田町またはJR渋谷駅前から都バスにて北里研究所前下車。または営団地下鉄広尾駅下車天現寺交差点方向へ徒歩10分。

主催　日本薬学会関東支部

共催　北里大学薬学部、　日本化学会情報化学部会

講演

1. 薬物受容体構築と医薬品設計（北里大・薬）梅山秀明
2. ペプチドからノンペプチドへの医薬品設計（万有製薬・探索研）森島甫
3. カルシウムアンタゴニストと受容体タンパク質（田辺製薬・生物研）内藤一秋
4. オータコイドの受容体（東大・医）清水孝雄
5. ムスカリン性アセチルコリン受容体（東大・医）芳賀達也
6. 微生物生産薬物受容体アンタゴニストの探索（北里大・薬）田中晴雄

参加費　無料

問合せ・連絡先　〒108　東京都港区白金5－9－1
北里大学薬学部薬品物理化学教室
梅山秀明（TEL03-3444-6161内線3250）
米田茂隆（同上　内線3251）

話　題

「化学図書・情報センター」オープンについて

化学会館竣工に伴い，旧「化学図書館」は名称を「化学図書・情報センター」と改称をして化学会館３階に９月２日（月）よりオープン致します。大学図書館や企業内資料室とは異なる，化学会としての特色ある機能，内容を持つことを目標にして作られており，とくに地方在住会員へのサービス及び企業に所属する会員の調査，企画に役立つ事を念頭に置いております。

所蔵内容

従来の化学系論文誌の他，化学会の所蔵の特色となっている内外の講演要旨集を充実し，企業会員の調査，研究に役立つような化学関連分野の技術雑誌，官庁出版物を備えました。ビデオはＡＣＳ製作ビデオ，イギリスのOPEN AIR UNIVERSITY ビデオ等を備えました。館内はすべて開架式でご自由にご覧になれます。貸出は原則として行いませんがビデオについては一部，貸出を予定しております。

文献複写サービスと所在情報の提供

当センターに来館いただけない地方在住の会員の方々を対象に文献複写と所在情報の提供を行います。郵送，ＦＡＸ，パソコン通信（NIFTY-Serve)によって複写の申込を受け，当センター所蔵物だけでなくご希望によってはＪＩＣＳＴへも代行して複写依頼致します。また，当センターに所蔵していない場合はどこで所蔵しているかの所在情報の提供を行い，入手方法がわかるものについては併せてお知らせいたします。

データベースについて

日本科学技術情報センター，学術情報センター，ＣＡＳなどのデータベースの利用を予定しております。データベース検索に不慣れな会員を対象にするデータベース検索入門の講習会の開催を計画しており，既に日本科学技術情報センターよりの協力を得て，ＪＯＩＳのうちＪＩＣＳＴ科学技術文献ファイル，ＪＯＩＳ－Ｆ，および各種研修ファイルについては日本化学会会員に対する指導研修および展示デモンストレーションとしての利用に限り，原則的に当センター内にては無料で使用する事ができるようになりました。ＤＩＡＬＯＧやＣＡＳについても既に関係の方々にご協力をお願いしており，協力いだだける旨の回答を頂戴しております。具体案は提示されておりませんが，会員の研修については優遇していだだける見込みです。講習会等の開催のほか，会員の方々にデータベース端末をお使いいただくことも計画しておりますが利用方法について検討中です。

ＰＣとソフトについて

ＰＣについてはデータベースの端末として使うだけでなく，各種ソフトが使えるようにしたいという会員の方々の意見に従い，ＮＥＣの９８０１，ＩＢＭ，ＭＡＣＩＮＴＯＳＨを備えました。ＩＢＭは外国のＣＤ－ＲＯＭを使用する事ができます。ＭＡＣにはＣＨＥＭ－Ｄｒａｗを現在，用意しておりますが，他にどのようなソフトが会員の方々に役立つか購入を検討しております。

以上，当センターの概略です。今後は，会員の方々のご意見によって段階的に内容を充実していく予定です。情報化学部会の会員の方々から，是非ともご意見をお聞かせいだだきたくお願い申し上げます。

日本化学会　化学図書・情報センター　會田久美子
（　連絡先　電話:03-3292-6171,　ＦＡＸ:03-3292-6319,　NIFTY-Serve:HBH01327　）

海外動向

MEETINGS

25-30 August 1991.
202nd 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: 03-5487-2790)詳細は本号国際会議欄参照

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).

23-25 September 1991.
The Montreux International Chemical Information Conference & Exhibition.
Annecy, France.
Contact: Harry Collier, Infonotrics Ltd. 9A High St., Calne, Wiltshire SN11 OBS, U.K.

7-9 October 1991.
Second Symposioum on High Performance Computing.
Monpellier, France.
Contact: CNUSC, SHPC Secretariat, 950, rue de Saint Priest, BP 7229, 34184 Monpellier Cedex 4, FRANCE (33-67-14-14-14; FAX: 33-67-52-37-63; e-mail: SHPC@FRMOP11.Bitnet).

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).

9-13 February 1992.
Biophysical Society Meeting (Joint Meeting with ASBMB).
Houston, TX.
Contact: Emily Gray, Biophysical Society Room 3209, 9650 Rockville Pike, Bethesda, MD 20814 (301-530-7010; FAX: 301-530-7133).

5-10 April 1992.
San Francisco, CA.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

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.

23-28 August 1992.
204th ACS National Meeting.
Washington, DC.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

4-10 October 1992.
ELMAU 4: Computational Methods in Chemical Design.
Schloß Elmau, GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a. d. Ruhr, GERMANY (49-208-30-64-88; FAX: 49-208-30-46-07).

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

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

1991年第6巻第3号　論文題目、著者、頁

The generator coordinate approximation for molecules: A review, *J. Broeckhove, L. Lathouwers, and P. Van Leuven*, p. 207

Geometric chirality products, *A. B. Bauda, T. P. E. Auf der Heyde and K. Mislow*, p. 243

Desymmetrization and degree of chirality, *T. P. E. Auf der Heyde, A. B. Buda and K. Mislow*, p. 255

Analytic evaluation of multicenter integrals fo Gaussian-type orbitals, *K. Brinkmann and H. Kleindienst*, p. 267

Permutational chracter of dsd mechanisms in heptacoordinate chemistry, *J. Brocas and M. Bauwin*, p. 281

Graphical properties of polyhexes: Perfect matching vector and forcing, *F. Harary, D. J. Klein and T. P. Živković*, p. 295

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP

1991年第9巻第4号　論文題目、著者、頁

The QSAR application of a new steric parameter set for aromatic substituents defined by the acidic hydrolysis rate of ortho-substituted benzamides, *Sotomatsu, T. and Fujita T.*, p. 295

Further comparative studies of fragment weighting schemes for substructural analysis, *Ormerod, A., Willet P. and Bawden, D*, p. 302

Hydrophobicity parameter of diazines (1). Analysis and prediction of partition coefficients of monosubstituted diazines, *Yamagami, C., Takao, N. and Fujita, T.*, p. 313

Quantitative structure-activity relationship (QSAR) studies using electronic descriptors calculated from topological and molecular orbital (MO) methods, *Gombar, V.K. and Enslein, K*, p. 321

Quantitative structure-property relationships for the polarizability, solvatochromic parameters and lipophilicity, *Schüürmann, G.*, p. 326

A structure-activity relationship for the binding of acridine-4-carbox-amides to DNA, *Moyer, S.R. and Jurs, P.C.*, p. 333

QSAR analysis in 2,4-diamino-6,7-dimethoxy quinoline derivatives alpha$_1$ -adrenoceptor antanonists using the partial least squares (PLS) method and theoretical molecular descriptors, *Cocchi, M., Menziani, M. C., Rastelli, G. and De Bendedetti*, p. 340

1991年第10巻第1号　論文題目、著者、頁

QSAR on substituted salicylamides using PLS with implementation of 3D MEP descriptors, *Norinder, U. and Hohberg, T*, p. 1

An application of un supervised neural network methodology (Kohonen topology-preserving mapping) to QSAR analysis, *Rose, V. S. Croall, I. F. and Macfie, H. J.*

H., p.6

Model-based LFER parameters and QSAR of ligand- β-adrenoceptor interactions. 1. Equilibrium models and parameters of β-adrenergic effectuation, *Dove, S. and Franke, R.*, p. 16

Model-based LFER parameters and QSAR of ligand- β-adrenoceptor interactions. 2. Estimation of QSAR of agonistic potency and receptor affinity in a series of β-adrenergic phenethanolamines, *Dove, S. and Franke R.*, p. 23

3-Hydroxy-3-methylglutaryl coenzyme a reductase: molecular modeling, three-dimensional structure-activity relationships, inhibitor design, *Motoc I., Sit, S.Y., Balasubramanian, N. and Wright J.J.*, p. 30

A strategy fpr ranking environmentally occuring chemicals. 4. Development of chemical model systems for characterization of halogenated aliphatic hydrocarbons, *Lindgren, F. Eriksson, L., Hellberg, S., Jonsson, J. Sjöström, M. and Wold, S.*, p. 36

The electrotopological state: an atom index for QSAR, *Hall, L.H., Mohny, B. and Kier L.B.*, p. 43

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1991年第31巻２号　論文題目、著者、頁

Papers dedicated by his students and colleagues to Michael F. Lynch in recognition of his 25 years at the University of Sheffield.

A Tribute to Michael F. Lynch, *G. W. A. Milne and Peter Willet*, p. 175

Integration of Microcomputer and Mainframe Information Systems, *William G. Town*, p. 176

Some Oservations on Piercemeal Electronic Publishing Solution in the Pharmaceutical Industry, *Wendy A. Warr*, p. 181

The Development of Version 3 and 4 of the Cambridge Structural Database System, *Frank H. Allen, John E. Davies, Jean J. Galloy, Owen Johnson, Olga Kennard, Clare F. Marcrae, Elenor M. Mitchell, Gary F. Mitchell, J. Michael Smith, and David G. Watson*, p. 187

Chemical Abstracts Service Chemical Registry System. 13. Enhanced Handling of Stereochemistry, *J. E. Blackwood, P. E. Blower, Jr., S. W. Layten, D. H. Lillie, A. H. Lipkus, J. P. Peer, C. Qian, L. M. Staggenborg, and C. E. Watson*, p. 204

Classification of Chemical Reactions: Potential, Possibilities, and Continuing Relevance, *David Bawden*, p. 212

AUTONOM: System for Computer Translation of Structural Diagrams into IUPAC-Compatible Names. 2. Nomenclature of Chains and Rings, *L. Goebels, A. J. Lawson, and J. L. Wisniewski*, p. 216

Atom-by-Atom Searching Using Massive Paralleism. Implementation of the Ulmann Subgraph Isomorphism Algoriothm on the Distribution Array Processor, *Peter Willet, Terence Wilson, and Stewart F. Reddaway*, p. 225

Computer Storage and Retrieval of Generic Chemical Structures in Patents. 11. Theoretical Aspects of the Use of Structure Languages in a Retrieval System, *Winfried Dethlefsen, Michael F. Lynch, Valerie J. Gillet, Geoffrey M. Downs, John D. Holliday, and John M. Barnard*, p. 233

Computer Storage and Retrieval of Generic Chemical Structures in Patents. 12.

Chemical Information Souces. By Gary Wiggins, Reviewed by *David K. Johnson,* p. 358

Using dBASE IV 1.1 By Edward Jones, Reviewed by *Stephen R. Heller,* p. 359

Window 3: The Complete Referebce. By Tom Sheldon, Reviewed by *Stephen R. Heller,* p. 359

The Chitin Sourcebook: A Guide to the Research Literature. By E. R. Pariser and Donald P. Lombardi, Reviewed by *Maria L. Bade,* p. 359

The Beilstein Online Database: Implementation, Content, and Retrieval, Reviewed by *Guenter Grethe,* p. 360

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 9, Number 5
September 1991

目　　次

部会行事

日本化学会情報化学部会　第５回国際ワークショップ　報告

平成３年8月２９日（木）１７：３０～２０：３０、幕張メッセ国際会議場２０２号室において、「国際的視野から見た情報化学の現状と将来」の討論主題でワークショップが開催された。同会議場では、8月２５日～３１日に、日本分析化学会創立４０周年記念事業として、ＩＣＡＳ'９１（IUPAC International Congress on Analytical Sciences 1991）が開催されていた。ちなみに、Chemometrics and Robotics のセクションは、２９日～３１日に発表が行われ、情報化学関係の国内・国外の研究者がかなり大勢出席されていた。そこで、この機会に場所の移動の手間を省くため、同じ会場内で、お互いの交流を深め、情報交換の場とするためのワークショップの開催になった。

藤原　譲先生の簡単なご挨拶で定刻にはじまり、まず出席者全員（１８名）が自己紹介を行なったあと、ドイツの Matthias Otto 教授（Bergakademie Freiberg）から Recent Approach in Computer Chemistry in Germany について、ＯＨＰを使って、研究グループとその研究内容の紹介があった。続いて、オーストリアの Wolfhard Wegscheider 教授（Graz University of Technology）から、Recent Approach in Computer Chemistry in Austria の話題で、ＯＨＰを使い、研究グループとその研究内容の紹介があった。ドイツ語圏内の共同研究が随分活発に行われているのが実態のように思われた。

軽食をつまみ、飲物を片手にしながら、懇親会の形式で、今の２つの講演についての質問や意見交換など個人的に会話がはずみ、４０分程はあっという間に過ぎたように感じられた。

引続き藤原先生の司会で、アメリカの John Kalivas 助教授(Idaho State University)から、Recent Approach in Computer Chemistry in U.S.A.の話があった。膨大な内容を短くまとめるのに苦労されたように見えた。ついで、藤原先生から日本の情報化学の現状と研究の上での特徴などが紹介された。

最後に３０分程ではあったが、自由討論の時間があった。将来性も含めて化学の研究に望ましい言語、ＯＳ、ワークステーション、ハードとソフトの互換性などの話題で、ポーランド、中国、イランからの参加者の発言もあり、ずいぶん活発な討論が行われたと思う。

幕張メッセをあとにしながら、「皆さん、英語がお上手ですね。」と言われた藤原先生の表情に、世話人の１人としてまたこのような集まりができればと願った。出席者された方（順不同、敬称略）は、M. Otto, J. Kalivas, B. Walczak , T. Kowalska, W. Wegscheider, D. Pishva, Z. Hang, T. Sakaki, 叶多謙蔵、宮下芳勝、相島鐵郎、柳　孝二、長谷川清、鬼頭繁治、藤原　譲、尾関　徹、西川利男、藤枝修子であった。

藤枝修子（お茶の水女大）

第４回情報化学夏期セミナーの報告

橋本正雄［日立計測エンジニアリング（株）］
工藤喜弘［山形大学工学部電子情報工学科］

［はじめに］　下記の要領で1991年 7月25日（木）－26日（金）、蔵王ハイツ（宮城県刈田郡蔵王町遠刈田温泉）で恒例のセミナーを開催した（敬称略）。

初日	13:10-13:40	田中一雄（旭リサーチ）	これまでのコンピュータケミストリー
	13:40-14:40	梅山秀明（北里大）	核酸の三次構造
	14:40-15:40	国沢　隆（理科大）	遺伝子情報とデータベース
	16:00-17:00	山崎千春（日本電子）	蛋白質の構造とＮＭＲ
	17:00-18:00	藤田真作（富士フィルム）	有機合成反応情報
	18:30-	自由討論	
二日目	9:00-10:00	吉田元二（住友化学）	化学情報処理と統計学
	10:00-11:00	宗像弘明（菱化システム）	コンピュータ化学の応用

募集人数（70名）を多くしたこともあって一時はどうなることかと思ったが、無事終わったのは多くの方々の御協力の賜物であり、その方々に厚く感謝する次第である。

［場所］　東北新幹線・白石蔵王駅からバスで小１時間、間に合うバス便が 9時半、10時半発である。バスは仙台からもあるとは書いたが、 8時半発１本だけというのも添えるべきであったらしい。（工藤は奥羽山脈を車で越えてもらった。なお最短距離の蔵王エコーラインは車の１台が登るのに不安がある由で通れなかった。）

［会場］　人気が高いところで、よく確保できたものとある方に感心された。（工藤注：会場の選定、設営は橋本氏。私事にわたるが、わが研究室の研修会のために問い合わせると、この前後かなりの期間、満室続きの由であった。）

［テーマ］　「初心者から第一線の研究者、技術者、また研究管理職、予算執行者、の方々すべてに役立つ、最新の動向の高度でかつ簡潔明快な解説」とした。管理職云々の宣伝には第３回セミナー報告書（今井賢、佐藤明子、CICSJ Bull.,1990, 8(5), 10)を利用させていただいた。

［講師］田中講師の御経験、御見識には日頃から感服していたので、まとめて公にしていただきたいと思っていた。田中講師は例年この時期は、ハワイから南極方面にかけて休暇を過ごされておられるようであるが、今年は日程を変えてつきあってくださったらしい形跡がある。

梅山講師には、”東京にいたらこの会費では先生のお話しはうかがえない”から参加

なさるファンがおられる。今回は、第13回討論会［CICSJ Bull., 1990, 8(5), 1］での核酸のモデリングシステムの発展（ 29P02、四宮、梅山）関係のお話をお願いした。なお、今回は外国御出張のちょうど合間だったかもしれない。

国沢講師は大腸菌のDNA の塩基配列データベースの完全整備という大それた御事業をなさっており、これは広く知られてしかるべきものである。国沢講師は日本外国神没鬼没、冒頭に至急と大きく書き、以前いただいた封筒記載の理工学部だか生命研だかの番号に送ったファクシミリも行方不明、と御多忙な方であった。

蛋白質溶液のNMR による解析はぜひ加えたい話題であり、山崎講師は、白羽の矢を立てた落合周吉氏がアメリカに長期ご出張の由で代理として推薦された方である。

藤田講師に”例の難解な”虚遷移構造のお話をお願いした。難解、の根拠：（１）欧米の受け売りではない、（２）豊富な内容が耳慣れない用語でばんばん説明される。

吉田・常勤講師にはいままであまり出されなかった爪を隠さないことをお願いした。何年か前、浜名湖畔で、たしか「化学での統計、確率の使い方がわからない」とたしかにつぶやかれた、と思う。「わからない」は「まちがっている」の雅語である。外国での講演旅行よりもこちらを優先させていただけたのは感激である。

宗像講師には、はじめに人選あり、であり、何でもよい、と無責任なお願いをした。この方式ほどお願いしてしまえば楽で引き受ける側で苦労するものはない。宗像講師ならば何をお話しになっても本セミナーの参加者から会費を返すよう要求されることはない、という確信があった。この方も往来の激しい方で、御返事がすぐ欲しいときの伝言依頼は留守番電話に向かうのと同じ感じがした。

［参加者］　計56名、あの多事多忙の折り、ずいぶん多くの方々が集まってくださったものである。講師の皆様、集まりを心配して駆けつけただけなのに座長役の無料奉仕まで快く引き受けてくださった四居靖彦様、朝永惇様、藤田憲一様、どうもありがとうございました。参加者を求めていろいろあたってくださった方々、何人かを送り込んでくださった方々、どうもありがとうございました。北里大学、山形大学の大学院の学生の参加がみられたことも嬉しいことの一つであった。

［反省］（順不同）　（１）質疑応答の時間が短過ぎた（前回の教訓生かせず）。（２）参加者の自己紹介など全体的なことをしなかった。　（３）会場へのアクセス方法の案内が不十分。　（４）申込受理／参加可の返事をしなかった。（５）講演中コーヒーを配らなかった。なお、テキストを簡略化したのは改善だとひそかにうぬぼれているが、参加者間の評判は調べていない。

以上（文責、工藤）

年会報告

日本化学会第62秋季年会報告

日本化学会第62秋季年会は９月22日～25日の４日間、秋の気配漂う北海道大学で開催された。当部会と関係の深い〔化学情報・計算機化学〕セッションは23日午後約40人の参加を得て５題の講演が行われた。各講演の要旨と印象を報告する。

２Ａ１０９　半経験的分子軌道法を用いた静的および動的分極率の計算（Ｉ）原子分極率補正項のパラメトリゼーション（早大理工・昭和電工）NIKITA Arif Kamka 、時末康弘他２名

ＭＮＤＯ（ＭＯＰＡＣ）を用いて理論的に分極率を求める試みの第一ステップとして、演者らはＳＣＦで考慮されない原子内の電子励起をとりこむ為の原子補正項を求めた。同様の試みはDewar らによっても行われているが、彼らの求めたＨ、Ｃ、Ｎ、Ｏ、Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ、Ｉの他にＳｉ、Ｐ、Ｓを含め最新の実測データを基に再パラメトリゼーションを行った。また、動的分極率が$\omega=0$ の極限で静的分極率との同一性を満足するよう、演者らの開発したTime dependent HF 法を適用し、その有用性を確認した。

２Ａ１１１　ＬＡＮを用いたＮＭＲデータ管理およびオンライン処理システムの開発（三共分析代謝研・活性物質研・研究企画部）皆川勝弘・矢島美由紀他４名

①装置の効率的利用、②依頼測定におけるスループットの向上、③データ管理の強化、の３点を狙いとして標題のシステムを開発した。構成としては３台のＮＭＲ（いずれもコンピュータ付）と管理用ミニコン及び各研究室の端末機をイーサネットＬＡＮで接続している。新しいシステムによってユーザ（研究者）は装置の違いや、自ら測定したものか、測定を依頼したものか意識することなくデータ処理を行うことが出来る。いかにも企業特有のテーマであり、装置の効率的利用や権利性確保の面で頭を悩ませている企業には参考になろう。

２Ａ１１２　有機合成設計システムＣＡＳＩＮＯの開発(14)キラルシントン選定モジュールの実行検証例（化技研・富士通）内丸忠文、田辺和俊他３名

演者らはここ数年来有機合成設計システム開発に取り組んでおり今回の発表は光学活性な標的化合物に対するキラルシントン選定モジュールの実行例であった。方法としては①標的化合物から不斉原子を含む部分構造を作成し、②その部分構造を含む化合物を光学活性化合物ファイルの中から探すというもので、標的化合物としてセファロスポリン誘導体他３化合物の実行例が発表された。FACOM M780で実行した場合、部分構造の作成、光学活性化合物ファイル（現在のところ375 化合物）からの検索共数秒以内で処理することが出

来たという。光学活性を含む立体配置の扱いは、実用的な合成設計支援システムの開発には必須の課題であろう。

２Ａ１１３　デオキシミオグロビンの圧力変形（京大理・名大理）倭　剛久、妹尾康喜他1名

マッコウクジラから得られたデオキシミオグロビン(Mb)を対象とし、ECEPP を用いてエネルギーを極小化した構造を圧力０での構造とした。0-1000[atm] の加圧下で圧力変形、体積変化及び体積揺らぎを計算し、等温圧縮率(9.37 $\times 10^{-12}$[cm^2/dyn]) を求めた。ヘリックスでは構造変化が小さく(かたく）、ヘリックス間で大きい（やわらかい）ことも明らかにされた。

２Ａ１１４　ＡＬＳ法によるゴキブリ誘引摂食化合物の定量的構造活性相関（大正製薬総合研・北里大薬）川島　豊、山田由紀他６名

フェノール誘導体、アニリン誘導体29種のゴキブリ誘引摂食化合物に対するQSARを検討した。活性値の表現は低・中・高活性（各、16、8 、5 物質）の３段階とし、パラメータとしてはlog P 、Q(ベンゼン環上の電価）、Ｌ（ステリモル）等を用いた。この結果、２つの注目すべき式を得、この式から疏水性因子か立体的効果の関与が示唆された。(log P、置換基のステリモルパラメータに最適値あり）。企業として制約もあろうが、ここで得られた情報が研究者にどのような行動をとらせたのかに大方の興味があり、知りたいところであろう。

（第一製薬㈱研究開発情報部　四居　靖彦）

部会記事

情報化学部会 常任幹事会(第二回)議事録

日時: 1991年9月2日(金) 14:00–17:30
会場: 日本化学会5階会議室
出席者: [部会長] 藤原 譲、[副部会長] 町田 勝之輔、
[幹事] 藤枝修子、藤田眞作、松浦 育敏、四居 靖彦、
[事務局] 保倉 光邦

議題

各担当報告 各担当幹事より活動状況の説明があった。

1. 総務（藤枝）より情報化学討論会の中間報告。
2. 編集（四居）より報告。CICSJ Bulletin の次回特集として、理論化学計算に関するものを予定。著作権に関する規定の整備、書体の統一等。
3. 企画（松浦）より来年春の年会のミニフォーラムの企画。

部会長改選の件 役員の改選方法の確認の後、部会長の常任幹事会案を決定した。この案をもとに所定の手続きを進める。

年会の部会関連部門の活性化 年会の情報化学分野の研究発表の件数が少ないことに関して具体案を検討。先ず、年会発表の分類の細項目を現在の状況に合うよう再検討することにした。

平成4年度情報化学討論会の件 関西で開催することを第一案として町田副部会長に検討を依頼した。

(藤田 眞作記)

関 連 行 事

コンピュータと化学・最新のトピック講演会

主催　化学バイオつくば財団
共催　日本化学会情報化学部会

日　時　12月13日（金）13時30分～16時30分

場　所　日本化学会7階講堂（東京都千代田区神田駿河台1-5,
電話（03)3292-6161）
［交通］ＪＲ，地下鉄ともお茶の水駅下車徒歩5分。

プログラム

1．化学情報とミステリー（電通大）山崎　昶

2．Ｃ６０の化学とネームゲーム（豊橋技科大）大澤映二

3．分子の形（グラフ理論と折り紙）（お茶大理）細矢治夫

参加費　無料

参加締切　定員（120名）になり次第

連絡先　化学技術研究所　田辺和俊（電話（0298)54-4522）

ＣＣＳの紹介

ＳＡＶＶＹパターン認識による質量分析データベースの試作

日経情報システム株式会社
荒井　敏博

１．はじめに

近年、学習機能を基本とする情報処理システムの研究開発が盛んに行われており、特に生物の神経系の情報処理にその原理をおく「ニューロコンピュータ」の研究が注目されている。弊社でも、米国エクスカリバーテクノロジー社の技術協力により、いくつかのソフトウエアーを開発している。今回は、ＳＡＶＶＹ／ＴＲＳと呼んでいる高速の文字列照合、検索のパターン認識ライブラリーを使用して質量分析データベースを作成した例を紹介する。

２．ＳＡＶＶＹ／ＴＲＳ（Ｔｅｘｔ　Ｒｅｔｉｅｖａｌ　Ｓｙｓｔｅｍ）

ＳＡＶＶＹ／ＴＲＳは、学習型の文字列検索用のパターン認識エンジンである。特に日本語、英語等の構文、文法に依存しないので汎用の文字列照合ライブラリーとして様々な用途に応用することができる。ＴＲＳの機能を以下に図示する。

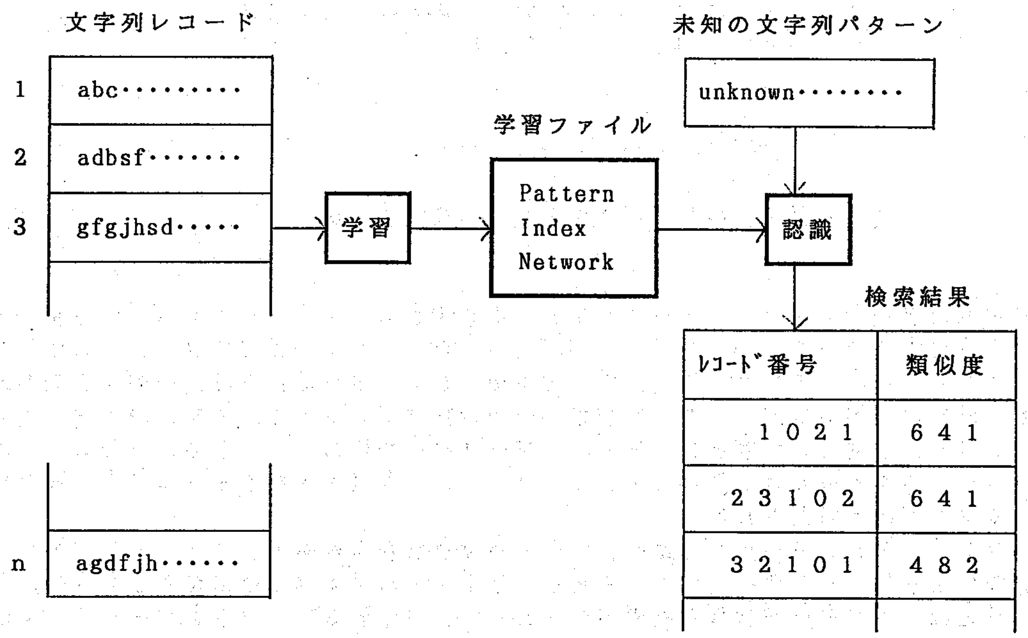


図１．ＴＲＳの機能　　○パターン照合のデータベースは自動的に作成される。
○検索結果は、レコード番号と類似度の配列にて返される。

通常ＴＲＳは、研究論文、特許文献、新聞記事等のデータベースに応用されている。ＴＲＳは、学習型のシステムであるため検索の高速化を行うために、文字データの中からキーワード等を拾い出す必要がない。検索のためのデータ構造は、ＴＲＳが学習ファイルとして自動的に作り出す。勿論、漢字等の日本語、英語データなどの文章等、また、化学式、ＤＮＡ配列情報等の自然言語でない文字列情報の検索にも有効に活用できる。

３．質量分析スペクトルの検索方法

多くのパターン認識問題は、文字列照合問題として解くことが可能である。今回は、質量分析スペクトルデータを文字列に変換することによりＴＲＳにて検索を行った。文字列への変換の手法は非常に単純なもので、各質量数にユニークな文字列を割り当て、スペクトルの現れる位置の文字列により全体の文字列が構成されている。つまり、ピークの現れる位置をパターン化して検索している。また、合わせて、化学式の文字列コードによる検索もインプリメントした。質量スペクトルデータの文字列への変換方法を以下に図示する。

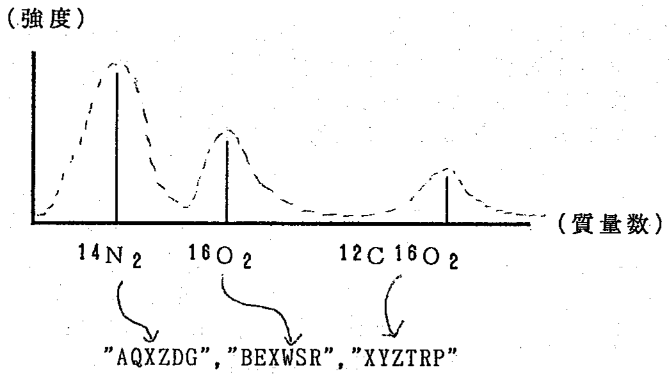


図２．質量スペクトルを文字列に変換する方法

それぞれの質量数の領域に、ランダム化した文字列を対応するラベルとして関連付けておく。よって上図の場合、"AQXZDG","BEXWSR","XYZTRP"の文字列にてＴＲＳに対して学習、検索することになる。ランダム化した文字列を使用しているため、偶然同一の文字列が割り当てられる場合があるが、パターン検索後の後処理で対応できる。通常、パターン検索を実行すると、候補として残るレコードは、データベース中のレコードの数百分の一となり、後処理にかかる計算量は非常に小さい。ベースピーク（スペクトル強度最大）等を考慮した文字列変換も考えられる。

ＳＡＶＶＹ／ＴＲＳを使用した場合、もう一つ重要な利点がある。ＳＡＶＶＹ／ＴＲＳは連想記憶モデルとして開発されているため、検索のためにすべての情報を与える必要がない。例えば、１箇所の質量数を検索のキーとして、対応するレコードをデータベースか

ら高速検索することも可能である。この機能は、データベースの検索機能に柔軟性を与えることに役立つ。例えば、関連する質量数を持つレコード（人間の知識により）を検索することも可能となる。今回は、単純な検索のみインプリメントしたが、ＳＡＶＶＹ／ＴＲＳにより下記事項の高速検索が可能となる。

1．レコードの名前による検索（従来からの検索）
2．レコードの文字列属性による検索
3．未知スペクトルデータからの検索
4．質量スペクトルのセットによる検索（不完全なセットでもよい）

4．システムの構成と結果

使用した環境と結果は、以下の通りである。

ＣＰＵ：	ＤＥＣ社　ＶＡＸステーション３１００
ＯＳ：	ＶＭＳ
開発言語：	Ｃ
データ数：	約５万件
検索速度：	スペクトルによる検索の場合＞数秒（１０秒以内）
	化学式による検索の場合　＞数秒（１０秒以内）

5．まとめ

ＳＡＶＶＹ／ＴＲＳパターン認識ライブラリーを使用して、質量分析データの検索システムを試作した。ＳＡＶＶＹ／ＴＲＳは、文字列の照合問題として表現できるデータベースの大規模検索問題に有効であることが分かった。

6．価格、連絡先等

ソフトウエアー	：	ＳＡＶＶＹ／ＴＲＳ
稼働マシン	：	ＤＥＣ／ＶＭＳ
		ＤＥＣ／ＵＬＴＲＩＸ（ＭＩＰＳアーキテクチャー）
		ＳＵＮ／ＵＮＩＸ（ＳＰＡＲＣアーキテクチャー）
		ＳＯＮＹ／ＮＥＷＳ
価格	：	５００万円（１ＣＰＵへの使用権のライセンス）
連絡先	：	日経情報システム株式会社　営業企画室
		Ｔｅｌ　０３－３４５６－８７２０

計算化学統合パッケージ"ＭＯＴＥＣＣ"

日本アイ・ビー・エム株式会社
ＭＯＴＥＣＣ　Ｃｌｕｂ事務局
栗田　康男

１．概要

ＩＢＭの研究部門では量子化学の重要性を早くから認識しサンノゼ研究所（現アルマデン研究所）やキングストン研究所で幅広い研究活動を続けてきました。

キングストン研究所の計算化学の長でありＩＢＭフェローでもあるエンリコ・クレメンティ博士は１９８９年、ＩＢＭ研究部門で開発してきたプログラム群を集大成した計算化学統合パッケージ"ＭＯＴＥＣＣ"を発表しました。ＭＯＴＥＣＣは原子のレベルから流体力学までをカバーしようとする野心的な試みです。

このパッケージの中には日本国内の計算化学者の間でも非常に評価の高いＨＯＮＤＯ－８及びＤＮＡや蛋白質等の巨大分子の解析を目的としたＫＧＮＭＯＬ，分子構造をカラー・グラフィック端末上に３次元表示するＫＧＮＧＲＡＦなどが組みこまれています。

ＭＯＴＥＣＣパッケージは'９０，'９１へとドイツ、スウェーデンの大学、ＩＢＭチューリッヒ研究所、アルマデン研究所、北海道大学等の協力を得て大きく発展しました。

ＭＯＴＥＣＣ－９０ではＡＬＣＨＥＭＹ－ＩＩ，ＭＯＬＣＡＳ，ＳＩＲＩＵＳ等の分子のプログラムが 強化され、さらに固体電子バンド・プログラムや密度関数法のプログラムが加わりました。

ＭＯＴＥＣＣ－９１ではＤｅｗａｒ博士の半経験的分子軌道プログラムＡＭＰＡＣがＫＧＮＭＯＬとインターフェイスがとれるように改良され導入されより使い易くなっています。また相対論的なプログラムＲＥＭＯＬ，ＲＥＡＴＯＭにクレメンテイ博士の努力により大きな発展がありました。

クレメンテイ博士はこのパッケージを用いて研究しようとする人達のために"ＭＯＴＥＣＣ　ＣＬＵＢ"と言う組織をつくりました。

これによって彼は"グローバル・シミュレーション"と言う科学研究の新しい潮流をコンピュータ・サイエンスの分野で引き起こそうとしています。

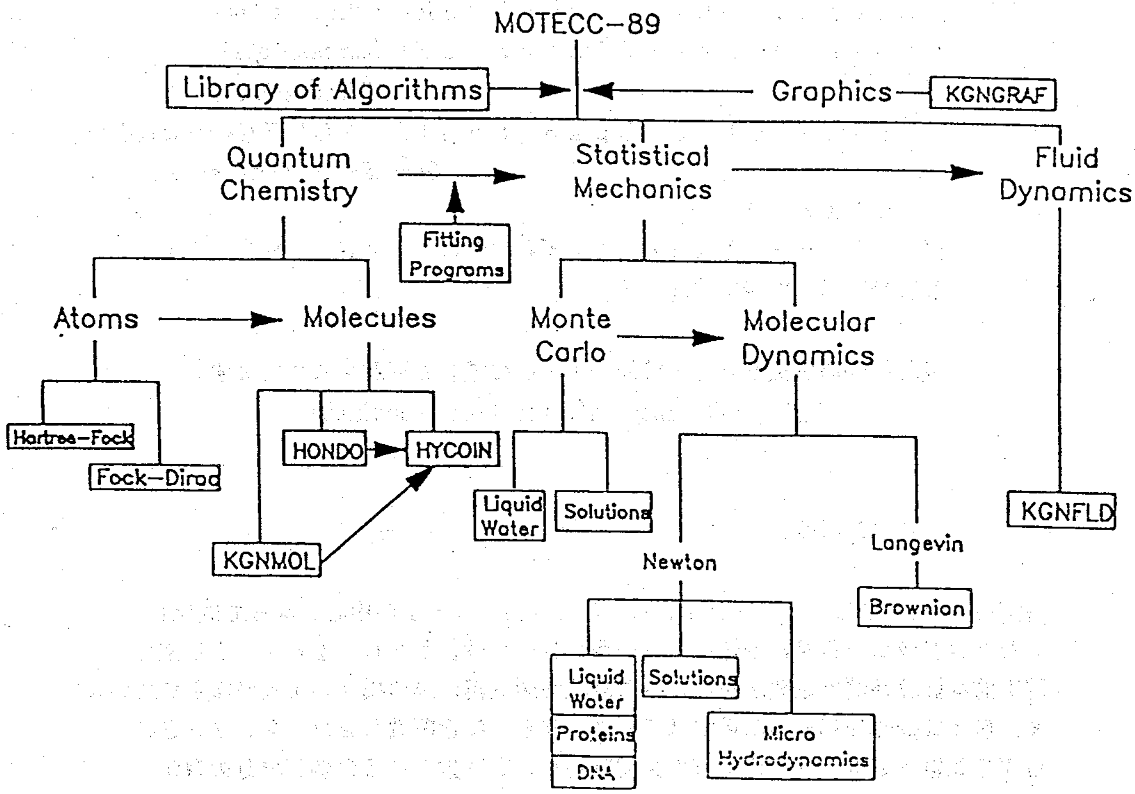
それ故"ＭＯＴＥＣＣ　ＣＬＵＢ"は単なるプログラムの交換の場ではなく幅広い研究情報の交換と共同研究の場を提供しようとしています。

2. MOTECCプログラム

MOTECCの構成プログラムは次の図に示すように

KGNMOL
HONDO−8
HYCOIN
KGNFIT
MICROHYDRO
KGNFLD
KGNGRAF等

からなり原子のレベルからマクロの流体までの幅広い領域をカバーしようとしています。



"MOTECC−89"パッケージの構成図
(グローバル・シミュレーションの流れ図)

ＨＯＮＤＯ－８

ＨＯＮＤＯ－８はキングストン研究所のＤｒ．Ｍ．Ｄｕｐｕｉｓらが開発したプログラムでＧＡＵＳＳＩＡＮが摂動法をベースとしたプログラムに対しＣＩ法を基本としＭＣＳＣＦ法（多配置ＳＣＦ法）で分子の形状を決めるプログラムです。

ＧＡＵＳＳＩＡＮが分子の形状を決めるのが得意なのに対し、ＨＯＮＤ－８は開殻構造のＳｐｉｎの多重度のある系に対しＳｐｉｎ固有関数を正確に決めるのが得意なプログラムです。

ＧＶＢ法 (Generalized Valence Bond:原子価結合法)
ＭＣＳＣＦ法 (MULT-Configurational Self-consistent field:多配置ＳＣＦ法)
ＣＩ法 (Configuration Interaction:配置間相互作用法)

単純なＳＣＦ法 (Self-consistent Field) では
Ｃｌｏｓｅｄ　Ｓｈｅｌｌ　ＲＨＦ(Restricted Hartree-Fock)
Ｓｐｉｎ　ｕｎｒｅｓｔｒｉｃｔｅｄ　ＵＨＦ(unrestricted Hartree-Fock)
Ｒｅｓｔｒｉｃｔｅｄ　Ｏｐｅｎ　Ｓｈｅｌｌ　ＲＯＨＦ(Restricted Open Shell Hartree-Fock)
がつかえます。

Ｍｏｌｌｅｒ－Ｐｌｅｓｓｅｔの摂動法がＣｌｏｓｅｄ　Ｓｈｅｌｌ　ＲＨＦに対して適用可能です。

遷移状態の構造をきめる機能やＩＲＣの機能も用意されています。
ＩＲＣ：Intrinsic Reaction Coordinate

ＫＧＮＭＯＬ

ＫＧＮＭＯＬはＤｒ．Ｅｎｒｉｃｏ　Ｃｌｅｍｅｎｔｉが中心となって開発してきたプログラムでＤＮＡや蛋白質等の巨大分子の解析がＡｂ　ｉｎｉｔｉｏ法で現実的な計算時間で処理出来るように計算時間短縮の為の種々の工夫がなされています。例えばgramicidinの解析では原子数２７６，軌道関数８２０（２，７３６のＧＴＯ関数で表現，ＧＴＯ：ガウス型軌道），電子数１０５０個，積分の数が４．３３億個でＬＣＡＰ／３で計算して７１２分でした。

HYCOIN

HYCOINは2電子N－中心の分子系に対しHCI(Hyllerraas-CI)法を用い時間依存のないシュレーディンガー方程式を高い精度で解くプログラムです。

このプログラムはIBM　ResearchのHYCOINプロジェクトで作られました 。

KGNFIT

KGNFITはKGNMOLやHONDO－8等の分子軌道法のプログラムの結果から分子動力学に必要なパラメーターを算出するプログラムです。

MYCROHYDRO

MYCROHYDROは分子動力学の手法を用い分子軌道法で計算した物質の微視的な世界での流動現象をシミュレーションします。

KGNFLD

KGNFLDはNavier－Stokesの方程式をより微視的な観点からとらえようとするプログラムです。保存則を満足しやすいコントロール・ボリューム法で定式化しています。

KGNGRAF

KGNGRAFは会話モードでMOTECCユーザーの入出力を支援します。

IBM5080／6090ワークステーション上でマウス，ファンクション・キーボード，ダイアルを用いて作動させるように設計されています。

MOTECCで実施する量子力学，統計力学，流体力学等の図示化をサポートします。分子の2次元及び3次元のコンター図，ベクトル場の表示が可能です。

その他、ファンデアワールス面，正規モードの分子振動，電子密度図，分子軌道，ペプチド・リボン・モデル，分子動力学のアニメーションも取り扱えます。

入力形式としては基礎形状ファイル，HONDO及びKGNMOLの入出力ファイル，Brookhaven Data Bankファイル，Z－マトリックス・ファイル，MOPAC出力ファイル，MAD入力ファイル等が取扱い可能で非常に融通性に富んでいます。

3．MOTECC－91の会員の取扱いについて

MOTECC－90までの会員はクレメンティ博士との共同研究者として

全てのモジュールが利用可能でしたが'９１ではパッケージが膨大となりましたので会員を以下の４つのグループに分けました。

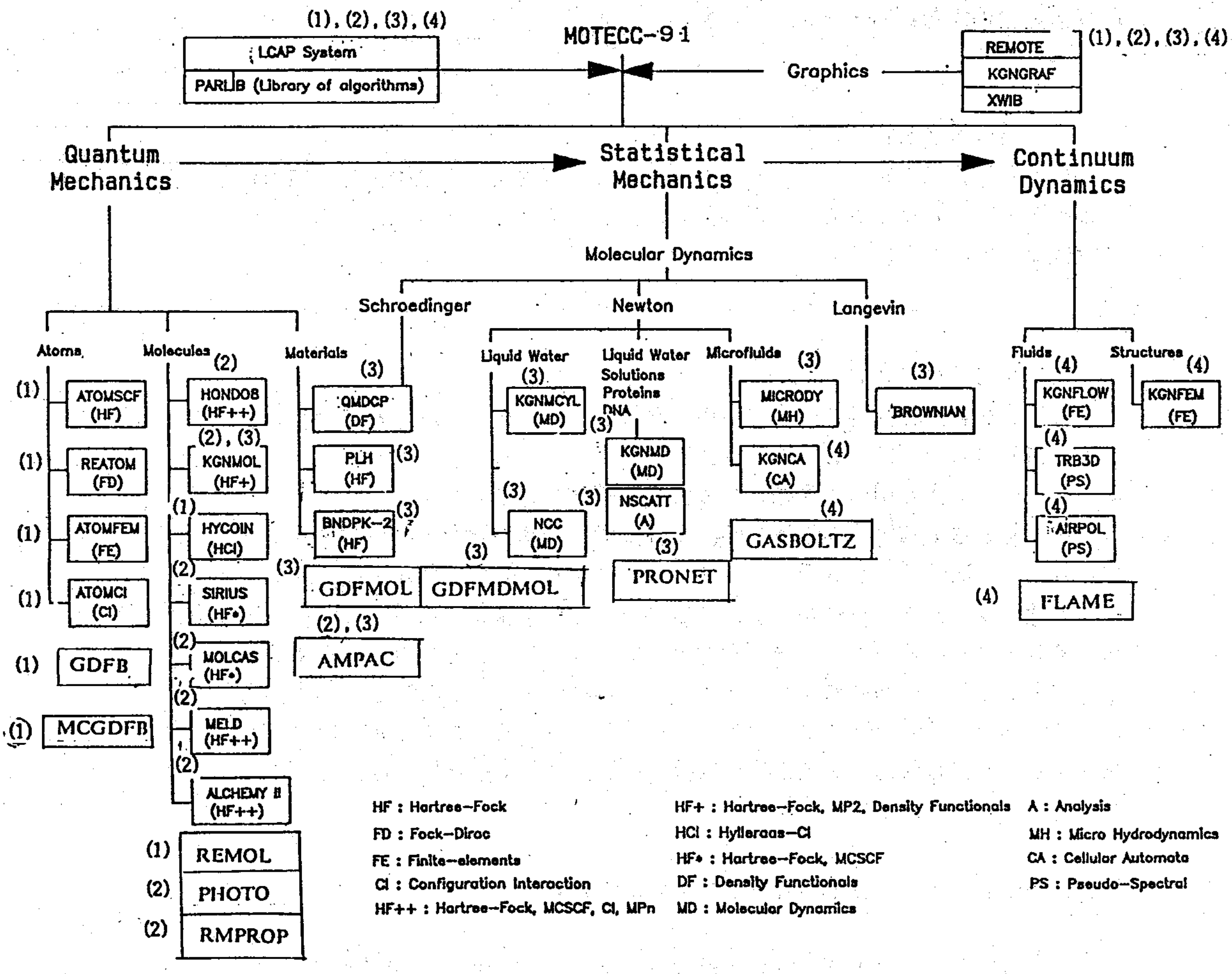
（１）原子のプログラムを利用するグループ

（２）分子のプログラムを利用するグループ

（３）分子動力学や固体バンド理論のプログラム等を利用するグループ

（４）流体力学のプログラム等を利用するグループ

付記：ＭＯＴＥＣＣパッケージについてご関心の方はＭＯＴＥＣＣ　Ｃｌｕｂ
事務局　栗田(03-3808-4665)までお問い合わせ下さい。



化学情報管理・検索システム（ＩＳＩＳ）について

富士通株式会社

１．はじめに

ＩＳＩＳ（Integrated Scientific Information System）は、米国ＭＤＬ(Molecular Design Limited)が開発し、当社が日本語機能について開発に協力して完成した、エンドユーザ志向の本格的な化学情報の管理・検索システムです。ＩＳＩＳは第一線の研究者が自らのＯＡツールとして使って、作業効率を高めるために使え、かつ作成された個人ベースの情報を研究者間で情報共用し、更には特許対策等の企業レベルの戦略的利用まで可能にすることをねらいとして作られています。研究者が自ら使えるように、パソコンの操作性で、パソコン単体でも利用可能であり、パソコンとホスト連携をシステムで自動的に行うので、利用者がデータの保管場所にわずらわされることなく、情報蓄積・検索を行うことができます。このため、情報の共有化が容易です。また、戦略的利用が可能なように、複数のデータベースから必要な情報を望む形で簡単に得られるようになっています。

2.　システムの特徴

ＩＳＩＳは、著しい発展を遂げている最新のハードウェアとソフトウェアを採用しており、マンマシンインターフェースに優れたシステムとなっております。特に今回のシステムは、今まで難しかった化学構造式と日本語を、同時に取り扱うことが可能となっています。下記にその主な特徴を紹介します。

(1)パソコンスタンドアロンシステム（ISIS/Desktop）

日本語 MS-Windows V3.0をベースとしており、快適なユーザインタフェースと、この環境で動作する流通ソフトとの連携を容易に図ることが可能です。スタンドアロンシステムは以下の特徴を持っています。

①ローカルデータベース機能（ISIS/Base）
②分子構造や反応についての作画機能（ISIS/Draw）
③部分構造検索、反応情報検索、文字検索（日本語、英語、数字）等の検索機能
④パソコンのプリンターへの帳票出力機能
⑤マルチプラットフォームへの対応(FMR版、Macintosh 版、他)

(2)ホストコンピュータを使った統合化学情報システム（ISIS/Host 及びISIS/Desktop）

研究者が、ホストコンピュータに格納された大量の情報から、必要な情報を高速に検索するためのシステムで、同時に数多くの研究者がアクセス可能なシステムです。エンドユーザのオペレーションは、パソコンのスタンドアロンシステムと同一であり、違和感が全くありません。スタンドアロンシステムに加え、以下の特徴を持っています。

①分子情報データベース(MACCSⅡ),反応情報データベース(REACCS)を標準サポート
②リレーショナルデータベース(RDBⅡ）を標準サポート
③国際標準ネットワークインタフェース(TCP/IP)を採用

(3)使いやすい日本語環境

日本語のオンラインヘルプ機能や日本語禁則処理機能により、より分かり易く、より快

適な日本語処理環境を提供しています。

3．ＩＳＩＳの主な機能

(1)分子・化学反応式作画機能、スケッチ機能

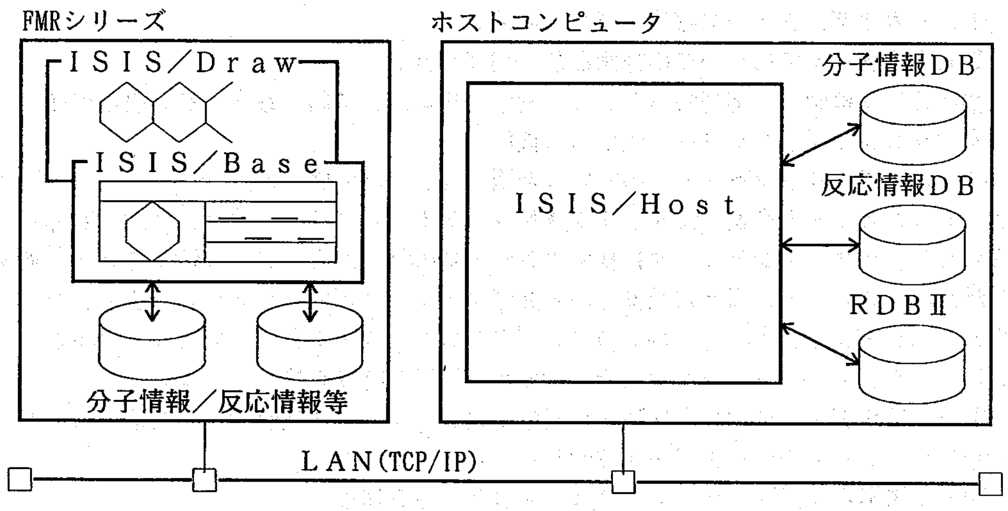
ISIS/Draw は、”化学を知っている作画プログラム”です。化学構造式や反応式を簡単にそして化学的に正確に書くことができます。２重結合の位置や官能基の結合の方向など、基本的なルールは全てISIS/Draw が知っています。また、頻繁に使用される構造や記号も豊富に準備されており、簡単な化合物や化学反応式なら、それらの組み合わせだけで作画することが可能です。もちろん、ISIS/Draw のもつ豊富な表現機能を利用すれば、より複雑な、そしてより高度な表現も、簡単にかつ正確に行うことができます。

また、ISIS/Draw には一般的な作画(線、矩形、円、多角形、面塗り等)機能も装備されており、研究論文や研究発表などに使用するプレゼンテーション資料の作成ツールとしても利用することができます。

(2)データベース機能

ISISは、ホストコンピュータとパソコン上で動作する分散処理型のシステムです。ホストコンピュータとパソコンは、LAN(TCP/IP)で接続します。ホストコンピュータ上では、ISIS/Host が動作します。ISIS/Host は、パソコン上のISIS/Base からの依頼により、ホストコンピュータ上のデータベース（リモートデータベース）に対して、データを登録・検索する機能を持っています。

パソコン上で動作するISIS/Base は、ホストコンピュータ上のISIS/Host を通してリモートDBにアクセスすることができるだけでなく、パソコン上のデータベース（ローカルデータベース）に対して、データを登録・検索することも可能です。ISIS/Base で構造検索をする場合の検索式は、ISIS/Draw を使って簡単に作成することができます。



〔リモートデータベースの種類〕

ISISを使ってアクセスできるホストコンピュータ上のデータベースは、分子情報DB、

反応情報DB、リレーショナルDB(RDBⅡ) の3種類です。

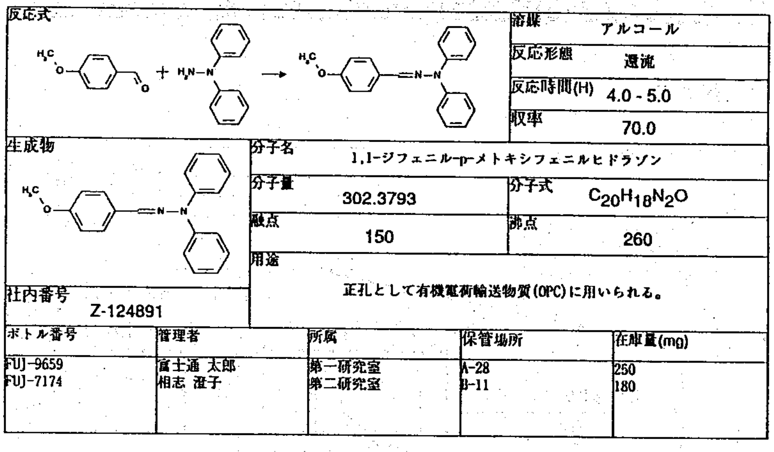
分子情報DB： MACCS でⅡで扱っているデータベースで、化合物の構造情報とそれに関する情報（物性、活性等）を格納することが出来ます。

反応情報DB： REACCSで扱っているデータベースで、化学反応式と反応条件（触媒、溶媒、収率等）、文献情報等を格納することが出来ます。

RDB Ⅱ ： 実験から得られた数値データや文字データ、あるいは文章データなど、さまざまなデータを格納できるリレーショナル型のデータベースです。日本語も標準にサポートしています。

(3)リモートデータベース間の連携機能

ISISでは、各種のリモートデータベース間のデータを連携させて検索することができます。たとえば、ある反応の検索（反応情報DBの検索）を行い、同時に、他のデータベース(分子情報DB, RDB II) に格納されているさまざまな関連情報も検索・表示するというようなことが簡単に行えます。この場合でも、利用者はそれぞれの情報がどこに格納されているかや、どんな形式の情報(文字、数値、文章等) であるかというようなことは意識する必要はありません。次の例は、ISISがサポートしている3種類のデータベースに分散して格納されている情報を一つの画面に出力したものです。



つまり、ISISでは複数種類のリモートデータベース上に分散している複数の情報を組み合わせて、一つの情報とすることができるのです。もちろん、複数の反応情報DB同士を組み合わせるというような、同種類のDB同士の結合も可能です。

(4)パソコン上の流通アプリケーションとの連携

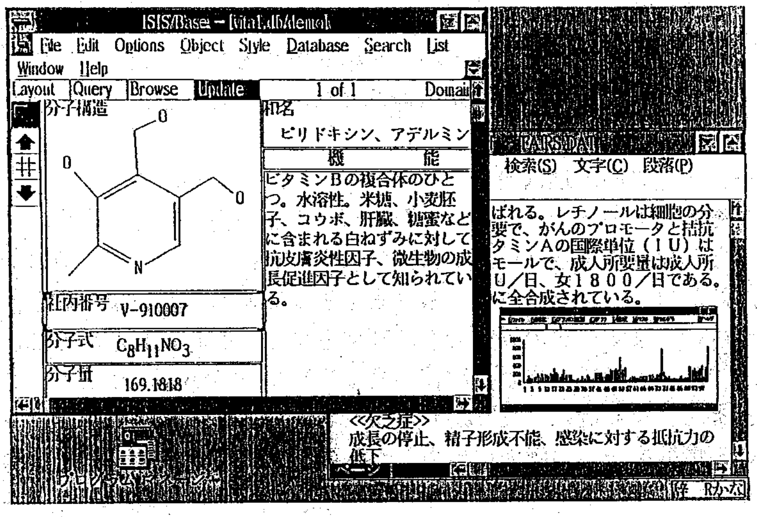
ISIS/Draw とISIS/Base は、日本語MS-Windows V3.0 で動作するアプリケーションですので、日本語MS-Windows V3.0 の特徴を生かした次のような利用が可能です。

① ISIS/Draw とISIS/Base と同時に他のアプリケーション（ワープロ、表計算ソフト等）を動作させることができます。つまり、ISISでデータベース検索や分子構造の作画を行いながら、同時に報告書作成や実験データの整理を行うこともできます。

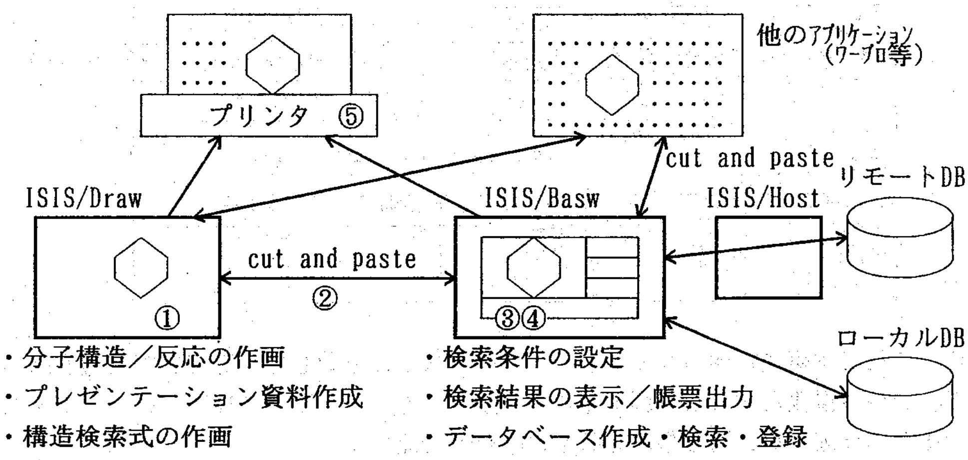
② 日本語MS-Windowsのクリップボード機能を使って、ISIS/Draw やISIS/Base と他の

アプリケーションとの間でデータの受渡しが簡単に行えます。例えば、ワープロを使って作成中の文書の中にISIS/Base で検索した情報を取り入れたりもできます。

③ ISIS/Base での検索結果のファイル出力機能を利用して、データベースから検索した一連の数値データをExcel のグラフ機能を使って、その場でグラフ化するというようなことも簡単に行えます。



4．ＩＳＩＳの利用形態



①ISIS/Base で構造検索するための検索式を作画します。
②ISIS/Draw で作画した検索式をISIS/Base に取り込みます。
③検索条件を設定し、リモートDBあるいはローカルDBを検索します。
④検索結果を参照します。
⑤検索結果をプリンタに出力します。

5．連絡先 ㈱富士通京葉ｼｽﾃﾑｴﾝｼﾞﾆｱﾘﾝｸﾞ 研究開発支援ｼｽﾃﾑ部 化学研究ｼｽﾃﾑ課
〒260 千葉市新宿2-3-8 松栄ビル ☎0472-45-0048（直通）

海 外 動 向

MEETINGS

7-9 October 1991.
Second Symposioum on High Performance Computing.
Monpellier, France.
Contact: CNUSC, SHPC Secretariat, 950, rue de Saint Priest, BP 7229, 34184 Monpellier Cedex 4, FRANCE (33-67-14-14-14; FAX: 33-67-52-37-63; e-mail: SHPC@FRMOP11.Bitnet).

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).

9-13 February 1992.
Biophysical Society Meeting (Joint Meeting with ASBMB).
Houston, TX.
Contact: Emily Gray, Biophysical Society Room 3209, 9650 Rockville Pike, Bethesda, MD 20814 (301-530-7010; FAX: 301-530-7133).

5-10 April 1992.
San Francisco, CA.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

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.

23-28 August 1992.
204th ACS National Meeting.
Washington, DC.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

4-10 October 1992.
ELMAU 4: Computational Methods in Chemical Design.
Schloß Elmau, GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a. d. Ruhr, GERMANY (49-208-30-64-88; FAX: 49-208-30-46-07).

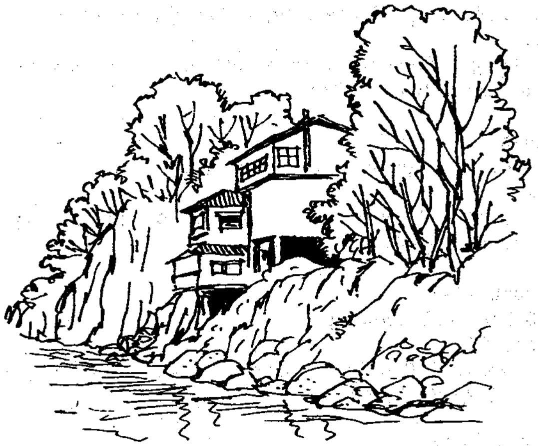
16-20 November 1992.
SUPERCOMPUTING 1992.

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

COMPUTERS & CHEMISTRY

1991年第15巻3号 論文題目、著者、頁

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

1991年第31巻第3号（8月）　論文題目、著者、頁

Journal of
Computational Chemistry

VOLUME 12 / NUMBER 5 / JUNE 1991

Journal of
Computational Chemistry

VOLUME 12 / NUMBER 6 / JULY/AUG 1991

Vol. 245, Nos 3/4, 1991

Vol. 247, Nos 1/2, 1991

Special Issue: Applications of Spectroscopy in Physics and Chemistry — A Collection of Invited Papers in Memorial Tribute to Professor George R. Wilkinson

J O U R N A L O F M O L E C U L A R G R A P H I C S

1991年第9巻第2号（6月）論文題目、著者、頁

TETRAHEDRON COMPUTER METHODOLOGY

1990年第3巻第2号 論文題目、著者、頁

Contents of Disks 3 to 6

Disk 3: CONTENTS.ASC contents and descriptions of all files on disks 3-6; EDITOR.ASC, editorial; *.asc, ASCII files of papers in this issue; CHEMTEXT.ARC, ChemText document files for Nathan and Wipke papers compressed in archive.

Disk 4: *.ARC, compressed source and executable files for Bienfait's ESR program; INSTALL.BAT, file to install and unpack the ESR program and manuals.

Disk 5: RXCITE subdirectory: data files for Wipke and Vladutz paper, see READ.ME for detailed description. ALTONA subdirectory; source code and executable program for Nathan NMR paper.

Disk 6: Macintosh® format contains CONTENTS.ASC, the complete contents of all disks in this issue; *.MSW, Microsoft Word document files for papers in this issue; *.ASC, the ASCII version of all papers; LORENTZ.C, source code for one of Bienfait's programs for ESR

HMO 1.1 folder: Wissner HMO program for Macintosh
HMO data folder: Data for HMO 1.1 program
QS-Edit 1.0 folder: Wissner query program for CAS and Beilstein
Structure folder: Templates used by QS-Edit 1.0

編　集　後　記

大正時代の建築と思われる尖った屋根のかつての校舎を知っている者にとっては若干趣の薄れた感のある北大構内ですが、それでもそびえたつ樹々の梢から吹き落とされる落葉に、ひと足早い秋を感じる事ができました。〔化学情報・計算機化学〕のセッションは、応募６題中１題が中止となり実際の発表は５題にとどまりました。集まった聴衆は約40人、あまり活発な議論もなく、残念ながら今ひとつ盛り上がりに欠ける印象は拭えませんでした。このところ春・秋共〔化学情報・計算機化学〕への応募が少なく、つい先日の部会常任幹事会でも、その活性化についての議論がありましたが、より広い範囲での議論の展開が必要と思います。本誌にもそのような観点からの投稿をお待ちしています。一方、この様な状況にもかかわらずこのセッションを選んで応募された５組の方々には敬意を表します。

最後に僅か１時間足らずの間にもかかわらず１題終わるごとの参加者の出入りが大変気になりました。たしかに例えば物性研究とＬＡやＱＳＡＲは直接的な関係は少ないかもしれませんが、「情報化学」という観点からお互いに耳を傾けあうゆとりと会場の雰囲気をこわさないマナーを求めるのは少々虫がよすぎるというものでしょうか。

このところ「特集」をお届けすることが出来ず新任編集責任者としては大変申し訳なく感じております。いくつか企画を練っているものもあり、近いうちにお届け出来るかと思います。御了承下さい。

（四居）

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 9, Number 6
November 1991

目　　次

情報化学部会講習会　No.2

第３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　日本分析化学会　　ほか
日時　１９９２年２月１０日（月）１０時～１６時４５分。
懇親会　下記会場から歩いて４分の職員食堂にて、１７時～１８時３０分
会場　大阪大学付属図書館 吹田分館、視聴覚ホール
（565 大阪府吹田市山田丘2-1 TEL:06-877-5111 内線4088）
参加申込締切　１月２０日。懇親会不参加の場合は、当日参加も可能です。但し、会場の都合で、満席になる場合はお断りすることがありますので、前日にでもお問い合わせ頂く方が、よろしいかと思います。

ケモメトリックスは、数理科学、統計学、情報科学、計算機科学等を統合的に組み合わせて活用する新しい化学の領域です。専門分野の方だけでなく、今回初めてこの分野に興味をもたれた研究者の方も歓迎致しますので、奮ってご参加下さい。

講演題目

１．ケモメトリックスの分光光度計への応用　（大塚電子）大嶋浩正

２．Distance Geometry 法によるキモトリプシン阻害剤の構造活性相関
（豊橋技科大）○長谷川　清・宮下芳勝・佐々木慎一

３．一般化加法モデルの考え方と適用事例：ＡＣＥプログラムの提示
（塩野義製薬）○田崎武信・財前政美・後藤昌司　（広島大・原医研）大瀧　慈

４．ニューラルネットワークの化学に対する適用時の特徴及び留意　（富士通）湯田浩太郎

５．食品機器分析データパターン認識～ニューラルネットワークと多変量解析
（キッコーマン）○相島鐵郎　（富士通）湯田浩太郎

６．ソフトウェア・デモンストレーション（ケモメトリックスに関連するソフトウェアを、実際に実演して頂きます）

７．（特別講演）Recent Development of Computer Chemistry in China (Beijing Institute of Chemical Technology)Guanqui Zhao

８．（特別講演）Simultaneous Multicomponent Analysis and Structure-Activity Relationship Study Using Chemometric Methods (Institute of Chemical Metallurgy, Chinese Academy of Science) Leming Shi

講演題目等に関しましては、当日、若干の変更が行われる場合があります。あらかじめご了承願います。

参加費　無料　／　**懇親会費**　3000円、当日徴収いたします。

参加申込方法
ハガキ、ＦＡＸ、電子メール、何れかで、「第３回ケモメトリックス・ワークショップ参加申込」と明記、
①氏名、　②所属、　③連絡先（住所、郵便番号、電話番号の他、できれば ＦＡＸ番号、電子メールアドレス等）、　④懇親会参加、不参加、
を明記の上、下記宛（必ず個人名明記）へお申込下さい。なお、ＦＡＸ、電子メールでお申込の方には、同一手段で確認の返信をさせて頂きます。10日以内に返信なき場合は御連絡下さい。

連絡先　565　大阪府吹田市山田丘1-6　大阪大学薬学部　薬品分析化学教室　高木達也
電話 (06)877-5111内線6134、　夜間 (06)877-5027-6133（夜間はプッシュ信号が必要。プッシュホンか、または、ダイアル式でもプッシュホンの様な音さえでればつながります。06-877-5027 までかけると呼出音がなりますので、続いてプッシュ信号が鳴るようにして、6133 にかけて下さい）。
FAX:(06)877-4489　　N1MAIL:A62245@OSAKA　　Nifty:GEH00173
JUNET:a62245a@ccsun01.center.osaka-u.ac.jp　　SIMAIL:A62245/CC/OSAKA-U

情報化学部会ワークショップ　No.6

第４回　化学命名法ワークショップ

しばらく中断しておりましたが前回（第３回ワークショップ 1990.4.27)に引続き下記の要領で開催します。このワークショップは化学物質の命名ならびに構造処理に関する幅広い話題を話合う集りです。専門家と一般のケミストが交流する場として、幅広い分野の方々の参加をおまちします。

日時：　平成４年２月７日（金）　１０．３０－１５．００
場所：　日本化学会５階５０１－Ｂ室
話題提供：

① 化学名の現状
　（中外製薬　松浦育敏）
　試薬カタログ、化学辞書などに記載の化学名と統一命名法とのギャップ
② データベース作製における化学名処理
　（日本科学技術情報センター）
　（化学情報協会）
　実際の作業における具体的な問題点、解決策、今後の方向など
③ その他の話題
　（参加者から）

申込方法：参加費無料。
参加希望者は資料準備の都合上、官製葉書に、氏名、所属を明記の上、２月３日までに下記あてにお申込み下さい。

申込先
〒１０１　東京都千代田区神田駿河台１－５
日本化学会　情報化学部会　　化学命名法ワークショップ係
TEL　０３（３２９２）６１６３

世話人

化学情報協会	佐藤明子
豊橋技術科学大学	阿部英次
中外製薬	松浦育敏
日本科学技術情報センター	荒木啓介

1992年 情報学シンポジウム 開催案内

－ゲノムと情報科学－

1992年1月8日(水)～9日(木) 9:30～17:00
日本学術会議講堂
〒106 東京都港区六本木 7-22-34 (地下鉄千代田線乃木坂駅)

目的：科学における情報の円滑な流通と高度利用を促進するため、データ・知識に関する基本的問題とその整備・利用に関する討議を行ない、研究交流をはかる。
本シンポジウムは1984年以来毎年開催されている。

≪共同主催≫ (予定を含む)

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
情報知識学会・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・日本生物物理学会

≪後援≫ (予定を含む)

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・(財) 新世代コンピュータ技術開発機構

参加申し込み：氏名、連絡先、職名、資料必要の有無を葉書に記入し12月20日までに下記に申し込む(当日受付もあるが資料の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
宛先　　　　：情報処理学会　シンポジウム担当　木村保明
〒106　東京都港区麻布台2-4-2　保科ビル3F　Tel.　03-3505-0505

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、知識に関する基本問題を論じる場として、日本学術会議および、情報処理学会を中心として、１９８４年以来毎年開催されてきました。
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ます。
１９９２年も1月８日、９日の両日に当シンポジウムを開催致します。
今回は、特に「ゲノムと情報科学」を統一テーマとして、特別講演、招待講演および一般講演、計２０件の講演が行なわれます。

「１９９２情報学シンポジウム」プログラム

8日

9:20- 9:30	組織委員長挨拶　　尾関雅則 （日本学術会議情報学研究連絡委員会委員長）
セッション１	ゲノム研究の展望
9:30-10:30	（特別講演）ヒトゲノム解析計画と情報科学 松原謙一（大阪大学） ー休憩ー
10:40-11:05	ゲノム情報のデータベース化の現状と問題点 久原　哲、古川哲也、高木利久、（九州大学）
11:05-11:30	ＧＤＢ（ゲノムデータベース）とネットワーク構想 諏訪秀策、宇津野宏二、清水信義*（日本科学技術情報センター、*慶應義塾大学）
11:30-11:55	日本語ヒト遺伝子マップライブラリーの設計　土肥　浩、蓑島伸生*、清水信義*、石塚　満*（東京大学、*慶應義塾大学）
	昼食
セッション２	高次構造の推論
13:00-13:50	（招待講演）生化学エキスパートシステムとドラッグデザイン 梅山秀明（北里大学）
14:00-14:50	（招待講演）演繹データベースシステムAdbisを応用した遺伝子ー蛋白質解析システムGENASについて 高木利久、久原　哲、古市恵美子、二村祥一、松尾文碩、榊　佳之（九州大学） ー休憩ー
セッション３	データベースの構築・利用（１）
15:00-15:25	Overlapping Oligonucleotide Databaseの構築 坂本憲広、高木利之、佐藤賢二、榊　佳之（九州大学）
15:25-15:50	JOIS-FにおけるDNAデータベース検索システムについて 水野路子（日本科学技術情報センター） ー休憩ー
セッション３	データベースの構築・利用（２）
16:00-16:25	ゲノムデータベース中の複合蛋白データベース 沖林文規、国沢　隆、加茂政晴、鈴木陽子、猪浦裕子、佐竹一夫、次田　皓（東京理科大学）
16:25-16:50	蛋白質２次元電気泳動データベースの作成 加茂正晴、矢野裕之、次田　皓（東京理科大学）
16:50-17:00	まとめ

9日

セッション4　アルゴリズム・アーキテクチャー（1）

9:30-9:55　3次元ダイナミックプログラミングに基づいた蛋白質のアラインメントシステム
広沢　誠、星田昌紀、石川幹人、戸谷智之（ICOT）

9:55-10:20　化学構造の最大共通部分構造の検出方法について
阿久津達也（機械技術研究所）

10:20-10:45　可変長符号圧縮データのための文字列パターン照合ーゲノム情報の高速検索技法ー
深町修一、篠原　武、竹田正幸＊（九州工業大学、＊九州大学）

ー休憩ー

セッション5　アルゴリズム・アーキテクチャー（2）

10:55-11:20　Fast DNA Data Analysis System
Richard H. Lussier（アップライドバイオシステムズジャパン）

11:20-11:45　タンパク質の二面角構造予測と予測規則の抽出ーニューラルネットワークを用いた検討ー
中山伸一、吉田政幸（図書館情報大学）

11:45-12:10　対称相互結合型ニューラルネットワークにおけるエネルギー極小化現象を利用した高速なRNA二次構造予測法
秋山　泰、古谷立美（電子技術総合研究所）

昼食

セッション6　遺伝情報

13:10-14:00　（招待講演）ゲノムを中心とした大量遺伝情報の分子進化学的解析
五條堀　孝（国立遺伝学研究所）

14:00-14:25　ゲノム情報に基づく生物種固有代謝の解析
金谷重彦、工藤喜弘（山形大学）

ー休憩ー

セッション7　ゲノム解析

14:35-15:20　（招待講演）ヒトゲノム解析自動システム（HUGA-1）
遠藤　勲（理化学研究所）

15:20-15:50　（招待講演）ヒトゲノム解析の推進方策について
松尾泰樹（科学技術庁）

15:50-16:50　まとめと総括

部会記事

情報化学部会ワークショップ　主催申請要項

日本化学会情報化学部会

日本化学会情報化学部会では、情報化学および関連分野の専門家を対象とした“情報化学部会ワークショップ”を開催しています。下記により部会員各位からの企画提案および主催申請を募集いたしますので、奮ってご応募ください。

記

1．名称：情報化学部会ワークショップNo.〇―第〇回〇〇〇〇ワークショップ
〔注〕下線部の回数は当部会にて決定します

2．補助金：1件につき4万円支給します。要否をお知らせください（年間5件以内）。採否は当部会にご一任ください。

3．申請方法：所定の申請書（事務局に請求のこと。ただし、“CICSJ Bulletin”に掲載の見本頁の複写を使用しても結構です。）に必要事項を記入のうえ、当部会あてお申込ください。添付資料は①開催案内、②収支予算書、③補助金支払方法（必要な場合のみ）です。なお、終了後は、①報告書（書式自由）、②テキスト1部（作成していない場合は不要）を提出してください。また、部会機関誌に1頁以上の報告をお願いします（複数頁歓迎。予めご連絡ください）。

4．会告：部会機関誌および日本化学会機関誌（下記あて原稿2部を送付のこと）。

5．申請書送付先（問合せ先）
101 東京都千代田区神田駿河台1-5　日本化学会情報化学部会　事務局
（電話03-3292-6163　FAX 03-3292-6318 ）

以上

〔A4判〕

情報化学部会　ワークショップ　開催申請書

平成　　年　　月　　日

社団法人　日本化学会
情　報　化　学　部　会　　御中

下記のとおりワークショップを計画いたしましたので貴部会の主催を申請いたします。

名　　称	情報化学部会ワークショップ　No.＿＿＿　〔注〕下線部は未記入のこと 〔テーマ〕第　　回		
会　　期	年　　月　　日（　　）　〜　　年　　月　　日（　　）		
会　　場	〔会場名〕 〔所在地〕〒　　〔電話（　　　）　−　　　（内線　　　）〕 〔交　通〕		
参加申込締切	年　　月　　日（　　）　特記事項：		
参　加 申込先	〒　　〔電話（　　　）　−　　　（内線　　　）〕		
講演件数等 概　　要			
補　助　金	要（4万円）・　不　要	添付資料	①開催案内②収支予算書③補助金支払方法
事務局への 連絡事項			

■　世話人（申込者）・同所属・同連絡先
〒　　　　電話（　　　）　−　　　（内線　　　）

印

学会報告

第４回北米化学会議に参加して

第一製薬（株）探索第二研究所　片倉晋一

第４回北米化学会議(Chemical Congress of North America)は、８月２５日から８月３０日までニューヨークにて開催された。本学会は、第２０２回ＡＣＳミーティング(American Chemical Society Meeting)も兼ねて開催されたこともあり、２９のdivisionからなるたいへんボリュームのある学会であった。私は、製薬会社の人間であるので、主にメディシナルケミストリーを中心に会場をまわったが、２９日は一日コンピュータケミストリーの会場で発表を聞く機会を得た。今回は、その日の講演から得た情報に話を絞って紹介させていただきたい。

全体のプログラムとしては、後に述べる通りであるが、２９日の3D-databeseのセッションは、、その実用性と今後の当分野の方向性を占ううえで、たいへん興味深い発表が数多く見られた。基本的には、受容対側、特に酵素側の三次元構造の情報からそれにフィットするような化合物を既存の化合物の三次元データベースより検索して、従来の阻害剤とは異なる構造を有する化合物を探索していくシステムを指向しており、そのための方法論並びにその適応例が発表されていた。

具体的なソフトとしては、おそらくこのような三次元データベースに基づく検索システムのうち最も代表的なプログラムであるＤＯＣＫの紹介と、そのソフトのHIV-Protease非ペプチド阻害剤探索への応用例が述べられていた。

同様なソフトとしてALLADINも有名であるが、今回はALADDINの実際の適応例として自社の三次元データベース(14000化合物)を利用した、やはりHIV-Proteaseの阻害剤の探索を発表していた。更には、酵素に結合しているコンフォメーションを維持するような環構造を構築する際、最も無理のない結合位置とフラグメントを抽出するソフトも発表されていた。

また、これらのソフトとは異なり、フィットする化合物を一から組み立ててしまおうとする試みもなされていおり、完成度としては低いものの、従来法の欠点すなわちデータベースにあるものしか選択することができない、あるいは分子自体のflexibilityを考慮することができない点などの問題点を解消する上で興味がもたれる。

ある意味では、ランダムスクリーニングを画面上で行なうような、この試みは、化合物源を有効に活用する点において非常に魅力的であり、新規化合物の探索の点で三次元データベースの利用の方向性がある程度定まってきたように思われた。商用のデータベースと代表的なMACCS-3Dが発売された当時は、いよいよ化合物のデータベースも三次元の時代が来たという期待感とその検索システムのユニークさに驚かされた反面、その高価格と三次元構造が計算によって算出された、いわば推定構造であることから、すぐには普及することはないであろうと考えていたのだが、今回の発表を見る限り三次元データベースは、アメリカでは、一つのデータベースの形として、すでに定着しているようである。

しかしながら、このようなデータベースがいまだ日本では、ほとんど売られていない事実を考えるとアメリカ製薬企業の進取の気性に驚かされる。

また、データベースを検討する際に、「日本の企業は、その内容よりもまずデータベースの三次元構造がどれだけ正確か、X線解析の構造にどれだけ近いかを気にしている。」という話は、アメリカと日本の製薬企業のポリシーを考えるうえで示唆的である。すなわち日本の企業は、研究の初めからデータの正確さを要求するのに対し、アメリカの企業は可能性のあるものは、とにかく試してからその結果を見た後で、その後の研究の動向を決めるということであろうか。

現在のところ、このような手法で高活性な化合物は得られていないが、既存の薬物とは構造の全く異なる活性化合物がひろわれているのは事実であるようだ。このような三次元データベースの妥当性はまだ議論の余地があるであろうが、少なくともアメリカでは積極的に活用する方向にあることは間違いなく、今後とも十分にその動向に注目していくことは大切との印象をもった。

< Computers in Chemistry>

....Program Chairman G.W.A.Milne.

<u>Monday</u>

Spectral Simulation

<u>Tuesday</u>

The Beilstein Database

Pedagogical Symposium on Graph Theory in Chemistry

<u>Wednesday</u>

Chemical Applications of Graph Theory

<u>Thursday</u>

3D Database

<u>Friday</u>

General Papers

最新コンピューターケミストリーシステム一覧

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	化合物、情報データベースの蓄積・検索から立体構造モデルの構築・表示、さらにMO/MM計算・QSARを包含したCCS統合システム	ACOS－4系	6,500万円	85年12月	
BIOCES〔E〕	〃	日本電気	蛋白工学と医農薬設計のための支援システム。受容体の立体構造の推定から薬物一受容体間の相互作用解析までの機能を提供	EWS4800シリーズ＋PS390またはESVシリーズ(E&S社) IRIS	400万～1,600万円	89年2月	
AMOSS	〃	〃	非経験分子軌道計算に基づく総合計算化学システム。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・化学的性質の解析、予測が可能	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〕	〃	〃	ファインケミカルな分野を対象とする分子設計支援システム。分子モデリング、形状解析、MM/MO計算とエネルギー状態表示などの機能をEWSで実現	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、解析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1,500本
micro - RESEARCHER II	〃	〃	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。MM・MO計算インターフェースを提供	FUJITSU VP、M、Aシリーズ	2,900万円	86年6月	
Lead Maker	〃	富士通、呉羽化学工業	製薬、有機材料向け分子設計支援システム。分子計算結果解析、一覧表示が煩雑な手続きを要さずダイレクトに得られる。分子計算一括処理、多重度制御機能を装備	Sファミリ(SUN)	280万	91年7月	
MACCSII	〃	米モレキュラーデザイン	統合化合物情報管理システム。化合物に関する種々の情報を登録/管理し、高速に検索することが可能	FUJITSU VP、M、Aシリーズ	2,500万円～	83年11月	
REACCS	〃	〃	反応情報管理システム。反応式や反応条件で高速にDBを検索することができる。反応に関する各種データベースが提供可能	〃	1,600万円～	85年5月	
ADAPT	〃	〃	パターン認識による構造活性相関(QSAR)研究支援システム。パターン認識の結果と構造式の重ね表示が可能	FUJITSU VP、M、Aシリーズ Sファミリ(SUN)	830万円～ 600万	86年7月 91年7月	
CHEMTERM/MM-MO	〃	富士通	パソコン用理論化学計算支援システム。コンピュータ・ケミストリーの入門システムとして利用できるため、教育等に手軽に活用できる	FMR－30、50、60、70、80シリーズ PC－98シリーズ	30万円	89年11月	
G³term/FM	〃	富士通ビーエスシー	ソニーテクトロニクス社のT4105型と富士通F9430型のグラフィック端末エミュレータ。Ethernet型LANにも対応	FMR-30、50、60、70、80シリーズ	25万円	89年10月	
MOLBESS-F	〃	富士ファコム制御	「DNA・蛋白質関連のデータベースの構築、またDNAから蛋白質までの一連の実験シミュレーション」を行うことにより、研究者のルーチンワークの軽減とスピーディな業務の遂行を支援	FMR-60、70、80シリーズ	180万円	89年11月	
KAMELO	〃	富士通	スプレッドシート型で化学構造式を中心とした情報を扱える化学OAシステム。シートをベースとして、研究者間の円滑コミュニケーションも支援	Sファミリ(SUN)	300万円	91年4月	
LATOX-F	〃	富士ファコム制御	医薬品開発時に実施される安全性試験を「GLP基準」に沿ってサポートする総合パッケージ。一般毒性試験、生殖試験をサポート	FUJITSU Aシリーズ、FMRシリーズ	1,200万～	86年4月	
CRYSTRUCT	ファコムハイタック、富士通	ファコムハイタック	結晶構造設計支援システム。結晶構造のモデリング、解析等の機能を持つ。超伝導物質や強磁性体等の無機材料設計を強力に支援	Sファミリ(SUN)	150万円	90年9月	
SINCA	富士通	富士通	分子進化学に基づく遺伝子情報の解析システム。超高速のホモロジー検索機能から進化系統樹作成までの一連の機能をサポート	Sファミリ(SUN)	19万8,000円	91年1月	
SINCAIDEN	〃	〃	SINCAの海外版		1,980ドル	91年7月	
BIORESEARCH/AE	〃	〃	マルチプルアラインメント支援ツール。アラインメント専用の配列エディタ機能を持つ。カラー表示により視覚による判断が容易	Sファミリ(SUN)	9万8,000円	91年7月	
BIORESEARCH/3D	〃	〃	蛋白質の表示/操作システム。アミノ酸の一次配列と三次構造の連動機能、各種の立体構造の解析機能を持つ	Sファミリ(SUN)	80万円	91年7月	
SODHO	〃	〃	スーパーコンピュータでGenBankの全データを解析した高付加価値データベース。類似配列のアラインメント結果を収録。CD－ROMで提供	MS－DOSマシン	6万円	91年10月	

理論化学計算入門CAL(MM2編)	富士通九州システムエンジニアリング	富士通九州システムエンジニアリング	理論化学計算MM2学習システム	FMR50、60、70、80	2万4,000円	90年11月	
同(MOPAC編)	〃	〃	理論化学計算MOPAC学習システム	FMR50、60、70、80	2万4,000円	90年11月	
理論化学解析計算システム(MO解析)	〃	〃	MOPACより得られる情報をビジュアライズするシステム	FMR50、60、70、80	9万8,000円	90年11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	15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	61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	
CU/6000	〃	〃	RS/6000上で稼働する分子設計支援システム。低分子から高分子までを幅広くサポートし、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・管理できる	IBM RISCシステム/6000シリーズ	350万円	91年11月(予定)	
CU/HOST	〃	〃	CU/6000を補助するプログラム。ホスト上で大規模シミュレーション・プログラムの実行や、CU/6000で生成されたデータの管理などができる	IBM ES/9000シリーズ	250万円	91年12月(予定)	
MOL-GRAPH/M 〃 F 〃 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、IBM POWERステーション	700万円〜	87年7月	
〃 MS			低分子、素材設計エントリーシステム	COMTEC 4Dシリーズ IRIS−4Dシリーズ IBM POWERステーション	700万円〜 システム価格720万円〜	91年8月	
Uni Chem	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	2,400万円	90年12月	
INTERMOL	分子	分子	モンテカルロ法、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。Gaussian 90, Gamess, Hondoのプリポストとして、対話型3次元グラフィックスによる静電ポテンシャル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、IBM RS/6000、Apollo DN 10000	700万〜2,000万円	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でき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、IRIS−4Dシリーズ、IBM−Power station、E&S-ESVシリーズ	270万円〜	86年3月	
BIOGRAF	〃	米モレキュラーシミュレーション	たん白質、核酸、糖、脂質を主とした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にまとめて扱うグループ機能が非常に便利	IRIS 4Dシリーズ、IBM−Power station、E&S−ESVシリーズ、ALLIANT、CMVEX、CRAY	860万円〜	86年2月	
POLYGRAF	〃	〃	有機の低分子から高分子まで取り扱える材料設計/解析支援システム。力場計算、動力学計算により分子の機械特性、熱的特性および結晶構造の予測が可能	〃	1,280万円〜	89年3月	
CERIUS	〃	〃	有機・無機化合物の構造解析支援システム。結晶構造データからX線などの回折パターンや透過型電子顕微鏡画像をリアルタイムにシミュレーションすることが可能	IRIS−4Dシリーズ	300万円〜	91年7月	
Mac Vector	〃	米インターナショナルバイオテクノロジー社	Macintoshで使える、核酸、たん白質のシーケンス解析システム。CD−ROM版の遺伝子情報データベースの利用も可能	Macintoshシリーズ	98万円	91年5月	
EXPOD	—	三菱総研	線状ホモポリマーの基本的な特性の予測を通じ、新規高分子材料の開発を支援するエキスパートシステム。候補ポリマーの逆探索機能を拡張可能	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
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				
MMA/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	シミュレーションテクノロジー	米モレキュラーシミュレーション	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。グラフィックスコンピューターとの組み合わせで、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シリーズ IRISシリーズ IBMパワーステーション ESV—5等	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、機械的及び熱的物性算出等が可能	〃	〃	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	
Polaris	〃	〃	たん白質、酵素等を主対象にしたプログラム溶媒自由エネルギー計算、静電ポテンシャル計算等が可能	〃	〃	91年4月	
Enzymix	〃	〃	たん白質、酵素等の機能研究プログラム	〃	〃	〃	
Cerius	〃	〃	材料設計用の統合パッケージ。無機材料、結晶等を含むモデリング及びX線解析データとの照合等を実行。現在9種類のモジュールで構成されており、分売も可能	IRISシリーズ	〃	〃	
AVS™ Chemistry Viewer	〃	〃	MOPAC/GAUSSIAN等量子化学計算プログラムのためのプリ・ポスト用グラフィックスインターフェース。PDB等データベースの可視化も可能	TITANシリーズ IBMパワーステーション DECステーション他	200万円	91年11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	物産アバンストシステム	米トライポス		VAXシリーズ、IRIS4D/GTシリーズ、Sun—4、コンベックス、クレイ、ESVシリーズ、IBMRS6000シリーズなど	各600万円～(1ユーザー限定)	88年5月	
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				
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				
Biopolymerモジュール			たん白質、核酸等の生体高分子操作				
QSARモジュール			定量的構造活性相関操作			89年2月	
Polymerモジュール			合成ポリマー専用モデリング操作			〃	
QSPRモジュール	〃	〃	定量的構造物性相関解析	〃	〃	91年2月	
Composer	〃	〃	たん白質のホモロジーモデリングプログラム。ロンドン大学ブランデル教授開発	〃	約450万円	91年2月	
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	

ALCHEMY II	〃	〃	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	
CONCORD	〃	〃	変更スマイル表記法を利用した簡易三次元指標生成プログラム	VAXシリーズ、IRIS4D/GTシリーズ、Sun-4、ESVシリーズ	470万円(SYBYLユーザー)、約580万円(非SYBYLユーザー)	88年2月	
LabVision	〃	〃	教育者向け、ベンチサイエンティスト向け簡易型分子可視化ソフトウエア、ステレオヴュー、豊富な表示機能(リボン、スペースフィル、ボールアンドスティックなど)、基本的分子モデリング、エネルギー計算、立体配座解析、分子動力学計算、MOPACのインターフェース機能	VAXシリーズ、IRIS4Dシリーズ、ESVシリーズ、RS6000シリーズ	300万円	91年9月	
DAYLIGHT	〃	米デイライトケミカルインフォメーション		VAXシリーズ		91年9月	
Daymenus			化学構造入力、データベース検索、構造のグラフィック表示、プラットフォーム機能		約180万円(ユーザー限定)		
Daybases			THORデータベースの管理機能	UNIX版リリース(IRIS4D、ESV、RS6000)	約90万円		
Daymodels			簡易プログラム言語モジュール		約180万円		
Gemini			スマイル表記は使わずに化学構造を読み込む機能		約60万円		
P/CModels			CLOGP3、CMR、ポモナ大学レオ教授開発		約90万円		
POMONAデータ			約2,700件の化合物の活性値、構造のデータ		約81万円		
DISCOVER	菱化システム、三菱商事	米バイオシム	エネルギー計算、ダイナミックス手法を用いた分子設計プログラム。コンソーシアムで吟味した独自のパラメータを採用	IRIS、VAX、CRAY、CONVEX、ALLIANT、IBM、ESV	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	〃	〃	局所密度近似をとり入れたAb-initio分子軌道法プログラム。有機化合物・金属クラスター・無機物にも適用可能。	CRAY、IRIS、VAX、CONVEX	1,040万~2,490万円	89年3月	
INSIGHT II	〃	〃	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、ESV、IBM(Power Station)	1,870万~3,370万円(DISCOVERとセット)	87年4月	
Homology	〃	〃	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	IRIS	520万―1,040万円	90年4月	
Open Interface	〃	〃	強力な3D―グラフィックスINSIGHT IIに、ユーザー独自のソフトを組み込むインターフェース	IRIS	未定	91年7月	
QSPR	〃	〃	構造式とデータベースから、構造と物性の相関を求めるプログラム		未定	91年7月	
RIS	〃	〃	Floryの理論に基づきポリマーの種々の物性を統計的に推算するプログラム		未定	91年7月	
Phase Diagram	〃	〃	ポリマー溶液またはブレンドにおける種々の相図を、Flory Hugginsの理論に基づき作成するプログラム		未定	91年7月	
Amorphous Cell	〃	〃	アモルファス状に高分子を組み立てて、種々の物性を推算するプログラム		未定	91年7月	
Polymerizer	〃	〃	リピートユニットを用いてホモポリマー、コポリマーを作成するプログラム		未定	91年7月	
Interphases	〃	〃	DillのLattice法を用いてInterphaseの物性を求めるプログラム		未定	91年7月	
触媒・吸着コンソシアム	〃	〃	機能材料用の実用的な分子設計ソフトの開発を目的とするコンソシアム。現在会員募集中			90年10月	
ポテンシャルエネルギー関数コンソシアム	〃	〃	ポテンシャルエネルギー関数の改善・評価を目的としたコンソシアム。現在新会員募集中			91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	
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	DEC、SUN、HP、APOLLO、HP、IBM	220万円~(年間ライセンス料)	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
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、NEC EWS4800シリーズ、IRISシリーズ、Macintoshシリーズ	1,400万円 600万円	87年 91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 YHP、TITAN等 PC98シリーズ	EWS版300万円 PC版100万円	89年	
Spec Info	〃	独ケミカルコンセプト社	NMR、IR、MASSスペクトルのデータベースシステム。第二世代のデータベースで、データの集積、検索だけでなく、化学構造式からスペクトルの推定も可能	VAXシリーズ	1,200万円～	91年	
SPARTAN	CRC総合研究所	WAVEFUNCTION INC	3次元グラフィックインターフェースを備え、手軽に利用できるGAUSSIANタイプの非経験的分子軌道計算プログラム。これまで、不可能と考えられていた比較的大きな分子までEWS上にて計算可能とした	IRIS―4Dシリーズ	300万円	91年4月	
GEMS/PREP	〃	CRC総合研究所	対話型、分子構造作成・表示コード。MOPAC分子軌道・分子振動表示、MDアニメーション機能も備える（MM機能近日中追加予定）	IRIS―4Dシリーズ	80万円	91年4月	
GEMS/MD	〃	〃	機能性有機材料を主対象とする汎用分子動力学コード。現バージョンは特に液晶のシミュレーションに適する	IRIS4Dシリーズ、HP9000シリーズ、IBM RS6000シリーズ	250万円	91年11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	〃	ウェイブ・ファンクション・インク	手元のEWS上で動く分子軌道法プログラム。非経験法、半経験法を高速に実行。操作が非常に容易で3次元分子モデルの作成、計算、結果の3次元グラフィックス表示までが対話的に行える	IRIS、INDIGO、IBM/R6000、CRAY、CONVEX	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	98万～350万円（アライントFX予価700万円）	89年12月	
MOLDA&GRIMMVer5.15/5.1J	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シリーズ	６万円	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／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－98ＸＬ^2 ＰＣ－Ｈ98m70	19万円	88年７月	
パソコンMOPAC/386（基本プログラム）	〃	〃	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(V5.0)を、32ﾋﾞｯﾄパソコンに移植したプログラム	ＰＣ－9801シリーズ(32ﾋﾞｯﾄ) ＰＣ－98ＸＬ^2 ＰＣ－Ｈ98m70	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	ＩＲＩＳ４Ｄ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	
PC—Asp	〃	〃		ＰＣ－9801シリーズ(32ﾋﾞｯﾄ)	19万円	91年６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	ＩＲＩＳ４Ｄシリーズ ＶＡＸシリーズ	200万円	90年10月	
PC-Cobra	〃	〃		ＰＣ－9801シリーズ(32ﾋﾞｯﾄ)	25万円	91年12月予定	
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。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	290万円	91年６月	
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ェア。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	
MOLTS-PROTEIN	〃	〃	たん白質の立体構造(ＰＤＢデータ)を豊富なモデルにより表現。研究支援に加え、論文やプレゼンテーション資料の作成にも力を発揮します	Ｍａｃｉｎｔｏｓｈシリーズ	９万8,000円～14万8,000円	91年７月（予定）	
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
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	
441	テクノシステム	豊橋技術科学大学	パソコン用分子モデリングシステム。２次元構造式を自動的に３次元構造にモデリング MM2インターフェース付属	ＰＣ-9801シリーズ	９万８千円	90年12月	
441/ＤＢ	〃	〃	パソコン用化合物データベース管理システム。マウス中心の操作により容易にデータベースを構築。任意の部分構造検索可能	ＰＣ-9801シリーズ	９万８千円	91年10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
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	460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	〃	３万6,000円	88年４月	120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	130本
MATERIA	〃	〃	ＥＷＳ用の分子設計支援システム。ＭＭ欠落パラメータ自動補塡、ＭＯ用Ｚマトリクス自動生成、ｄ軌道表示、ＩＲ、ＮＭＲ、ＵＶスペクトル予測、自由描画入力機能等とさらに充実した機能を低価格で提供	ＳＵＮ, ＮＥＷＳ, ＹＨＰ9000	500万円～	88年11月	45本
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	〃	29万円	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	〃	28万円	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		
HAZARDEXPERT(ハザードエキスパート)	〃	〃	プログラムは、微生物から哺乳動物にいたるまでの八段階の生物に対して有機化合物の予想した危険効果を有毒物質制御法とともに評価する。毒性予測のツールに早適	ＩＢＭＰＣ/ＡＴ、ＰＳ55、ＰＳ2、ＡＸマシン、Ｊ－3100シリーズ	350万円	90年６月	
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	1,400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530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。		22万円(ハード含む)		90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)		180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)		75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)		60台
GENETYX-T/SQ	〃	〃	ＤＮＡシーケンサーで決定された核酸配列の結合部分を自動検索するとともに、結合部分をシーケンサーの波形データを比較しながら結合	ＳＵＮ、ＮＥＷＳ	50万円	91年５月	
GENETXY-MAC/1	〃	〃	マッキントッシュによる遺伝子解析ソフトウエア	マッキントッシュ	20万円	91年４月	80本
GENETXY-MAC/CD	〃	〃	マッキントッシュ用核酸配列データベース、たん白質データベースの検索ソフト	〃	22万円	91年４月	60本
GENETYX-MAC/2	〃	〃	ＭＡＣ/1ソフトの続編。ハープロット、核酸二次構造予測機能など	マッキントッシュ	18万円	91年11月	
GENETYX-MAC/IN	〃	〃	核酸配列入力機能、フラグメントサイジング機能	マッキントッシュ	10万円	91年６月	
GENETYX-MAC/ATSQ	〃	〃	ＤＮＡシーケンサーや核酸配列入力装置の核酸断片配列を結合する	マッキントッシュ	22万円	91年10月	
GENETYX-Σ	〃	〃	ワークステーション用遺伝子解析ソフトウエア、核酸配列解析、アミノ酸列解析、データベース検索機能を含む	ＳＵＮ、ＮＥＷＳ	76万円	91年10月	

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800本 海外1,500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400台 海外500台
DNASCAN	〃	〃	DNAシーケンスフイルム自動認識装置。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15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	545万円 727万円	88年1月	35台
DNASIS-Mac	宝酒造、日製産業	〃	マッキントッシュ用遺伝子入力解析システム。従来のDNASISのマッキントッシュ版	アップルMacintosh Plus/SEKSE«çKIIシリーズ/CLASSIC/Portable	90万円	91年8月	
FMBIO-100	宝酒造	〃	蛍光バイオイメージアナライザー。蛍光物質で標識したDNAやたん白質を電気泳動後直接セットすることにより短時間で画像解析を行う装置	アップルMacintoshIIシリーズ	1,450万円	91年10月	
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。8年の実績	PC-9801シリーズ	32万円	82年	約300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	
CRYSTAN-GM	マック・サイエンス	マック・サイエンス	低分子結晶構造解析のパッケージ。Open Window GUIを用い、最新のMITRIL91を含む直接法による位相決定から解析結果の表示まで一貫処理。豊富な分子グラフィックスにより解析の過程、結果を即座に確認できる	SUN SPARC2 TITAN	600万円 700万円	91年4月 90年4月	
CAChe システム	ソニー・テクトロニクス キャノン・スーパーコンピューティングS.I.	米テクトロニクス	3次元の分子設計モデリングシステムを使い易いMACインターフェースによりMOMAC ZINCO MH2等のアプリケーションを利用できる	MacintoshIIfx(8MBメモリ)(X,Ci,Cx,Siでも可) RP88コプロセサボート	183万8,000円	91年4月	
PC/GENE	帝人	米インテリジェネティクス	核酸からアミノ酸までの全てを網羅した配列情報解析システム。年1～2回のバージョンアップ。セキュリティー機能あり	PC-9801シリーズ、IBM PC/XT、AT PS/2、互換機	84万円	90年10月	海外含め800本
Gene Works	〃	〃	Macintoshによる核酸、アミノ酸配列解析ソフトウエア。CD-ROMデータベースの提供は年4回	Macintoshシリーズ	80万円	91年10月	
SEQCODER	〃	帝人 国立遺伝研	核酸・アミノ酸配列データの登録による個人データベース構築ツール(主要データベースフォーマットをサポート)	PC-9801シリーズ	7万円	91年3月	
Mac Molly	アロカ	独ベルリン自由大学	DNA・プロテイン解析システム。シーケンス入力・編集から制限酵素サイト探索、シーケンス比較・結合、データベース検索、文献整理などの機能を持つ	マッキントッシュ	65万円		

海外動向

MEETINGS

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).

9-13 February 1992.
Biophysical Society Meeting (Joint Meeting with ASBMB).
Houston, TX.
Contact: Emily Gray, Biophysical Society Room 3209, 9650 Rockville Pike, Bethesda, MD 20814 (301-530-7010; FAX: 301-530-7133).

5-10 April 1992.
San Francisco, CA.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

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.

23-28 August 1992.
204th ACS National Meeting.
Washington, DC.
Contact: Americal Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington, DC 20036. (202-872-4396).

4-10 October 1992.
ELMAU 4: Computational Methods in Chemical Design.
Schloß Elmau, GERMANY.
Contact: K. Thewes, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Kaiser-Wilhelm-Platz 1, D-4330 Mülheim a. d. Ruhr, GERMANY (49-208-30-64-88; FAX: 49-208-30-46-07).

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

computers & chemistry

An International Journal

Contents

Vol. 15, No. 4, 1991

Journal of
Computational Chemistry

VOLUME 12 / NUMBER 7 / SEPTEMBER 1991

Journal of
Computational Chemistry

VOLUME 12 / NUMBER 8 / OCTOBER 1991

JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN

Volume 5 Number 4 August 1991

Contents

Research Papers

The Computational Perspective

Journal of MOLECULAR GRAPHICS

Volume 9
Number 3
September 1991

JMGRDV 9(3) 137–200 (1991)
ISSN 0263–7855

Published in association with the Molecular Graphics Society

PAPERS

NEW PROGRAMS

ISSN 0931-8771
QSARDI
10(1) 1 – 98 (1991)

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

Including Molecular Modelling and Applications of Computer Graphics in Pharmacology, Chemistry and Biology

Contents

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

Including Molecular Modelling and Applications of Computer Graphics in Pharmacology, Chemistry and Biology

ISSN 0931-8771
QSARDI
10(2) 99 – 190 (1991)

Contents

編　集　後　記

今年（Vol. 9）の最終号をお届けします。東京地方は、夏から秋にかけての不安定な天候が漸く安定し、晩秋の穏やかな天気が続いています。その様な中で第14回情報化学討論会が今日から始まりました。会場として用意された川口総合文化センターは昨年（豊橋）に劣らず素晴らしい施設であり、充実した討論会が期待されます。実行委員長を努められている細矢先生のお話しによれば、初日の登録者が４００人を越え、新記録を更新しそうとのことでした。参加出来なかった部会員の方には次号で詳しい内容を御報告致します。

さて、本誌の発行を、実務一切をひきうける形で支えてくださっていた日本化学会の田辺弘子さんが秋の異動で総務に移られました。何はともあれ、これまでの御苦労に感謝し、新しい部署での御活躍を期待したいと思います。とはいえ、今後のことを考えると編集担当としては内心不安の色を隠せませんが、幸い部会全般を見て下さっている保倉氏が今迄同様支援しますと言って下さっているので、まずは一安心しています。

次号からは本紙もVol. 10、即ち10年目に入ります。これまでの歴代編集委員の御努力により、一定のスタイルがまとまっておりますが、私達としてはそれに安住することなく、刷新をはかっていきたいと思います。

皆様の御支援を期待します。

（編集幹事　　四居　靖彦）