ISSN　0913-3747

CICSJ Bulletin

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

計算化学　特集号

日本化学会
情報化学部会
Volume 10, Number 1
January 1992

目　次

計算化学特集『分子軌道の現在と将来』にあたって

＝　編集委員会より　＝

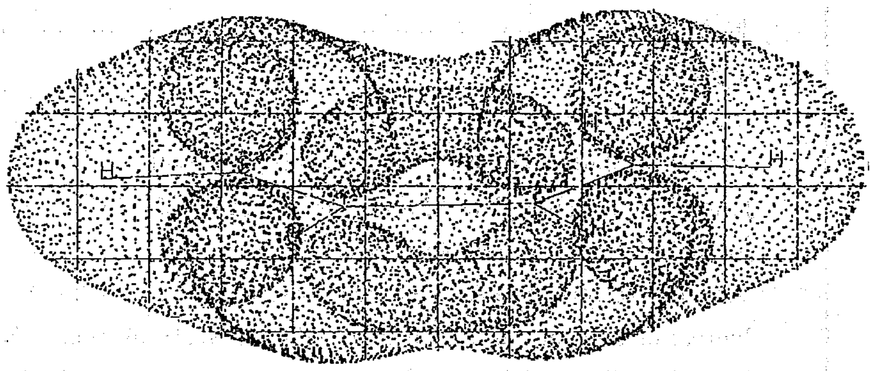
小出昭夫（日本アイ・ビー・エム）

化学の進歩は、情報の量と質の深さを増し、専門家細分化を引き起こす。計算機化学の目的は、この蓄積された化学的情報を広範囲の研究者が効率的に利用できる環境を作り出すことにある。

化学的情報には、実験結果のようなファクト・データも有れば、規則や理論もある。理論化学もプログラムの形をとることで物として流通し道具として使用できるようになる。従って、理論化学の計算機応用である計算化学は、計算機化学の重要な対象の一つであり、今後ともプログラムの開発、管理、流通、インタフェース、システム化を取り上げる必要がある。

このため、本誌でも４年前、Vol.6 No.4で計算化学の特集を組み、計算化学プログラムのカタログ的解説と企業における現状の紹介を行った。この間に、ＱＣＰＥやＪＣＰＥなどのプログラム交換機構や数多くの計算化学支援グラフィックス・システムのお陰で、多くの研究者が計算化学プログラムを実際に道具として使用するようになってきた。従って、今回の特集では、分子軌道計算に絞り、計算化学そのものの紹介として、その理論や応用や計算機環境などの最先端の動向の平易な解説を企画した。

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、とりわけ、本特集の企画からご助力いただいた平野恒夫先生に感謝の意を表します。



計算化学の現状と展望

お茶の水女子大学理学部化学科
平野　恒夫

表1は、1990年1月本誌CICSJに発表された「21世紀の情報化学の重要テーマと実現時期」[1]というアンケートの最終結果の一部を柏木氏がさらにまとめた結果[2]である。情報化学という旗印のもとに部会を構成している専門家が企画したアンケートの結果なのであるが、注目すべきことは、そこで扱われているテーマの大部分は、データベースとか知識情報とかの、いわゆる化学の情報を扱う分野のそれではなくて、実験化学と対等の市民権を獲得しつつある計算化学Computational Chemistryに関するものであったということである。計算化学は計算機を多用する点では情報化学と共通するところがあるが、計算化学はあくまでも「化学」そのものなのである。ただ、ここで大切なことは、アンケートにみるように、両者は車の両輪のごとく相携えて化学や科学技術の進展に資するべきものである、ということなのである。

表1　21世紀の情報化学の重要テーマの実現時期[2)]
（　）の中は投票者の数

1996年・薬物分子と受容体の相互作用を、ホログラフィを用いた三次元グラフィックスで見ることができるようになる。(33名)
2000年・分子量 300程度の通常の有機分子についてのab initio計算は、ワークステーションなどで1時間程度で実行できるようになる。(53名)
2002年・多数のニューラルネットワークを集積したニュータイプの計算機が開発される。(33名)
2003年・現在のスーパーコンピュータの能力＋3次元グラフィック機能をもつパソコンが普及する。(65名)
2006年・非経験的計算により有機分子の構造や物性が正確に予測できるようになる。(84名)
2009年・1秒間の高分子のダイナミクスが古典近似の範囲で計算できるようになる。(29名)
2013年・AI機能をもった材料設計とデータベースをもった合成設計の総合システムが完成し、材料開発の自動化が可能になる。(22名)
2018年・溶液、固相中を問わず、非経験的反応実験のコンピュータシミュレーションが可能となる。(74名)
2020年・分子素子、バイオ素子が開発され、それを用いた計算機が製作される。(46名)
2021年・蛋白（酵素）の一次構造から最適な薬物が（分子科学計算やデータベース、人工知能システム）で設計できるようになっている。(34名)
2027年・ヒトの知能とほぼ同等のエスキパートシステムが完成する。(36名)

近代化学の歴史をプリーストリーやラボアジェが酸素分子を考えた時点から始まったとすると、その２２０年余は実験化学主導の歴史であったといえる。シュレーディンガーがシュレーディンガー方程式を提案したのが１９２６年で、水素分子に関するハイトラー・ロンドンの共有結合理論が翌１９２７年、ヒュッケル分子軌道法が１９３１年と計算化学の重要な手法である量子化学は１９２０年代の後半にその基礎を固めた。しかし、有効な計算手段を持たなかったため、実際の分子計算に応用されることはなく、その後３０年間はいわゆる電子論（たとえば有機電子論）の時代であった。

１９６０年代になって、ＩＢＭの３６０という初めての汎用計算機に支えられて花を開いた拡張Hückel法、CNDO/2法、INDO法、MINDO法などの半経験的分子軌道法のあいつぐ出現と、それに続く *ab Initio* 分子軌道法の展開を経て、計算化学は今や小さい分子なら実験と同等またはそれ以上の精度で先験的な予測が可能なまでに成長した。つまり、計算によって、試薬やフラスコを用いる実験化学と同じように化学の世界に踏み込めるようになったのである。したがって、ここ数年来、計算化学が実験化学と対等な立場でものが言えるまでに台頭しつつあるということは、ある意味で化学の歴史上の大変革なのである。工学の他の分野、たとえば建築、航空、船舶、機械では当たり前になっている計算主導の研究、開発の波は確実に化学の世界にも押し寄せているのであって、上述のアンケート結果はその一端を如実に物語っていると読み取れるのである。

東京大学大型計算機センターの例で言えば、かつて１９６６年には仰天すべき高性能な計算機と思えたHITAC 5020Eも、今で思えば0.3 MFLOPS、CPU わずか 0.4 MB、ディスク容量 3.6 MB の「大型計算機」でしかなかった。CPU 64 MB で、磁気ディスク 2 - 3 GB を備え、23 MFLOPS 程度の実数演算速度を示すワークステーションが 1000 万円程度（アカデミック価格）で購入できるようになった現在、計算化学におけるほとんどの計算は、センターの大型計算機に頼ることなくワークステーション上で実行可能になっている。しかも、これらのワークステーションは UNIX を OS とし、ETHERNET で LAN に接続可能であるため、一度ある機種で慣れてしまえば他の機種の場合でも支障なく使用できるし、データファイルの相互交換も容易であり、Anonymous FTP を使って居ながらにして海外のセンターからプログラムを取り寄せることすら可能になっている。大型計算機には無いこの開かれた計算環境は、その高速性、大記憶容量とあいまって計算化学におけるワークステーションの位置付けをますます高めて行くことであろう。すでに並列計算機の使用が検討されている一方、決まりきったルーチン、たとえば分子動力学における力の計算、量子化学計算における二電子積分の計算や対称行列の対角化などのルーチンのハード化（ボードないしはチップ化）によるテラマシンも夢ではないで

あろう。

こうしたハード面の進歩に合わせてソフトの進歩も目をみはるものがる。分子軌道法計算に話を限っても、誰でも容易に使えるパッケージとして、半経験的分子軌道法のためのMOPAC Ver. 6や非経験的分子軌道法のためのGAUSSIAN 90があり、多くの研究室で使われている。かなり高額にはなるが、便利なプレ・ポスト用のグラフィックスソフトも市販されているし、多少不便であっても GUMMOSとか、MOLMOLとか、GAMESSに付属してくるGRAPHICSのように実費で入手可能なプレ・ポスト用のソフトもある。多配置で記述する必要がある場合の電子状態や励起状態の計算のためにはGAMESS、HONDO7、MELDFなどのプログラムが容易に入手できる。残念なことに、MOLYX, JAMOL4、MICA3、JASON2、GSCF3、KOTO、AMOSS などごく小数のプログラムを除いて、分子軌道法計算のプログラムの大半は外国製である。分子力学、分子動力学の分野でも事情は同じことで、プログラム使用料の高額化、ソース非公開などの望ましくない傾向は憂慮すべき事柄である。ソースコードレベルの実費頒布を原則とするQCPE (Quantum Chemistry Program Exchange) やJCPE（日本化学計算プログラム交換機構）のようなプログラム交換のためのボランティア活動の役割は、今後ますます重要になっていくことであろう。

計算化学の未来は極めて明るいというのが楽観的な筆者の見解であるが、問題はむしろ計算化学に携わる人間のほうにありそうである。これだけソフトが整備され、さらにワークステーションが普及してくると、誰でも何か端末に向かって入力すれば尤もらしい出力が得られるけれども、そこから正しい情報をどれだけ引き出せるかということは使用者の力量にかかっている。美しいグラフィックス表示に幻惑されて、計算過程をブラックボックスとして済ませてしまう、などというのは論外である。計算化学はComputationによる「化学」であるから、人間の知的活動そのものであって、計算機はそのための極めて優秀な道具でしかないことを忘れてはならない。

以下、何人かのエキスパートにお願いして計算化学、とりわけ分子軌道法関係の現状と将来の展望について書いて頂いた。完成の域にはほど遠いとしても、計算化学の沸々とした息吹を感じて頂けたら幸いである。

1) *CICSJ Bull.*, 8(1), 46-55 (1990).
2) 柏木　浩、*JCPE Newsletter*, 2(3), 3 (1990).

分子軌道法理論－電子相関理論－の現状と将来

名古屋大学教養部　平尾公彦

理論化学は，理論的方法論の発展，新しいアルゴリズムやプログラムの開発，コンピュータの高速化によって，この１０年ほどの間に，定性的理論から定量的理論へと大きな進歩と変革をとげた．

過去１０～１５年でＳＣＦ法は分子や分子集合体のさまざまな物性の ab initio prediction に大いに利用されるようになった．これは１９７０年代の２つの理論的発展に因るところが大きい．ＳＣＦ法は，Hartree-Fock 微積分方程式の固有値問題を解析的展開法を利用して，代数的な行列式の固有値問題に置き換えるものであるが，その１つは，基底関数に関する理論的進展である．つまり Gauss 関数の整備と Gauss 関数の積分に関する問題である．前者は藤永ら［１］による精力的な研究でほぼ全原子についての基底関数が用意され，後者の積分の問題は，基本的には Dupius ［２］によって解決され，８０年代に入って，小原［３］によってさらに発展させられた．これにより ab initio ＳＣＦ計算の大部分を占める分子積分の計算が大幅に短縮され，従来は半経験的分子軌道法の独壇場だった領域までも ab initio 法の適用が可能となり，化学的に興味あるかなりの部分を ab initio 法でカバーできる素地を作った．もう１つは，Pople ら［４］によって核座標に関するＳＣＦエネルギーの１次，２次微分の解析的表現が求められ，エネルギーの１次，２次微分が容易に計算できるようになったことである．これにより，平衡点や鞍点といったポテンシャル曲面の特性が解明され，同時に分子振動に関する情報が得られるようになった．分子の静的な物性のみならず，動的物性への研究にも大きく道を開くもととなった．また，この間，ＳＣＦ法を越える近似，いわゆる電子相関問題についても著しい進展があった．電子相関効果は，ポテンシャル曲面の計算や，励起過程，分子－電子衝突などに重要であり，古くから理論化学の中心課題の１つであった．相関エネルギーは小さなものであるが（通常は全エネルギーの１％以内），このエネルギーの大きさは，物理的，化学的に興味あるエネルギーと同程度であり，定量性を追求する際にはどうしても考慮しなくてはならないものである．ここでは，電子相関理論に焦点をあて，理論の発展を振り返るとともに，今後の問題点を考えることにする．

正確な波動関数 Ψ はある近似関数（参照関数）Ψ_{ref} と補正項 X によって

$$\Psi = \Psi_{ref} + X \qquad (1)$$

と表現される．次の規格化条件 (intermediate normalization) を仮定しよう

$$\langle \Psi, \Psi_{ref} \rangle = \langle \Psi_{ref}, \Psi_{ref} \rangle = 1 \qquad (2)$$

Schrodinger 方程式，$H\Psi = E\Psi$ を近似関数の空間に射影することにより

$$E = \langle \Psi ref,\ H\Psi ref \rangle + \langle \Psi ref,\ HX \rangle$$

$$= E ref + E corr \qquad (3)$$

が得られる．$E ref$ は近似関数のエネルギーであり，通常は近似関数としてＳＣＦ波動関数を選ぶ．従って，電子相関エネルギー $E corr$ は正確なエネルギーとＳＣＦエネルギーとの差であり，電子相関は概念的にはＳＣＦ近似の欠陥を補う効果として定義される．ＳＣＦ近似の欠陥の１つはクーロン孔を考慮していないことにある．つまり，異なるスピンをもつ電子はＳＣＦ近似では同時に空間の同一場所を占めることができる（ＳＣＦ関数はPauli の原理を満たし，同じスピンの電子は空間的に同時に同じ場所にはこれない）．クーロン反発項 $1/r$ を考えるとこれは不都合であり，２つの電子はある一定距離以内には近づけない筈である．これがクーロン孔である．このクーロン孔に基づく電子相関効果は dynamical correlation effect とよばれている．ＳＣＦ近似のもう１つの欠陥は縮退状態の記述ができないことである．例えば，水素分子のような簡単な系でもＳＣＦ法は分子の解離をうまく表現することができない．これはＳＣＦ関数が単一配置関数であり，その改善を図るには本来的に多配置関数を出発関数とする必要ある．これに伴う電子相関が nondynamical correlation effect とよばれている．補正項 X を完全系で展開すると

$$X = \Psi i C i + \Psi ij C ij + \Psi ijk C ijk + \ldots \qquad (4)$$

となる．Ψi，Ψij ．．．はΨrefの１電子，２電子，．．励起配置であり，Ci，Cij，．．．は展開係数である．相関エネルギー $E corr$ はこれら励起配置を使って表わすと

$$E corr = \langle \Psi ref,\ HX \rangle = \langle \Psi ref,\ H\Psi ij \rangle C ij \qquad (5)$$

となり，（４）式の展開のうち，２電子励起配置のみしかあらわれない．つまり，完全ＣＩ展開の１電子励起配置や３電子，４電子，．．．励起配置の存在は，単に２電子励起配置の展開係数 Cij の最適化に寄与するだけである．

（５）式の表現は電子相関効果に対する１つの素朴な概念，独立電子対模型を連想させる．ＳＣＦ法は，他の粒子が作る平均場の中でそれぞれの電子が独立に運動しているという独立粒子模型を基礎としている．電子相関効果も独立粒子模型で作られる平均場の中で，電子対がそれぞれ独立に運動しているという概念で説明されれば好都合である．この独立電子対模型は１９６０年代に Sinanoglu ［５］によって提唱されたものである．残念ながら，電子対間の coupling を無視するこの近似は必ずしも良い近似ではないとされ，電子対間のcoupling を考慮に入れたいわゆる coupled electron pair 近似を余儀なくされ，現在の多体理論の多くはこの近似を基礎としている．

現在，電子相関へのアプローチには大きく分けて3通りある．その1つは変分法に基づく理論であり，もっともよく使われている変分理論がＣＩ法である．Ｘ を（４）式のように線形展開し，変分原理に基づき，最適の C_{ij} を求めるものである．ＣＩ法は概念的にも簡潔であり，一般化も容易である．また，開殻系や励起状態への適用も比較的容易である．ＣＩ法は nondynamical correlation には有効であるが，dynamical correlation の取り込みには必ずしも効率が良いとはいいがたい．このことは，線形なＣＩ展開の収束がきわめて遅いことを示している．最適の C_{ij} を得るには，２電子励起配置との相互作用が大きい４電子励起配置までを考慮すれば良い近似になることは容易に察しがつく．しかし，４電子励起配置は小さな系でも莫大な数に及ぶ．これは解かなくてはならない行列式の次元数が膨大になることを意味している．現在は，数万から数十万次元の行列式の対角化が routine に行われているが，この次元数をもう一桁上げることは，いかにコンピュータが高速化しても至難の技である．ＣＩ展開の収束がきわめて遅いというこの欠陥は，近似をあげるとともに，また電子数の増加とともに顕著となり，事実上，大きな系への実用化や精密な計算をほとんど不可能にしている．size-consistent でないことも欠陥の１つである．もちろん，multiconfigurational CI 法 （多配置参照関数をもとにＣＩ法を実施し，単一参照関数ＣＩ法の欠陥を補う方法）が次第に主流となりつつあるが，理論と計算の複雑さは当然のことながら相当なものであり，routine に利用するにはまだまだの感がある．

第２の方法は多体摂動論である．摂動論はもともと摂動が十分小さければ良い近似になる．しかしながら，電子相関は摂動として扱い得るか否かの critical な位置にある．変分法でないため（upper bound 条件を満足しない），摂動展開がはたして収束するかどうか，あるいはどこで摂動展開を打ち切るべきかが前もってわからない．また，摂動展開の収束は，０次ハミルトニアンの選択にも大いに依存している．これが電子相関問題へのアプローチとして摂動論が受け入れられるのに時間がかかった最大の原因であろう．しかし，Pople school によるＧＡＵＳＳＩＡＮプログラムの普及とともに，Moller-Plesset(MPn)摂動法が広く使われ，摂動法の利点，欠点について評価しうるデータがようやく蓄積されてきた．経験によれば，利点としては計算が他の方法論と比較して簡単であること，size-consistent であることがあげられよう．欠点としては，電子相関が小さければ良い近似になるものの，電子相関効果が大きい場合にはきわめて無力であり，摂動の次数で振動したり，発散したりすることも稀でないことである．摂動論は dynamical correlation には有力であるが，nondynamical correlation を取り込むには不向きであるというのが一般的な結論である．開殻系への適用にはまだまだ議論の余地が残されているところであるし，励起状態の取り扱いも今後の問題である．

電子相関問題に対する第３の方法論は波動関数のクラスター展開法である． Symmetry Adapted Cluster (SAC) 法［６］あるいは Coupled Cluster (CC) 法［７］として知られている．この方法は変分法でもなければ，摂動法でもない．いわば両者の中間に位置し，両者の長所を備えた方法論である．Ｘの展開は，ＣＩ法のような線形展開ではなく，係数に関して非線形な展開であり，展開の収束はＣＩ法に比べてずっと速くなる．size-consistent でもある．非線形方程式を解くため，計算はＣＩ法に比べると複雑にみえるが，同じ精度を目標にすれば，ＣＩ法よりも簡単に達成できる．SAC-CI 法により開殻系や励起状態への適用も可能で，電子励起状態，イオン化状態，電子付加状態なども高精度に算出される．単一参照関数を基礎とする方法としては現在考えられているもののなかで best であろう．問題はやはり nondynamical correlation の扱いである．多配置参照関数を出発関数とするクラスター展開法も開発されているものの，まだまだ実用的とはいえない．

最初に独立電子対模型がもっとも簡潔な電子相関の描像であることにふれたが，このモデルは，早い時期に近似が粗すぎるとして葬りさられた．電子対間の coupling を無視するこの近似は２次の摂動論に対応する．このモデルは本当に働かないのだろうか．MP2（２次の MP 摂動論）計算のデータを詳しく解析してみると，MP2 計算で相関効果の大部分がカバーされる場合が意外に多いことに気がつくであろう．もちろん，２次の摂動論で不十分な場合も多々ある．しかし２次摂動論がうまく働かないのは，決って nondynamical correlation が大きい場合である．nondynamical correlation effect には Multi-reference が有効である．Multireference と独立電子対模型を組み合わせると，概念的にも簡単な理論ができそうである．事実，こうした考えのもとに新しい理論も提唱されはじめている［８］．

このように現在開発されているさまざまな電子相関理論は，われわれ理論化学者にとっても難解なものが多く，計算やアルゴリズムも複雑である．ＳＣＦ法は理論化学者以外にも自由に利用されているが，電子相関理論はとてもこのようなわけにはいかない．この複雑さは，電子相関の中味の反映であるといってしまえばそれまでであるが，もっと概念的に簡潔なモデルが望まれる．現象の物理的本質を鋭く見抜き，大胆な近似を導入することによって，理論化学者以外にも受け入れられる簡潔な描像を模索する必要がある．物理的本質を衝いた理論は数学的にもシンプルである．

文献

［１］ 例えば Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations, ed. S.Huzinaga, (Elsevier 1984).
［２］ M.Dupuis, J.Rys and H.F.King, J.Chem.Phys., 65, 111 (1975).
［３］ S.Obara and A.Saika, J.Chem.Phys., 84, 3963 (1986).
［４］ J.A.Pople, R.Kirshnan, B.B.Schegel and J.S.Binkley, Int.J.Quantum Chem., Symp., 13, 225 (1979).
［５］ O.Sinanoglu, J.Chem.Phys., 36, 706 (1962).
［６］ H.Nakatsuji and K.Hirao, J.Chem.Phys., 68, 2053 (1978).
［７］ J.Cizek, J.Chem.Phys., 45, 4256 (1966); R.J.Bartlett, C.E.Dykstra and J.Paldus, Advanced Theories and Computational Approaches for the Electronic Structure of Molecules, ed. C.E.Dykstra (Reidel, 1984).
［８］ K.Hirao, Chem.Phys.Lett., in press.

化学反応遷移状態のポテンシャル面と遷移状態分光

基礎化学研究所　山下晃一

1．　はじめに

基底状態にある安定分子の電子状態や分子構造、また励起状態への遷移エネルギー等はab initio分子軌道計算によりかなりの精度で予測できる。多くの実測データとの直接比較により、用いた計算方法の検討も可能である。一方化学反応のポテンシャル面全体に関しては、ab initioポテンシャル面を用いた動力学計算を行い、衝突実験との比較からポテンシャル面の精度に関して議論することも行われつつあるが、反応途中、特に遷移状態領域に関しては比較する実験データが少なくその領域のab initioポテンシャル面を直接検討することは難しい。ところが最近、化学反応の遷移状態を分光学的に直接観測しようとする試みが進められており、光解離反応が注目されている[1]。基本的な考え方は、安定分子ABCを電子励起状態での２分子反応遷移状態領域へ直接光励起することにより、吸収スペクトルに遷移状態領域の情報が含まれうると考える。この場合もちろん安定分子ABCの構造と２分子反応の遷移状態の構造が似かよっているという条件が付加される。本稿では、オゾン分子の光解離過程を取り上げ、遷移状態領域のポテンシャル面の様相と吸収スペクトルにあらわれる微細構造の関連を、ab initioポテンシャル面の量子化学計算と光解離相関関数の量子力学計算により明らかにする [2]。

2．　オゾン光解離反応 - Hartleyバンド

オゾン分子の光解離反応では電子基底状態Xと励起状態A,B,Rが関連し、X->B遷移がHartleyバンドに対応する（図1）。そこで、各状態のポテンシャル面の ab initio計算を、DZP基底を用い、酸素原子のｐ軌道から成る12電子9軌道のCASSCF法と,得られた1292参照配置からの全ての一電子励起を考慮した92300次元のCI法により行った。より高次の電子励起の効果をDavidsonに従って見積もった。尚CASSCF計算に際して基底状態1A'(X)と励起状態2,3,4A'(A,B,R)を平均した。次にポテンシャル面をMurrell-Sorbie型の解析関数へ最適化した。図2に(a)X状態(b)B状態のポテンシャル面を示す。X状態のFranck-Condon領域がほぼB状態の遷移状態領域に対応する。オゾン解離反応のポテンシャル面に関しては、これまでHay,Pack, Walker, Heller (HPWH)[3]らによるab initio計算が報告されているが、基底状態の解離エネルギー（D_0）、励起B状態の障壁エネルギー（ΔE）等については実験値との一致が非常に悪い。Sheppard, Walker(SW)[4]らは実験値を用いてHPWHを経験的に補正したポテンシャル面を報告しているが基底状態分子のFranck-Condon領域以外では用いることができない。

新たに得られたポテンシャル面の様相はHPWH, SWと比較して、いくつかの点で顕著な違いを示した。D_0、ΔEは著しく改善され実験値と良い一致を示した。特に光解離反応のダイナミックスと関連して重要と考えられるのは、図3に示すようにB状態のポテンシャル（破線）がX状態安定分子のFranck-Condon領域（オゾン分子の場合B状態の遷移状態領域に対応する）でHPWH, SWと比較してより急勾配を持つことである。図4に示すようにSWを用いた場合(a)の吸収スペクトルの幅は実験スペクトルに比較して狭いが、新しいポテンシャル面を

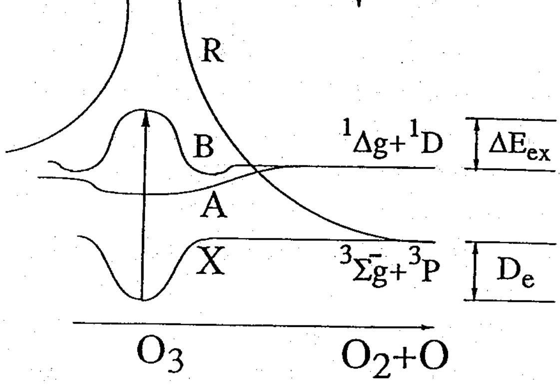

R
B
A
X
$^1\Delta g + ^1D$
ΔE_{ex}
$^3\Sigma_g^- + ^3P$
D_e
O_3
$O_2 + O$

図1

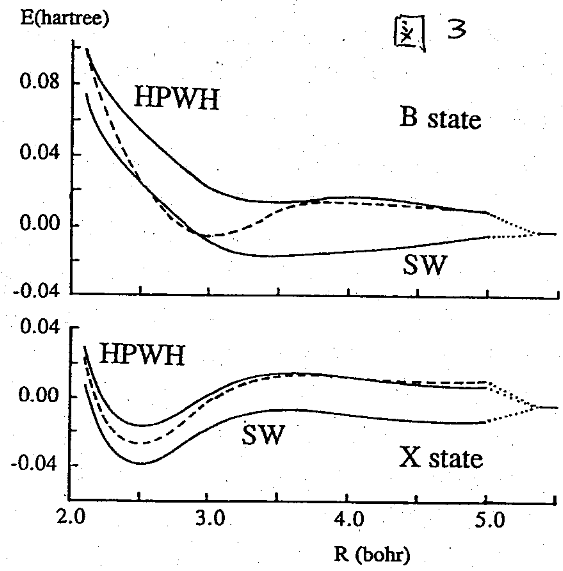

E(hartree)
0.08
0.04
0.00
-0.04
HPWH
B state
SW
0.04
0.00
-0.04
HPWH
SW
X state
2.0
3.0
4.0
5.0
R (bohr)

図3

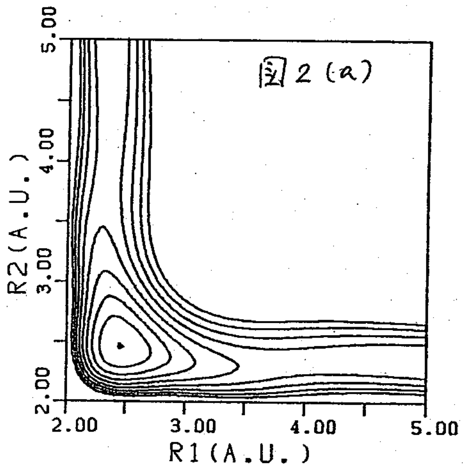

R2(A.U.)
2.00
3.00
4.00
5.00
R1(A.U.)

図2(a)

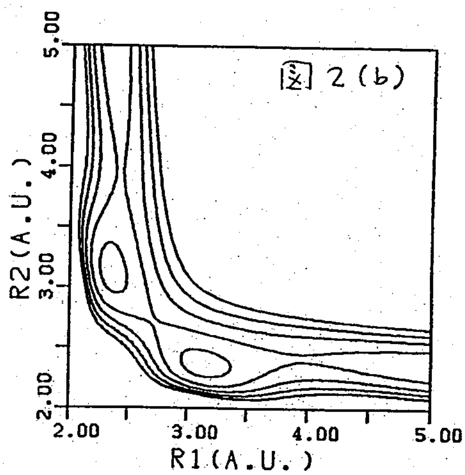

R2(A.U.)
2.00
3.00
4.00
5.00
R1(A.U.)

図2(b)

用いた結果(b)は実験幅とほぼ一致した。従って、本研究で得られたポテンシャル面はB状態のFranck-Condon領域をかなり精度良く再現している。

光解離相関関数 $< \phi(0) | \mu | \phi(t) >$ は光吸収によりB状態へFranck-Condon励起した波束 $\phi(0)$ と、その後B状態を運動する時間tにおける波束 $\phi(t)$ の積で表される[5]。ここで μ は電子遷移モーメントである。JohnsonとKinseyら[6]は実験吸収スペクトルを直接Fourier変換することにより、図5(a)に見られるように特徴的な再帰構造を示す光解離相関関数を得た。このことは、一度B状態の遷移状態領域から離れた波束が再びこの領域へ戻ることを示す。JohnsonとKinsey[6]はそれぞれの再帰構造が遷移状態領域に存在する準安定な古典周期軌道（量子力学的には遷移状態領域の共鳴散乱状態に対応する）で説明できるとした。従ってHartleyバンドに現れる微細構造は、B状態での遷移状態領域における共鳴散乱状態の”直接観測”に対応すると考えられる。

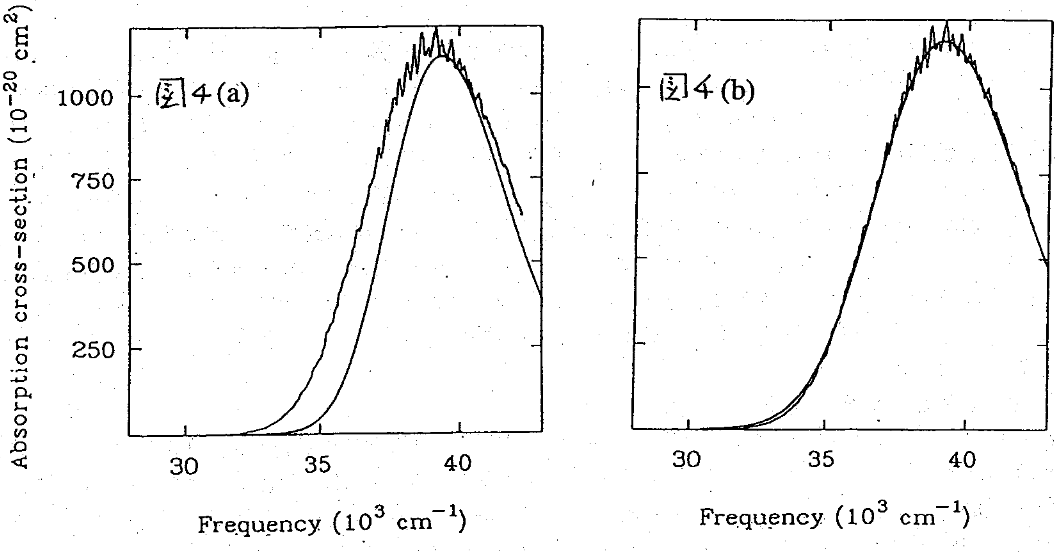
Franck-Condon領域がより急勾配の場合、遷移状態領域へ戻る波束は減少する。SWによるポテンシャル面を用いた再帰構造の強度は、JohnsonとKinseyらの実験値（図5(a)）と比較して10倍程度強く得られる[7]。一方、新しいポテンシャル面を用いた場合（図5(b)）、再帰構造の強度はSWを用いた場合と比較して約3分の1程度となり、実験結果とより良い一致を示した。依然3倍程度の不一致がみられるが、これはRもしくはA状態への非断熱遷移によると考えられる。今後この効果も取り入れた取扱いを進める予定である。

３．まとめ

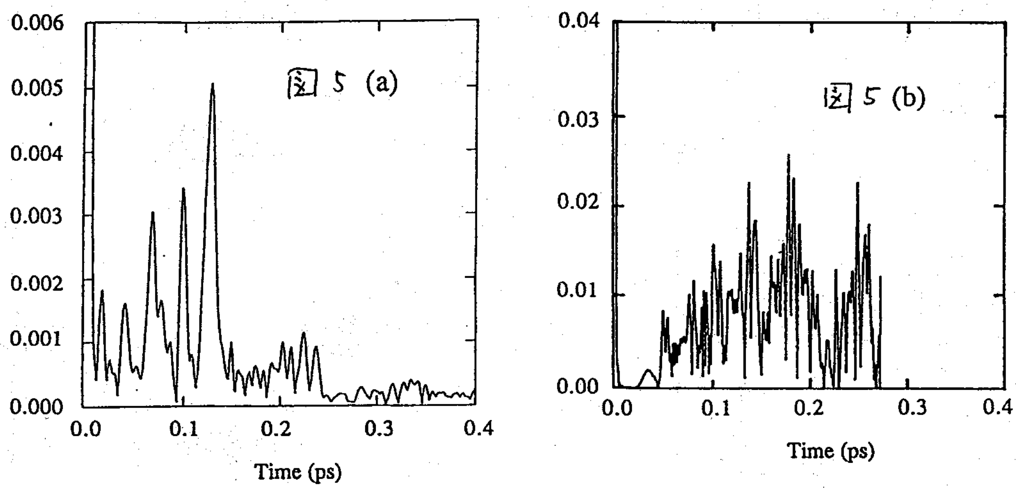
以上オゾン分子の光解離反応について、遷移状態領域でのポテンシャル面の様相や反応分子の動力学の情報が吸収スペクトルから直接引き出される過程を述べた。今後、遷移状態分光の実験が進むと共に、遷移状態領域のポテンシャル面についてかなり高精度のab initio分子軌道計算が要求されるであろう。

４．参考論文

[1] L. J. Butler, Chem. Phys. Lett. 182 (1991) 393.
[2] K. Yamashita, K. Morokuma, F. Le Quere, and C. Leforestier, Chem. Phys. Lett. submitted for publication.
[3] P. J. Hay, R. T. Pack, R. B. Walker, and E. J. Heller, J. Phys. Chem. 86 (1982) 862.
[4] M. G. Sheppard and R. B. Walker, J. Chem. Phys. 78 (1983) 7191.
[5] E. J. Heller, Acc. Chem. Res. 14 (1981) 368.
[6] B. R. Johnson and Kinsey, J. Chem. Phys. 91 (1989) 7638.
[7] F. Le Quere and C. Leforestier, J. Chem. Phys. 92 (1990) 247; 94 (1991) 1118.



Absorption cross-section (10^{-20} cm^2)
1000
750
500
250
図4(a)
30
35
40
Frequency (10^3 cm^{-1})
図4(b)
30
35
40
Frequency (10^3 cm^{-1})



0.006
0.005
0.004
0.003
0.002
0.001
0.000
図5 (a)
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
Time (ps)
0.04
0.03
0.02
0.01
0.00
図5 (b)
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
Time (ps)

電子計算機からみた分子軌道法

分子科学研究所　長嶋雲兵

1．はじめに

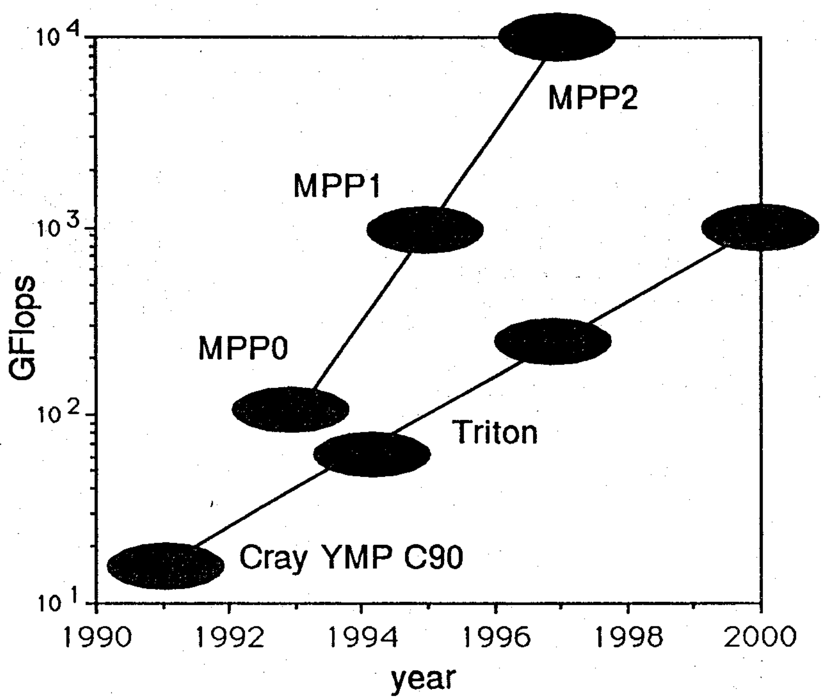
１９３０年代に生まれた分子軌道法は、１９４０年代後半に実現された計算機の発達と共に急速に発展してきた。現在では、計算機自体の高性能化のみならず数値計算法の改良をはじめ計算結果の可視化等により、ますます身近なものになってきている。分子軌道法が急速に発達した背景には、従来の物質の性質や化学反応の理論的理解にとどまらず、新しい物質探求を従来より早く、安く、そして安全に行うという化学界全体の強い要請があった。化学は、各種の実験とそのデータの収集・整理、そしてそれらの理論的理解に基づく各種経験則の導出、さらにその経験則から示唆される新たなる実験というサイクルをたどりながら発展していく。現象の理解や新たな現象の発見には分子軌道法が大いに威力を発揮するが、分子軌道法の詳細については平野先生や平尾先生のページを見ていただく事にし、むしろここでは分子軌道法と計算機は不可分の関係にあるので、計算機の性能を中心に幾つかの問題点を述べる。

2．電子計算機の構成と性能

計算機は、データを記憶するための記憶装置（メモリ）、実際の演算を行う演算制御装置（ＣＰＵ）、初期データやプログラムを入力したり計算結果を出力するための入出力装置の３っつの部分に分れる。

記憶領域としては、容量は少ないが高速でＣＰＵに最も近いレジスターと呼ばれるものから、キャッシュ、主記憶装置、ディスクをはじめとする各種補助記憶装置等が含まれるが、レジスターとキャッシュはＣＰＵに密着しているので、普通は主記憶装置と補助記憶装置をメモリとして考える。メインメモリに利用される半導体メモリはほぼ日本の専売品であり、高速化と大容量化が著しい。ソフト的なアドレス空間はすでに２バイトを優に越えており、実装主記憶の容量の上限は、その価格とハードウエアの論理・実装技術があたえている。補助記憶として大容量のものは磁気テープ、ディスク、フロッピーディスク等磁気を利用したものが依然主流を占めているが、装置の大きさが問題となる小型のパソコンや高速な転送速度が要求される超大型のベクトル計算機等では半導体を利用した大規模補助記憶が利用されている。パソコンのＥＭＳやＩＣカード、スーパーコンピュータではクレイのＳＳＤや日立、日電のＥＳがこれにあたる。ディスクの性能は、最高１２Ｍバイト／秒、普通は３Ｍバイト／秒であり、半導体を用いた物は２Ｇバイト／秒で３桁の違いがある。今後半導体を利

図1　Ｃｒａｙの製品計画（１９９１年１１月）



用した補助記憶装置の値段が下がり、ますます広範囲に普及する事になろう。当面の主力は相変わらずディスク装置であるが、現在１Ｇバイトで１００万円程度の値段のものが現れてきており、容易にディスクの大容量化に対応が出来るようになってきた。

ＣＰＵの性能は過去のデータを用いて予測をすると、５年後にはいつもそれに数倍する性能が得られてしまうほど急速な発展をする。そこで昨年暮れにクレイのＣ９０の発表と時期を同じくして公にされた製品計画を図１に示してお茶を濁しておく事にする。下の線が従来のベクトル型メモリ共有並列計算機の性能であり、２０００年には１ＴＦｌｏｐｓの性能が実現されるとの予測である。ＭＰＰとあるのが次世代のスーパーコンピュータとして最近注目を集めているメモリ分散型並列計算機の性能である。これがまあ予想されるスーパーコンピュータの最高性能の年次変化というところである。ＷＳのほうは毎年新機種が続々と発表され、３年後には何がでてくるのかわからない状況であるが、すでに従来の大型汎用機の性能に匹敵する性能を持つものがアカデミックディスカウントで３００万円程度で手にはいるようになってきている。クレイー１やＳ８１０のような第１世代のベクトル計算機が今のＷＳ並の値段になるのはそう遠い事ではないであろう。

具体的にＷＳの実力を示す事にしよう。表１に分子研の古賀博士が行ったＧａｕｓｓｉａｎ８６のベンチマークの結果を示す。ここではＷＳがスーパーコンピュータに比較して８倍程度遅い事が示されている。この８倍がひどく遅いのか、むしろ速いのかというのは解かれる問題に依ろう。ここに実時間のデータが無いのが残念であるが、ＷＳでＧａｕｓｓｉａｎを動かしたときの実時間の印象は、ＣＰＵ時間に比べて２．５～３倍程度であるので、この程度の計算はＷＳで実行すると３時間程度で答が得られる。大型機での実時間の見積は混雑の程度で変わるので非常に難しいが、分子研では汎用機が１０多重程度、スーパーコンピュータが４多重程度で運用されている事から、汎用機で４時間ぐらい、スーパーコンピュータで３０分程度で答が得られよう。大型機は共同利用という性格上、１つのジョブのＣＰＵ時間の上限が決められており、そのための準備などを考えると、この様な分子構造最適化の計算はＷＳで実行できるものはＷＳで実行した方が早く答を手に入れる事ができる。

表１　CPU time(sec.) and efficiency of IBM RISC 6000/320

Computer	ECP	TEI	SCF	TDI	ECP dir.	total
R6000	9.3(1.7)	910.8(5.8)	710.2(32.7)	984.9(25.5)	382.6(2.5)	2998(8.0)
M680	4.2(0.8)	491.6(3.2)	151.5(7.0)	445.9(11.6)	176.6(1.1)	1274(3.4)
S820	5.6(1.0)	155.7(1.0)	21.7(1.0)	38.6(1.0)	154.4(1.0)	376(1.0)

入出力装置としては、キーボードが主たるものである事は当分変わり無いが、マルチメディア化が進み、画像や音声による入出力がますます広範囲に普及しはじめている。化学構造式に見られるように、化学は数値そのもの以上に図形的な記号を用いて発達してきた。そのため画像入力は化学の様々な分野で取り入れられようとしている。またとくに計算規模が増大すればするほど計算結果は莫大なものとなる。それの直感的な理解を助けるものとして、計算結果の可視化の重要性が非常に高まってきている。反面、計算機によって作り上げられたイメージが一人歩きして、計算結果の誤った解釈を引き起こすという弊害も起こりつつある。ここに計算機の分子軌道法への適用の難しい点があるのだが、多様な入出力手段が、化学研究に与える効果は大きい。

計算機本体を離れて計算環境に目を向けよう。まず計算機どうしを効率よくつなげるネットワークが整備されると、計算機間の有機的な結合が作られ、それを通じてデータの転送を行う事で、計算規模や目的にあわせて計算機を選択する事ができるようになる。１つの計算機で、エディットやワードプロセシングといった事と大規模な計算を同時に行う必要がなくなるという事である。これは個々の計算機の構成を目的に合わせて取る事ができ、各種の計算機の性能を十分に発揮できる環境を整備する事にもなる。具体的な例として私達の分子研では、ここ数年ネットワーク環境を最構築し、ワープロやエディット等はＮＥＣ－ＰＣやＭａｃで行い、あまり計算機資源を必要としない比較的長時間のＣＰＵ時間を必要とする分子構造の最適化の様な計算は、高性能ワークステーションで実行し、また

さらに大規模な計算やベクトル化率の高いシミュレーションの計算はスーパーコンピュータで行うといった事のできる環境の整備を行ってきた。このネットワーク管理とメイル等の環境の管理はＳＵＮを用いている。私達のプログラム開発は主にワークステーション上で行なわれている。ＮＦＳの様なファイル共有システムとＸウインドーの様な各種ウインドーシステムは、この様な環境で仕事をする上で不可欠なものとなっている。

計算機の管理運用を行う有能な人材の育成の問題を除くと、大体１６Ｍバイトの主記憶と２Ｇバイト程度のディスクが装備された５０ＭＩＰＳ程度の計算機が手元にあれば、現在大学の大型センタで行われている規模のかなりの分子軌道計算が実行できる。高性能で安価なＷＳの普及により今後ますます分子軌道法は広く行われるようになろう。

３．計算に関する幾つかの問題点

数学的にいえば、分子軌道法で解かれる方程式は多次元空間における偏微分方程式であり、これは近似解の解法が極めて困難である事を意味している。計算機の飛躍的発達が期待できるとはいえ、実際に１つの計算結果を得るためには多くの計算手順を踏まねばならず、何らかの理由でそれらの内１つでも実行不能ならば計算結果は得られない。分子軌道法のいくつかのステップを実行する上でメモリや演算速度、データ転送能力等の基本的なハードウエア能力がどの様な制約を与えているかを佐々木、野呂の解析に従い簡単に説明する。

使用できる計算機としては、実効速度１００ＭＦｌｏｐｓ程度のＣＰＵ能力で、ディスクの転送能力が１０Ｍバイト／秒の物を想定し、使用できるディスク容量を１Ｇバイト、計算または転送に利用する時間を１０時間とした。表２、３に分子積分の生成とＳＣＦ計算、ＣＩ行列の生成と対角化に対する実行可能な基底関数の数やＣＩの次元数をそれぞれ示した。ここで分子積分及びＣＩ行列は１％スパースとした。ＳＣＦ計算は１０回程度の繰り返しで収束し、ＣＩ行列は、行列要素の表現がディスクに保存され、固有値を求めるために分子積分と行列表現が１０回程度繰り返し読み出されるとした。これらの例はアルゴリズムやコードにより大きなばらつきがあるため大まかな目安を与えるにすぎないが、表２からはディスクの容量が基底関数の上限を決めており、演算速度と転送速度はほぼ同程度の制限となっている事がわかる。表３からはディスク容量とその転送速度が制限となっている事がわかる。そのためこれらのステップにはアルゴリズムの変更によりディスク容量の圧縮が有効である事が示唆される。

表２　　分子積分の生成とＳＣＦ計算

資源	基底	左欄の計算に必要な DISK	CPU-time	I/O-time
Disk (1GB)	470	--	1.5h	3.0h
CPU (10h)	770	7.0GB	--	10.0h
I/O (10h)	770	7.0GB	10.0h	--

表３　ＣＩ行列の生成と対角化

資源	次元 $(\times 10^6)$	左欄の計算に必要な DISK	CPU-time	I/O-time
Disk	0.1	--	0.03h	3.0h
CPU	1.9	360GB	--	100.0h
I/O	0.6	36GB	1.0h	--

また計算機のＣＰＵ性能の高さはもちろん重要であるが、そればかりでなく、計算機の性能と自分が良く行う計算に必要な計算機資源をバランス良く確保する事が重要である。

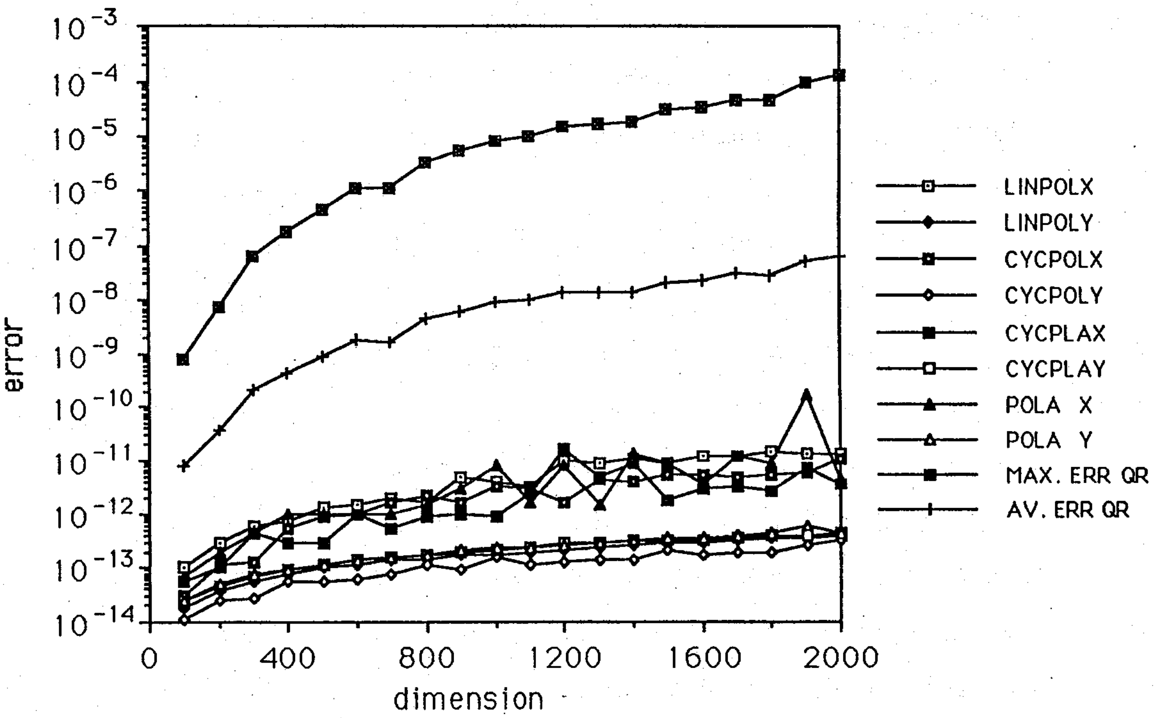
計算機の性能が向上して計算規模が増大すると実質的に演算量が増し計算精度が落ちるという事が起きる。図２にハウスホルダーＱＲ法を用いて、フランク行列といくつかの分子のヒュッケル行列の対角化を行った時の最大と平均誤差を行列の大きさに対してプロットした物である。誤差の大きい物はフランク行列であり、小さな物はヒュッケル行列である。誤差の現れ方は行列の性質に強く依存する事、行列の大きさが大きくなるにつれて誤差が増大する事がわかる。これは主に有限なビット長を用いる事による情報落ちと桁落ちによるのである。これは簡単なプログラムを書いて０．１を百万回足すと実数４バイトでは、大型機で用いられているＩＢＭ方式の場合８６１５０．９であり、ＷＳで用いられているＩＥＥＥ方式で１００９５８．３となることからも容易に予想できる。さらにこの計算は１０ＭＦｌｏｐｓ程度の計算機で０．１秒しかかからない極めて小さな計算であるが、この計算

機の桁あふれの処理法の違いによる両者の差１４８０７．４は、そう小さな値ではないと思うのは筆者だけであろうか。実際の分子軌道計算では実数８バイトとはいえこの数万倍の演算を必要とするのが普通なので、計算結果がどの程度の信頼性があるのかを判断するのは極めて難しい。小さな系を計算するために作られたプログラムを大きな系に適用するとき、ただディメンジョンサイズを大きくするだけでは誤差の混入が大きく、精度の高い計算をするためには、アルゴリズムやコーディング上の工夫が必要である。大型機で開発されたプログラムをＷＳに移植する際には注意が必要である。一般にＩＥＥＥの方が精度が高いがそれでも計算誤差とは無縁ではない。化学では数Ｋｃａｌ／ｍｏｌのエネルギーが問題となるので、特に大きな分子や金属原子を含む系の様に全エネルギーの絶対値が大きく、そのわずかな差を議論しなければならないときには注意が必要である。

４．まとめ

計算機のハードからみた性能と数値計算上の問題点を分子軌道法に関連させて述べた。計算機の性能向上には目を見張る物があるが、分子軌道法だけを取り上げても様々な計算ステップがあり、それぞれ計算の内容が違うために計算機の色々な側面が制約となる事は、ＷＳ等を手に入れる際に考慮されねばならない。また解の信頼性についての考察も、高性能な計算機を使い大きなサイズの問題を解こうとすればするほど重要になってくる。ここでは取り上げなかったが、分子軌道法の計算のためのソフトみならず、計算された結果の有効な利用のための蓄積を計算機上で行うためのデータベースの構築やそれに伴うソフト開発の等の問題がある。更に、まだ分子軌道法は完成されたというわけではなく、特に電子相関を取り扱う計算は、理論と現在の計算機の能力からみてまだ実用的ではない。実際に実験室で行われている研究で取り扱われている系の大きさを考えるとき、更なる計算機の性能の向上と共に、分子軌道法の理論のより一層の発展が望まれる。

図２　ハウスホルダーＱＲ法によるフランク行列といくつかの分子のヒュッケル行列の対角化による数値計算の誤差



部会行事

第１４回情報化学討論会 報告

表記の討論会が第１９回構造活性相関シンポジウムと合同で、平成３年１１月２７日（水）～２９日（金）の３日間、（財）川口総合文化センター　リリア（埼玉県川口市）で開催された。会場は旧公害研の跡地にできた１４階建のスマートな新しい建物で、ＪＲ川口駅や新築のそごう百貨店と歩道橋でつながっており、首都圏のターミナルとの交通の便もよかった。

情報化学討論会はお茶大グループ（平野恒夫、鷹野景子、藤枝修子）で、構造活性相関シンポジウムは北里大グループで世話人を引受け、両方を取りまとめる実行委員長をお茶大の細矢治夫理学部長がつとめられた。（ちなみに、細矢先生は川口市にお住まいです。）細かい実務的なことはお茶大グループが行い、アルバイトとしてもお茶大化学科の３研究室と東大の元平野研究室の学生さんたちが献身的に手伝ってくれた。

一般講演は３１件、ポスターセッションは２５件、特別講演は構造活性相関シンポジウムと共通で２件であった。参加者は４４５名で、昨年をやや上回った。第２日夜に懇親会を銀座アスター川口賓館（リリア１４階）で開催し、出席者は１５０名であったが、会場が狭く、残念ながらかなりの方をお断りし、ご迷惑をおかけした。

この１～２年にＣＣＳ関連に見られためざましい進展をうけて、第３日の最後に、「計算化学の将来とワークステーション」のパネルディスカッションを平野先生の司会で行った。出席者も多く、フロアーからの発言も活発であった。３日間を通して、関係企業１１社のご協力によるデモンストレーションがポスター会場で行われた。今回は、音楽ホールを会場にしたため、パイプオルガンが設置されており、お茶大細矢研究室卒業生の佐野羊奈子（ソニー）氏にアトラクションとしてパイプオルガンの演奏をお願いした。時間は短かったが、懇親会の前に楽しいひとときを過ごした。

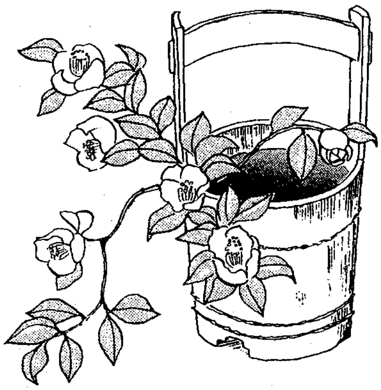
久しぶりの東京地区の討論会であったが、大勢の方々が参加して下さったことに、実行委員会一同、心から謝意を表したい。

（お茶大　細矢治夫、平野恒夫、鷹野景子、藤枝修子（文責））

特別講演Ｉ　Recent Advances in Force Fields,

the Development of ClassⅡ Force Fields

(BIOSYM Technologies, Inc.)　Arnold T. Hagler



特別講演 II　ＣＧにおける４次元モデリング

（東大・理・情報科学）　國井　利泰

コンピュータ・グラフィックスで実感のある動的な画面を作り上げるためには、３次元空間にある質感のある物体が時間とともにどのように変化するかの理論的な裏打ちが必要となる。４次元モデリングは、それを目的として力学にもとづいたモデルであるから、単に本物らしくきれいに見える画面をつくることではない。

ＣＧ上の各場面における各物体の動作を表現するために、画面のもつ沢山の情報量をできるだけ抽象化して減らす必要が生じる。そのためには、数学的に厳密な抽象化を行わねばならない。例えば、地形の凹凸を表現する場合には、先ず地形の幾何学的な特徴を、頂上、峠（鞍点）、谷底などの連結したトーラスに置き換える。次にモース理論を使って、リーブグラフに置き換える。このような抽象化を行ってから逆に、トポロジー　→　３次元幾何　→　物体表面のしわ　のような肉付けをして行く。

ＣＧ画面を作り上げるための理論的な話に続いて、洋服のしわのアニメーション、熱帯樹林の生育のシミュレーション、人間の耳の小骨の透視図などのＣＧ画像が実例として紹介された。洋服のしわなどは、数学の特異点理論を応用して、折り目、交差線、くさび（カスプ）の組み合わせによって陰影をつけて画面にする。また、人体の動きの解析の例として、空手、太極拳、スキーなどのＣＧ、インドのマンダラ図形をコンピュータで描いた実例なども紹介された。

ＣＧの理論的分野での第一人者である國井教授のこの講演は、情報化学の分野でＣＧ画像を使っている人にもいない人にも、それぞれ何らかの面で得るところが多かったであろう。

（お茶大理　細矢治夫）

〔口頭発表〕

27I0 1　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

薬物とレセプターとの相互作用を解析するためのシステムとして，演者らはANALOGSの開発を進めているが，相互作用の詳細な解析法に困難があった．これを解決するためにニューラルネットワーク法の導入を試みた．3層のネットワークを用い，結合の少ない順にモデル1，2，3について検討し，少ない結合は解析が容易であるが，認識能力が劣る．一方，フルに結合したネットワークを用いると認識力が上がるが解析が困難になる．しかし，従来用いてた重ね合わせ法より有効なことがわかった．ニューラルネットワーク法による因果関係の解析法は確立されつつあるので，ANALOGSへのニューラルネットワークの導入は適切であり，今後の発展が期待される．

27I02　アニーリング法によるタンパク質の高次構造予測システムの開発（第一報）

（東京農工大工）　唐澤琢郷，田淵公士，原田善之，泉沢潤司，安川民男

タンパク質の一次構造から高次構造を予測することは困難な問題である．演者らは遺伝的アルゴリズムを基にしたアニーリング（焼き鈍し）法によるペプチド鎖の折り畳み過程，すなわち，高温のペプチド鎖水溶液を徐々に冷却する過程ののシミュレーションを検討した．セグメントの運動ルールは合理的と思われるが，エネルギー評価がキーポイントとなる．特にアミノ酸残基間の相互作用は高次構造を支配し，それをどのように評価するかが問題である．これはこの分野の大きなテーマである．

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

物性予測へのニューラルネットワーク法の応用である．ここでは2成分系酸化物の物理定数とその酸強度の関係をネットワークに学習させ，認識能力および未学習系に対する予測能力を検討し，実用的にもまた，現象の解析にも有効なことを示している．一般に，ニューラルネットワーク法は内挿的予測には適切であるが，外挿予測は困難であるといわれている．しかし，演者らはleave-group-outという方法を用いると外挿的予測も内挿と同等の精度で予測できることを述べている．ニューラルネットワーク法の外挿的予測の困難な理由は特有の非線形動作にあり，認識能力と背反的関係にある．leave-group-out法の外挿動作の数学的性質の解明に期待したい．

（星薬大　市川　紘）

27 I 04　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・日立ＣＥ）○市川　紘・青山智夫

ニューラルネットワークＮＮが非線型判別マシンやfitting に広い分野で利用されるようになってきているが、その問題点は必ずしも十分には解明されていない。本報告では単純なモデル系を使って予測値とその微分値が決定と関係ない入力ニューロンの値によって変化するか、また、中間層の要素数の影響など基礎的問題の検討をおこなっている。今後もこのような基礎的な研究を発展させる必要があると思われる。

東京農工大　安川　民男

27 I 05　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

ニューラルネットワークのタンパク質立体構造予測への応用がいくつか試みられるようになってきているが、本報告では２面角ϕ、ϕの領域をα、α^*、ε、ε^*に４分割したものについての予測を試み、適中率が最高で57％程度という結果を得た。

しかしこのような広領域についての予測では３次元構造を正確に再現することは困難であり、予測精度も十分とはいえない。また「二面角構造予測のための規則は単純なもの」であろうと示唆しているが、この考えにも大きな疑問がある。

東京農工大　安川　民男

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

化学名から平面構造式を発生する実用的なシステム（パソコン上で稼働）を開発した報告である。処理方式は、化学語彙の基本辞書（~250KBと以外に小さい）を用い、プログラム論理により化学名を解釈し結合表に変換するものである。多少の例外も有るようであるが、ほぼ完全なシステムと考えてよい。化合物データベースの構築に大変有用で有ろう。討論でも指摘が有ったが、立体化学の取扱への発展を期待したい。

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　（（株）DBS ）和知孝宣
（東京家政学院筑波短期大学）　前田浩五郎

演者らは、マススペクトルデータベースシステムの開発を続けてきており、今回、化合物の側鎖部分による検索機能の実現を目的として、その部分の名称の解析を行った結果の報告である。側鎖名は括弧の配列により、パターンに分類できる事が示された。多分、検索に有用であろう。このパターンと側鎖構造のトポロジーの関係が一般的に整理が出来るかに興味が持たれる。これとは別に、昨年も指摘された点であるが、名称による検索よりも構造式からの検索の方が優位と考えられるので、前演題（27I06)のプログラム等の利用により構造式へ変換されたデータベースとなれば、その価値が一段と向上するのではなかろうか。

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

「分子・結晶データベースシステム(MXDS)」構築の一環として、従来の諸機能に加え、基準振動解析の結果をグラフィックス表示するユーザーインターフェースについての報告が行われた。振動モードの視覚的理解等に大変有用であろう。分子の三次元構造の入力、特に、一般的な環構造や詳細なコンフォーメーションの規定等に問題が残されているようであるが、今後の発展を期待したい。

（呉羽化学工業　朝永　惇）

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

論理指向型と経験（情報）指向型の間に知識ベースを介在させた総合的な有機合成設計システムＡＩＰＨＯＳの開発も１９８７年以来新規合成経路の発見、そしてその実現性の評価の上での経路提案を目指してすでに４年経過している。

本システムＡＩＰＨＯＳの全体のスキーム、目標達成のstrategyは誠にorthodoxであらゆる可能性をコンピュータ上で想定させてというあたりはＣＨＥＭＩＣＳの手法そのものだが、分光学データに代わる知識ベースが反応スキーム評価のポイントとすれば、その自動生成に加えて有機化学者の経験にもとずく入力が鍵になる。今の処どの位合成設計全体を評価可能とする知識ベースが構成されているのか、今後の発展を期待したい。この種の目標達成のための全体構想、strategyの発表は学会、討論会などで他の分野でももっとあってもよいのではないか。

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・田岡科学・日本合成化学・日本触媒化学・積水化学・関化協）

船津公人・白石喜久・○西村拓朗・高橋由幸・是本敏宏・銅金巖・佐々木慎一

前の報告を受けて、ここでは本システムで最も重要な知識ベースについて少しく詳細が述べられた。

戦略部位を経験的観点から評価して、切断部位の制約、切断そのものの妥当性の判断をする一方、前駆体構造と標的構造についての抽出データから提案された経路が果して化学的経験からみて妥当かどうかを吟味し、さらに反応条件を提案するための、構造特徴をファイル化する知識ベースについて全体の構想が提示され、その中のファイル構造等が述べられた。

抽出された全反応スキームの評価のため評価モジュール、そして更に同時に起こる副反応をチェックする反応ランクテーブルの整備等々、反応予測の実用化へ向けての努力が示された。多数の人材の投入によるこのプロジェクトの今後の推移に注目したい。

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）
（呉羽化学工業）朝永惇

分子モデリングを議論する場合必要ないろいろの「分子構造処理プログラム」がライブラリーとして準備されると研究者にとっては大変都合がよい。本報告ではその一つとして分子内で構成される２面体角の正準化手続きを確立し、複数の可能なコンフォメーションについてはＭＭ２等によるエネルギー極小化の手続きで全安定配座を求めるプログラムが開発された事が報告され有用性が提示された。原子の数が多くなると計算時間も長く必要の都度計算するのは大変なので吟味して確認された分子についてはそれらの結果のデータベース化が実現されると、大変有難い。実務的な立場としては、その結果を足掛りにして次へ進めるので、ぜひ検討して戴きたい。

（筑波研究学園専門学校　仲久保正人）

27I12 化学物質の分解性の予測（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

近年問題になっている、残留農薬汚染に対する、重回帰分析の応用で、Charton のσ_Iにより、農薬の主成分になることが多い、カルバメート類の加水分解性に対して、農薬開発の際のスクリーニングには十分な精度の予測が出来たとしている。残された問題は、１）様々なイオン種や有機物が溶存している実際の環境中に当てはまるか？　２）（討論時にも意見があったが）STERIMOL パラメーター等を用いてより正確な予測は出来ないのか？　３）ＭＯパラメーター等を用いて、より多くの化合物にあてはめられないのか？　といったところだと思われる。特に、環境問題への応用に際しては、１）は、避けて通れない問題と思われ、本研究の今後の発展が期待される。

27I13 ＰＬＳ法によるノルボルナン類のＣ−１３ ＮＭＲ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、佐々木愼一

最近海外では比較的応用例の増えているＰＬＳ法だが、国内では、まだあまり普及していない。ごく最近、ＱＳＡＲ分野では、ＣｏＭＦＡ法を通じて、ようやく普及が始まったようである。筆者は、他の化学関連領域でももっと広く使われて然るべき、強力な手法だと思うのだが・・・　ここではＰＬＳ法を用いて、ノルボルナン類の^{13}Ｃ ＮＭＲシフトによる exo-endo 予測が行われている。興味深いのは、全シフト値を用いたときよりも、γ位の３つの値のみを用いたときの方が、クロスヴァリデーションによる説明分散が大きくなっていることで、演者によれば、C-2 の値も加えれば、より有効と予想しているということである。

ＰＬＳ法が広く使われ、様々なノウハウ、及び、汎用の（できればフリーウェアの）ソフトウェアが蓄積されることを希望してやまない。

2714　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、佐々木愼一

汎用のフィルムにも、最近では、ISO 1600 等というものが店頭にあり、感光材料の高感度化は更に進むと考えられ、その保存性が問題になっている。ここでは、主成分分析、ニューラルネット法等を用いて、カブリ抑制剤の構造特性相関が研究されており、一定の成果が得られているようである。今後の問題として当日も少しお伺いしたのだが、従属変数の設定で、カブリ抑制性と減感性を分離して考えられた方が、効果的な抑制剤の開発に、より有効であるのではないかという気がした。いずれにしろ、大変興味深い研究で、より一層の成果が期待できそうである。

（阪大薬　髙木達也）

28I 15　自由エネルギー摂動法における分子変換の新しい方法ー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

自由エネルギー摂動法計算における分子変換の道筋に関して、基底となる摂動ポテンシャルとカップリング・パラメーターを多重にとるという新しい方法を提案した。さらに、分子動力学計算プログラムKOPTを改修して、4原子モデル分子について試験計算を行い、有効性を確認した。今後具体的な応用例の発表を期待したい。

28I 16　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、松下中研）真崎規夫、○町田勝之輔、加道博行、横山和夫、任田隆夫

アスピリン単結晶の(001)および(100)へき開面の表面分子像を原子間力顕微鏡により観察し、(100)面におけるc-辷り面の消失の他は、格子面間隔、分子配列ともにバルクの結晶構造と大差ないことを確かめた。一原子で探針先端部を代表させ、簡単な非結合原子間ポテンシャルを用いて(001)表面像の等高線図をシミュレートし、実測図とほぼ一致する結果を得た。

（兵庫教育大　木原　寛）

２８Ｉ１７　拘束系分子動力学のための拘束条件入力方式
（富士通システムエンジニアリング、富士通）
○酒井広太、竹内宗孝、山本優子、福田育夫、三上益弘

拘束系の分子動力学法のための拘束条件の入力と解除の自動化をどの様に行うかというものである。拘束する分子内自由度は結合距離、結合角、二面角とし、この順番に自由度を制限するアルゴリズムを開発している。分子内自由度の凍結は動力学計算のための計算時間の大幅な短縮が可能となる。このシステムを利用して液晶の動力学の応用について述べられた。今後は具体的な応用例を沢山発表して欲しい。

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

対象とするタンパク質とホモロジーの高いタンパク質をＰＤＢやＮＢＲＦ等のデータベースから検索するシステムの開発をおこなった。ホモロジー値を基にしたクラスター分析やマルチアラインメントが行えるので保存性の高い部分のパターン化を行うことも可能である。エンジニアリング・ワーク・ステーションで十分高速に作動するとのことだが、他のシステムとの比較ができたら興味深いと思う。

（豊橋技科大　宮下芳勝）

28I19 核酸二重らせんおよび三重らせんのモデリング法

［東大薬］富岡伸夫，板井昭子

ヌクレオチド鎖のねじれ角χ，γ，ε，ζおよび糖５員環の疑回転角Ｐを自由度として核酸二重および三重らせんの立体構造を予測する新しいモデリング法の報告である．　計算は塩基対の設定，らせん単位の構築，周期構造最適化などを受け持ついくつかのプログラム単位により実行される．　注目するヌクレオチド単位の座標を入力すれば自動的に最適化構造が得られるようになっていて，使い易さに配慮が払われている．　ＡＭＢＥＲの力場と距離に逆比例する誘電率を用いて立体構造既知の二重らせんの安定構造を計算し，実験ときわめて良く一致する結果を得た．　予稿集中で用いられた術語「ab initio」の意味が慣行と異なるのではないかという指摘があった．

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

大腸菌に感染するバクテリオファージT7の遺伝子転写単位を取り上げ，その塩基配列中にコンセンサス配列と相同性の高い配列が出現する頻度を，χ^2分布より導かれるインデックスKsを用いて統計的に評価した研究である．　さきに行った大腸菌自身の場合と同様に相同性の高い配列の出現は全般的に抑制されているが，T7RNA ポリメラーゼの転写終末点を含むクラスIII 領域の３種のポリシストロニック転写単位では逆に頻度が高くなっていることが分かった．　この領域は，大腸菌RNA ポリメラーゼによってT7転写終結点を越える転写をひきおこすための相互作用部位と考えられる．　プロモータ活性とコンセンサス配列との類似性との相関関係には未だ不明の点が多いので，このような解析がより一層進むことが望まれる．

（京大薬　町田勝之輔）

28 I 21　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

本発表のハイライトは2つ。第一点は蛋白質内のポケット領域の探索システムの開発である。いわゆる cavity search は多くの方法が発表されているようであるが、演者らの方法はアルゴリズムとしては分かりやすい印象を受けた。第二点はポケット内の静電ポテンシャルのマッピング法である。ジヒドロ葉酸還元酵素について、演者らの方法によって得たポケット領域の静電マップと、リガンド分子表面の静電ポテンシャルの相補性を調べたところ、一部にそれが見出された。ひとつ気になったのは、演者らはマップを極座標系で表示していた点で、原点と軸方向の選択により、結果が影響されてしまう点である。相補性の評価法の開発を行って下さることを期待したい。

28 I 22　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

ネットワークを、教育を目的に、構成した実績についての発表。非定型な処理を行うためのネットワークの運営では、ユーザー各人の教育と、データやディスク空間の管理などが難かしいと想像されるが、その点について言及されなかった。ネットワークのチューニングについての、いくつかの工夫が述べられ、特に、ディスクの分割（パーティッション）についての指針は参考になった。

（キリンビール基盤技研　飯島　洋）

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

演えき的構造解析において同じ物質の似ていないスペクトル情報の活用を図り、演えき的構造解析で生じる解析の失敗についても回復できるとの発表があり、その実例がいくつか紹介された。

29I24 ゼオライト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

^{29}Si masnmr データよりゼオライト系三次元フレームワーク上でのSi、Al分配の推定を目的として、置換ノードマトリックス法による分配の全ての数え上げとシンプレックス法による重みの決定について報告があった。また、合成ゼオライトZK19とWの実測ｎｍｒスペクトルにこの方法を適用し可能な分配の重みが求められ、Dempsey 則を満たす分配が見い出されたとの報告もあわせて行なわれた。

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

反応形式の表現としての虚遷移構造より反応中心および隣接する原子の体系的分類を含めた情報とその間の結合情報で構成される二節部分グラフの定義とそれによる反応の検索についての報告があった。また、検索結果に含まれてくる可能性があるノイズを除くため三節部分グラフ、四節部分グラフの活用の意義についての討論も行なわれた。

２９Ｉ２６　反応情報システムFORTUNITS の開発

阿部英次氏と米田幸夫先生に続き評者もデータの入力方法の合理化に関する苦言を呈した。開発者の退場とともに廃れた多くの優れたシステムの轍を踏むことがないことを願うからである。このシステムの盛衰はわが国の他の独自の方法の出現／定着化に影響するという社会的な責任を自覚していただきたいと考える。

２９Ｉ２７　金属イオンの溶媒抽出データベースＳＥＤＡＴＡの開発

本システムは有用で、設計に工夫があり、維持の苦労もおありであろう。発表の場所を選べばもっと正当に評価されるであろう。

２９Ｉ２８　スペクトル情報の知識ベース化における一つの試み

ピーク肩の扱いに関して山本修先生とは議論が噛みあわなかったようである。さて、考え方が酷似しているシステムが過去になくもなかったので、知識ベース利用という点を強調なさるのかと思った。しかし、岡田孝氏、評者との質疑応答の内容から、独創性論議などからは超越した世界におられるのだ、と理解した。

（山形大工、工藤喜弘）

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（分子）藤田忠男

アスコルビン酸の配座をＲＨＦ／６－３１Ｇ＊とＰＭ３で解析し、Ｘ線構造に近いｅｘｔｅｎｄｅｄな構造が最安定であることが示された。ａｂ　ｉｎｉｔｉｏ法とＰＭ３の結果が合ったからといって正しい結果が得られたといえるのかといった点などについて質疑応答が行われた。

２９Ｉ３０　電子伝達系蛋白質の電子状態（関学大）中川博之、小山泰、岡田孝

アミノ酸配列の比較からｃｙｔｏｃｈｒｏｍｅ　ｃ分子内部での電子伝達経路を推定し、拡張ヒュッケル計算を行った結果から電子状態が議論された。分子軌道が重なっているからといって電子伝達が行われていると考えてよいのかといった点などについて質疑応答が行われた。

２９Ｉ３１　巨大次元行列の対角化について（分子研）長嶋雲兵

大規模行列の対角化における数値誤差の問題が論じられた。また行列を対角化せずに状態密度を計算する方法が示された。これまで小さな規模の分子のために作成された行列計算のプログラムを大規模な分子に適用すると誤差が莫大になるという結論は興味深いものであった。

（化技研）田辺和俊

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

色素水溶液のpHを変化させて吸収スペクトルを測定し、化学因子分析法による解析から平衡に関与する化学種の数、成分固有スペクトルおよび存在比を決定した。また、AM1法による最適化構造を用いてCNDO/S法により吸収極大の位置と強度を算出し、成分固有スペクトルと比較して各化学種の構造の推定を行った。溶液中の単離困難な化学種間の平衡の解析に、この手法が有望であることを示した。

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、お茶大理）○里見昌記、平野恒夫

Fock行列の中で、相互作用を表す、関係するAOの交差部分を0と置いてMNDO法による計算を行い、Through-Bond, Through-Space相互作用を定量化した。安息香酸およびスチレン置換体について、得られた両相互作用と置換基効果との相関を調べた。また、Edmiston-Ruedenbergの方法により、局在化軌道を求め、各結合の変化も調べた。

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、豊橋技科大）田辺和俊、○都築誠二、大澤映二

フラーレンのうち、構造が確定していないC_{76}, C_{84}の構造を予測するため、5,6,7員環から成り、できるだけ対称性が高いという条件のもとに候補構造を組立て、MM3とAM1により計算した生成熱を比較した。その結果、分子全体の形状が球形に近いほど、歪が少なく安定性が高いと結論した。また、C_{84}についてはTd構造が最も安定であると予測した。

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、クラグエヴァッツ大）○細矢治夫、I. Gutman

トポロジカル・インデックスのうち、メリフィールドーシモンズ・インデックスはＺ－インデックスとの間によい逆相関があることを、アルカンとカタ縮合ベンゼン系炭化水素の異性体の2系列について数値的に示した。さらに、この逆の相関関係が数学的にも一般的に成立することをグラフ理論的に示した。

（兵庫教育大　木原　寛）

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ーフェース ―――

（富士通、西肥情報サービス、富士通九州ＳＥ、富士通青森ＳＥ）

○並木武文、大谷正尚、山本優子、石戸橋真、三上益弘

ＣＯＭＤＥＰは計算材料設計のための分子動力学シミュレータパッケージである。前回の情報化学討会でこの研究グループはポテンシャル関数登録管理機能と初期配置の発生機能について報告している。今回は結果解析のサブシステムの機能がついた。このサブシステムでは熱力学的性質から分光学的諸量に至る７種類の性質を算出し表示することができる。さらにこのシステムのヒューマンインターフェースについても報告している。この発表から分子動力学の手法は実用的なレベルに近づいており計算材料設計において重要な役割を果たしていることがわかった。

２８Ｐ０６　分子動力学計算システムＧＲＯＭＯＳのＸ－Ｗｉｎｄｏｗによる入出力システム

（群馬大、衛試、アドイン研）○中田吉郎、神沼二真、五十嵐貴子、浜谷和彦、和田　暁

タンパク質と核酸の分子動力学計算を行うために、ＵＮＩＸのＸ－ｗｉｎｄｏｗを用いてＧＲＯＭＯＳシステムに多くの機能を付加した。それらの機能とはメニュー選択によるプログラムの実行、パラメータファイルの編集、分子の３次元表示等である。分子動力学の計算は現在のワークステーションではまだかなりの計算時間を要するが、今後ワークステーションの高速化により実用レベルに達すると思った。

２８Ｐ０７　数式処理を用い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

化学反応解析のための計算を自動化するために、すでにＬＩＳＰで開発したシステムを今回はさらにＲＥＤＵＣＥシステム上で稼働する様に移植した。ＲＥＤＵＣＥバージョンは２つのモードを持っている。代数モードでは数値解が求められ、記号モードでは反応の定性的な考察に重要な極限の式、符号の判定などが求められる。このシステムを振動反応の様な複雑な反応へ応用したら有効であろう。

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

ＭＮＤＯ法を用いて向精神薬イミプラミンの類縁体であるベンゾアゼピンとベンゾジアゼピンのメチル化に対する位置選択性の予測をおこなった。各原子上でのＨＯＭＯの電子密度を比較してメチル化のおこる位置を予測したが、これはCH_3I/NaHによるメチル化の実験結果と一致した。この様なヘテロ原子を含む化合物の位置選択性や立体選択性の研究にこのアプローチがどの程度予測可能かという問題は計算化学の分野の研究において重要な課題なのでチャレンジして欲しい。また同時に化学平衡や反応速度についても考察を加えてはと思う。

（豊橋技科大　宮下芳勝）

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］中野英彦，吉野輝雄，山名一成，三軒　斎

グラフィック画面上に描かれた化学構造式をパソコンネットワークを通じて転送可能とするための標準コード化の試みである．　コード化された記号列に対して縦および斜めのサム行を取ることにより，通信中のノイズ等によるエラーが，ブロック当り２行まで修復可能とするなどの細かい配慮が払われている．　通信時のプライバシー保護への対応について質疑がなされていた．

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

合成設計支援システムＫＡＳＰにおける反応規則の記述用語の意味を定義した辞書の構築法を示し，前報（第13回情報化学討論会28Ｉ05）で提示した構想の一つを具体化したものである．　このような辞書の作成は大変な手間を要すると思われるが，実現すれば，日常の会話に非常に近い形で利用できるエキスパートシステムの構築が可能となるので，その発展と他の分野への応用を期待したい．

28P11 ＣＨＥＭＩＣＳとスペクトルデータベースＳｐｅｃＩｎｆｏとの結合

［豊橋技科大，ＢＡＳＦ］船津公人，佐々木慎一，W. Fachinger, R. Neudert

予測機能を備えたスペクトルデータベースSpecInfoを自動有機化合物構造推定システムCHEMICS に結合して，演算時間の短縮と予測能力の向上を図った研究である．　両システムの特徴を生かして候補構造の大幅の絞り込みに成功している．　有機化学者の間に広く普及させてほしいものである．

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

鎖状および環状アルカン，アルケンおよび一部のアルキン類について，構成炭素原子のトポロジカルな環境記述インデックスを含む回帰式を用いて^{13}C-NMR の化学シフトを予測する試みである． それぞれの化合物のクラスについて相関係数0.9 以上の良い結果が得られている． さらにヘテロ原子を含む系への拡張が期待される．

（京大薬　町田勝之輔）

28P13 ファジィ推論による水温制御アルゴリズム

（お茶の水女大・理）○藤枝修子・田中志保

ただのガラスの箱に水を入れ、その水温を10^{-4}Kの精度で一定に保つという本発表は、予測できない複雑な外的環境の推論モデルの一つと言える。また、分析化学のための技術のひとつとしても本発表の価値がある。現実的に10^{-4}Kという高い精度を得るためには、メンバーシップ関数を装置に合わせて試行錯誤で決める等のノウハウも必要とされるらしい。

28P14 計算機統計学的手法の化学、薬学への応用(3) シフト検定法の正準判別分析法、回帰分析法への応用

（阪大・薬）○高木達也・北条典子・和田千佐・藤原英明

統計解析の知識に乏しい私にも、よく分かるような説明を行って下さった。ポスター発表の有難さである。重回帰分析や判別分析において、通常複数の記述子が用いられるが、当然のことながら、各々の記述子は有意性のあるものでなくてはならない。それを検定するためにシフト検定法（要旨図1のように、ある特定の記述子のデータを順番に「狂わせ」、それぞれの場合の分散比や判別係数を求め、狂わせる前のそれらよりも優れた値が「出てしまう」ことが多いならば、狂いを入れた記述子は有意でない。）が有効である。この手法はどのような回帰分析にも適応可能であり、特にニューラルネット法の検定に適しているのではないかとも考えているとのこと。

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法と総合評価

（化技研）○田辺和俊・田村禎夫　（ファコムハイタック）上坂博亨

ニューラルネット法というと、回帰分析を発想してしまう程、特に本討論会では、構造活性相関や二次構造予測などに適用されることが多い。本発表では、ニューラルネットの入力層は、5 cm^{-1}ごとのスペクトル強度を与えることで、赤外スペクトルのパターン認識に用い、中間層はスペクトルのカテゴリー分類、そして出力層は１つ１つのカテゴリーの中の個々のスペクトルの識別に用いている。つまりデータベースの検索も行っていることになる。ニューラルネット法の特徴を活用した明解な応用であると同時に、データベース高速検索システムの実用化でもあり、大変興味深かった。

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・鐘淵化学・塩野義製薬・ダイキン・関化協）

船津公人・上山　昇・守川壮一・○渡辺正道・根岸良夫・大橋武久・佐々木慎一

有機合成反応を独自にデータベース化している演者らのグループの活動については衆知のとうりである。本発表では立体化学が関与する反応（不斉ならび幾何異性の、発生、保持、逆転）の記述法が説明された。反応点の周囲の環境が大切であるが、今回の発表ではγ位までの不斉点が考慮されていた。自分達でデータベースを開発しているため、自在にデータ構造を変えることによって、今回のような機能追加で行なえる。

（キリンビール基盤技研　飯島　洋）

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・大阪市工研・ハリマ化成・山本化成・関化協）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

28P18　有機合成設計システムＡＩＰＨＯＳの開発（８）

（豊橋技科大・オリエント化学・鐘淵化学・住友化学・住友精化）船津公人、北村覚、千波誠、内田透、大江聡之、木村聡、大橋武久、佐々木慎一

いずれも、ＡＩＰＨＯＳに関する一連の研究で、前者は、合成標的として有意義な構造特徴認識による戦略部位の獲得を、後者は、反応情報 or 化合物データベースを検索するのに、プレスクリーニングすることによって、検索時間の大幅な削減を測ったものである。

単なる感想で恐縮だが、有機合成設計もここまできたかという感が強い。筆者が学生時代には、「いずれ有機合成設計システムができるだろう」と言っても、一笑にふされてしまったのだが、おそらくそう遠くない将来、私達は、「経験と勘」の助けなしに、有機合成設計をしているだろう。ＡＩＰＨＯＳを見ているとそうした想いを強くする。

28P19 Learning and Rule Control in the Information Base System for Organic Synthesis Research. （筑波大*、名大**）Zhong Qing Wang*, Naohiro Hayakawa**, Kazunori Yamaguchi*, Hiroyuki Kitagawa*, Nobuo Ohbo*, Yuzuru Fujiwara*

演者を初めとする多くの研究者の共同開発により開発が行われている、有機合成研究のための情報データベースシステム、ＣＯＲＥＳにおける、機械学習と反応規則制御に関する研究で、特に注目に値すべきなのは、インデックス情報と合成情報データベースを利用して、リンクの高速な自動生成を行っている点であろう。従来、人間が行っていた～複雑な系では、ほとんど実行不能に陥る～リンクが自動化すれば、この種のデータベースシステムの開発が、極めて容易になる。ＣＯＲＥＳの完成が期待される。

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

Shanon の情報理論による平均情報量を用いて化学構造式を数値化し、その数値の類似性をもって、化学構造式の類似性とした研究で、（少なくとも筆者にとって）大変興味深い。化学構造式の数値化は、これまでにも種々試みられているが、ここまで論理的に構築されている例は、そう多くはないように思う。実際の応用例では、人間には「何故これとこれが似ているのか？」と感じるものもいくつかあったが、その時使用された Index が目的に沿っているものであるなら、これは、人間の方が誤っているのかも知れない。データベースの運用時には、類似性の尺度に人間の主観を取り込む必要性がでてくるものと考えられるが、別方面への応用では、主観を排した分類により、人間の気づかない類似性を見つけることもできるような気がする。これは、類似性の尺度が論理的に構築されていなければ不可能なことである。今後の発展が期待される。

（阪大薬　高木達也）

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(3)
（日立計測・日立那珂）橋本正雄、佐久間晃子、篭渕　仁

有機化合物の^{1}Hおよび^{13}C-ＮＭＲスペクトルのパーソナルコンピュータによる検索同定システムの開発がほぼ終了し、実用化に関する問題点が検討されているとの報告があった。

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

２群の生物活性データから、結合サイトを推定するプログラム3D-corceが提案された。活用例として変異源性データの解析では複数の作用メカニズムに対応して幾つかのレセプターモデルが提案され、ＥＢＩ剤の解析結果は P-450結合サイトと矛盾しないとの報告もあった。

28P24 受容サイトにおける分子認識機構（ＶⅢ）　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

生体系で重要視されている糖鎖の分子認識機構を計算機上で解析するにあたり、リゾチームおよびリゾチーム変異体とその基質間における相互作用を分子力学を用いて評価した結果が報告された。実験で活性の向上が認められる変異体では、計算機上でも非結合相互作用の増加が見られるとの報告もあった。

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

平面的なインタカレータが挿入されたＤＮＡのモデリングを、分子力場計算なしに作成するこのシステムはエネルギー的に安定しているとは言い難いが、短時間で計算を終えるメリットがある。

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・ＣＳ室）戸澗一孔

球内残基数を用いて仮想的立体構造の妥当性を評価することで、アミノ酸配列から直接蛋白質の立体構造を予測する手法の報告があった。この中で、球内残基数で評価するとネイティブな構造と同等な球状の構造が数多く得られること、また単にコンパクトで疎水的残基が分子内部に集合するというだけの拘束条件では蛋白質の立体構造は十分に規定できないことが示された。

豊橋技科大　　船津公人

第１５回情報化学討論会（予告）

日　時：１９９２年（平成４年）１１月２５日（水）～２７日（金）　３日間
場　所：①京都大学薬学部記念講堂（一般講演）
②京都教育文化センター（特別講演およびポスターセッション）
［交通］①京阪電鉄丸太町駅下車　徒歩８分，　②　同左　徒歩４分.
京阪淀屋橋駅より特急45分，京阪三条にて普通または急行に乗換え，次の駅

なお，第２０回構造活性相関シンポジウムも同じ日程で上記会場②で開催されます.

世話人：町田勝之輔，多賀　徹（京大薬）
〒606　京都市左京区吉田　京都大学薬学部　電話075-753-4523（町田）
075-753-4533（多賀）
西岡孝明（京大化研）
〒611　宇治市五ケ庄　　京都大学化学研究所　電話0774-32-3111(2167)

■ 日本化学会 第63春季年会 プログラム抜粋
（詳細は"化学と工業"誌３号をご覧下さい）

B4 会 場
18号館 7教室

〔化学情報・計算機化学〕

３月28日 午前

座長 田辺 和俊（11：10〜12：00）

1Ｂ414 リッジ回帰分析の構造物性相関解析への適用（阪大薬）○高木達也・和田千佐・松村謙一・野田昭宏・小野澤学寿・藤原英明

1Ｂ415 PLS法によるエンケファリン類の定量的構造—活性相関（豊橋技科大）○酒井 誠・宮下芳勝・佐々木慎一

1Ｂ416 PLS法によるHMG-CoA還元酵素阻害剤の構造—活性相関（豊橋技科大・興和東京研）○白石厳悟・長谷川清・宮下芳勝・佐々木慎一

1Ｂ417 イオン交換ゼオライトによる分子ふるい過程のダイナミックスの連続視覚化（京大工）○久保百司・宮本 明・乾 智行

1Ｂ418 分子軌道計算結果のグラフィックス表示システムVISMO, GLCAOの開発と移植（阪大薬）○松村謙一・高木達也・野田昭宏・小野澤学寿・和田千佐・藤原英明

３月28日 午後

座長 工藤 喜弘（13：00〜14：00）

1Ｂ425* **部会ミニフォーラム** 研究開発とコンピューター(三菱化成システム総合セ) 八尾 徹

1Ｂ428* **部会ミニフォーラム** 化学研究支援—情報システム(化情協) 千原秀昭

座長 高木 達也（14：00〜14：50）

1Ｂ431 タンパク質主鎖のϕ-ψプロットにもとづく二面角クラスの検討（豊橋技科大）○神村基和・高橋由雅・佐々木慎一

1Ｂ432 ニューラルネットワークを利用した２成分系酸化物の酸発現影響因子の解析（愛知工大・名大工）○鬼頭繁治・服部 忠・村上雄一

1Ｂ433 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（11）官能基の推定（化技研・ファコムハイタック）○田辺和俊・田村禎夫・上坂博亨

1Ｂ434 有機合成設計システムCASINOの開発(15)天然物の逆合成例（化技研）○内丸忠文・田辺和俊・大内秋比古・小野修一郎

1Ｂ435 有機合成設計支援システムAIPHOSの開発（９）—前駆体発生プログラムの開発（豊橋技科大・東亜合成化学・小野薬品工業）船津公人○久米勝嘉・相田正之・西崎 稔・佐々木愼一

座長 鬼頭 繁治（14：50〜15：30）

1Ｂ436 自動構造推定システムCHEMICSにおける構造発生の効率化（豊橋技科大）○速水健一・船津公人・佐々木慎一

1Ｂ437 有機構造解析システムの中の解析手法ファイル（山形大工）工藤喜弘

1Ｂ438 有機化合物のIUPAC命名支援システムの開発III 名称—構造変換システム（豊橋技科大）○阿部英次・曽田健一・佐々木慎一

1Ｂ439 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・解析技術セ・応用生化学研）○朝尾正昭・清水 良・松本和男・西端芳彦・宮城島利一

座長 船津 公人（15：30〜16：30）

1Ｂ440* **部会ミニフォーラム** 化学の研究・教育のためのパソコンソフトの現状と流通（福井高専）吉村忠与志

1Ｂ443* **部会ミニフォーラム** 化学構造の整理と学習・類推（関学大情報処理セ）岡田 孝

座長 宮下 芳勝（16：30〜17：00）

1Ｂ446* **部会ミニフォーラム** 海洋における光学環境情報(東海大海洋) 千賀康弘

会期：平成４年３月28日（土）〜31日（火）
会場：近畿大学（東大阪市小若江3-4-1 ）

関連行事

日ーソコンピュータ化学シンポジウムについて

豊橋技術科学大学
阿部英次

標記シンポジウムの第４回が平成３年１０月２８－３０日に豊橋技術科学大学で開催された。

このシンポジウムは豊橋技術科学大学の佐々木慎一学長とソ連（独立国家共同体？）科学アカデミー・ノヴォシビルスク有機化学研究所のＶ．Ａ．Ｋｏｐｔｙｕｇ所長との話し合いから生まれたもので、両者の研究グループを中心としてコンピュータ化学の研究に関して日ソの交流を深めることが目的となっている。原則として２年に１回ノヴォシビルスクと豊橋で交互に開催することとし、第１回が１９８３年５月にシベリアの都市ノヴォシビルスクの郊外にあるアカデムゴルトクで開催された。ここは我国のつくば市のモデルとなった研究学園都市で科学アカデミーに属する２０以上の研究所とノヴォシビルスク大学からなるシベリア最大の研究センターである。その後、１９８５年に豊橋、１９８７年にアカデムゴルトクでそれぞれ開催され、第４回は１９８９年に予定されていたが双方の事情で２年遅れとなった。今回の開催にあたっては、激動のさなかでもありロシア側の参加者が果たして来日できるかどうかが非常に危惧されたが幸いにしてベロロシアのミンスクからの参加者を含めて９名の参加が得られ日本側の１６名とで無事シンポジウムを行うことができた。

ロシアのコンピュータ事情は、特にハードウェアに関しては日本に比べると格段に劣ってはいるが、ソフトウェアが主であるコンピュータ化学の分野における研究者の数と質は決して引けを取るものではない。今回の研究発表と彼らが持参したソフトウェアのデモンストレーションを通じてそのことが実感された。その一端は以下に示すシンポジウムのプログラムからもおわかり頂けると思う。

また余談ではあるが、筆者が深く関わっているデータベースの分野について言えば、ノヴォシビルスク有機化学研究所にスペクトルデータベースセンターが併設されており、精力的に各種データベースの構築を行っている。国外に如何に大きなデータベースがあって現在はアクセス可能であるとは言っても、何時それが出来なくなるかも知れないのだから独自のデータベースを持つことが重要であると言う彼らの言い分にはうなずけるものがある。欧米の多様なデータベースがお金さえあれば自由に検索できる日本に於いても、将来そのような事態が起こらないと言う保証はなにも無い。

クローズドな形で発足したシンポジウムではあるが、参加者に特に制限をもうけている訳ではないので多くの方々に参加頂きたいというのが主催者側の希望である。今回はご承知のような事情で直前まで開催できるかどうかが不明であったためアナウンスが出来なかったが、２年後あるいは４年後には事態が好転していることを期待している。

1. A System for Structure Elucidation of Organic Compounds on the Basis of Multi-Spectral Database. Its Present and Future.
K. S. Lebedev
Novosibirsk Institute for Organic Chemistry

2. New Tendencies in the NMR Spectroscopy and their Possible Applications to the Design of Computerized Systems for Structure Elucidation of Unknowns.
V. I. Mamatyuk and G. Salnikov
Novosibirsk Institute for Organic Chemistry

3. Multidimensional NMR and its Application to Structural Analysis.
A. Okada
Sumitomo Chemical Industry

4. Efficient Algorithms of Structure Elucidation by Molecular Spectra.
V. M. Tormyshev
Novosibirsk State University

5. Application of the New Chemical Structure Representation Based on the Complete Set of Fragments to Fast Substructure Search and Classification.
V. M. Piottukh-Peletsky, A. K. Rumyantsev and V. I. Smirnov
Novosibirsk Institute for Organic Chemistry

6. Partial Least Squares Modeling of Multivariate Activity Data.
Y. Miyashita
Toyohashi University of Technology

7. Design and Optimization of Chemical Experimentation with the SPECTRE.
H. Katsumi
Sumitomo Chemical Industry

8. Synthesis of a New Carboxylic Acid by Catalytic Hydrogenation of Sodium Santonate and Prediction of the Formation Mechanism by MM2 Calculation.
J. Ishiyama
Tohoku University

9. MODISP: Graphic Program to Display the Results of Molecular Orbital Calculations.
Y. Kurita
Sumitomo Chemical Industry

10. Evaluation of Solvation Energy by Continuum Medium Theory. A Progress Report.
Gogonea Valentin and Eiji Osawa
Toyohashi University of Technology

11. The 'SPECTROCHEMEXPERT' PC Computer System for Personal Usage.
V. P. Suboch, G. P. Gurinovitch and A. P. Pavlova
Institute of Physics, Academy of Sciences of the BSSR

12. Recent Advances in the Structure Elucidation System, CHEMICS.
K. Funatsu
Toyohashi University of Technology

13. RASTR-PC: A New Version of an Expert System for Structure Elucidation of Molecules by Their Spectra.
M. E. Elyashberg
All-Union Research Institute of Organic Synthesis

14. Organic Structure Elucidation System of Experts, by Experts, for Experts: PASEOS. Preprocessing of Spectral Information.
Y. Kudo
Yamagata University

15. Computer-aided Methodology of Structural Problems Solution by a Spectral Data Set.
M. I. Podgornaya and G. G. Balakina
Novosibirsk Institute for Organic Chemistry

16. Computer-aided Molecular Formula Determination from Mass, ^{1}H- and ^{13}C-NMR Spectra Using Databases.
B. G. Derendyaev
Novosibirsk Institute for Organic Chemistry

17. Chemical Structure Coding Based on Graph and Information Theories.
T. Okuyama
Toyohashi University of Technology

18. A Method for Finding the Maximal or Close to Maximal Common Structural Fragments of Molecular Structure Graphs.
A. B. Gryzunov and V. A. Kokhov
Moscow Power Engineering Institute

19. SPECTRA: A Spectral Information Management System for Organic Compounds.
H. Masui
Sumitomo Chemical Industry

20. Automated IUPAC Naming Program for Organic Compounds.
H. Abe, S. Takahashi and S. Sasaki
Toyohashi University of Technology

21. The Organic Reactions Database on PC. As a Tool for Chemists.
M. V. Koshelev, T. I. Guseva and V. I. Smirnov
Novosibirsk Scientific Technical Center for Chemical Informatics

22. Automatic Identification of Candidate Ligand Receptor Sites in Proteins. Their Role in Drug Design Processes.
C. A. Del Carpio, Y. Takahashi and S. Sasaki
Toyohashi University of Technology

23. Automatic Recognition of Common Structural Features among Chemical Compounds Using Reduced Structure Representation Based on Functional Groups.
Y. Takahashi, M. Sukekawa and S. Sasaki
Toyohashi University of Technology

24. Methods, Algorithms and Programs for Analysis of Molecular Graphs Similarity.
V. A. Kokhov
Moscow Power Engineering Institute

「化学ソフトウェア学会」設立記念会

化学ＰＣ研究会が，結成十年目にして，化学ソフトウェア学会として改組・設立することとなりました。この度，学会設立を記念して，下記の日程で記念会を開催することになりましたので，是非，ご参加をお願い致します。

日時　　平成４年５月９日（土）　午後１時より４時
場所　　東京大学山上会館（〒113東京都文京区本郷7-3-1，TEL03-3812-2111ex2320）
　　　　（地下鉄丸の内線本郷三丁目下車赤門入る）
参加費　無料
懇親会　記念会の後，同所において懇親会を開催します。
　　　　会費は，3,000円の予定です。

記念会　式次第（予定）

１．経過報告　　下沢　隆（会長，埼玉大学理学部化学科教授）
２．祝辞と記念講演
　(1)　佐々木　慎一　（豊橋技術科学大学学長）
　(2)　山極　　隆　　（文部省初中局主任視学官）
　(3)　田隅　　三生　（東京大学理学部化学科教授）
３．学会活動について

参加申込　準備の都合上，設立記念会への出席を葉書で事務局まで４月１５日までにご連絡下さい。

連絡先　〒916 鯖江市下司町 福井高専内
　　「化学ソフトウェア学会」設立準備委員会
　　事務局　　吉村　忠与志
　（ＴＥＬ　０７７８－６２－１１１１ ex４５８）
　（ＦＡＸ　０７７８－６２－１１０８）

海 外 動 向

MEETINGS

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).

12-14 February 1992.
Supercomputing Europe '92.
Paris FRANCE.
Contact: Marjolein Jocobs, Royal Dutch Fairs, P. O. Box 8500, 3503 RM Utrecht, The Netherlands(31-30-955-662 ; FAX:31-30-955-539).

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).

28 March-2 April 1993.
205th ACS National Meeting.
Denver, CO.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

August, 1993.
Gordon Conference on QSAR.
Tilton, NH.
Contact: Alexander M.Cruikshank, Gordon Research Conferences, Gordon Research Center, University of Rhode Island, Kingston, RI 02881-0801(401-783-4011;FAX:401-783-7644)
22-27 August 1993.
206th ACS National Meeting.
Chicago, IL.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

文献紹介

〔論文紹介〕

分子設計文献抄訳

分子設計支援システムの構築について興味深い例がAIChE Journal に報告されていたので、その内容の要旨を紹介する。

A Group Contribution Approach to Computer Aided Molecular Design

R. Gani et al., AIChE J., 37, 1318(1991)

グループ寄与法は化合物およびその混合物の物性を予測する手法として、化学工学の分野では盛んに用いられている。この手法は、分子を機能を持った原子団に分割し、それらの寄与の和としてその物性を予測する、という方法を用いている。このため、分子設計へ応用する場合には、目的とする物性を持つ分子もしくはその混合物が直接予測できるのではなく、最終的な分子を構成する種々の原子団のセットが予測できるだけであり、これらの原子団の組み合わせからなる異性体の中から、最適な物質を選択する必要がある。この異性体の数が莫大な数になることが、この方法の最大の問題点である。

この問題を解決し、目的とする物性を持つ物質をデザインするために、筆者らは以下のような４個のステップより構成されるプロセスを用いている。

ステップ１　：　目的とする物性を判別し原子団の予備選択を行う。原子団は例えばＵＮＩＦＡＣのものを用いることができる。予備選択には知識ベースシステムを適用することで、できる限り選択する原子団の数を減らす。

ステップ２　：　ステップ１で得られた原子団を組み合わせ、現実に存在し得る化合物群を導出する。ここでは、純物質だけでは無く、混合物も対象として認める。また、５種類の制限条件を用いることで、得られる組み合わせの数を減らしている。

ステップ３　：　ステップ２で得られた化合物の物性を予測し、それが目的とする物性を満足しているかどうかチェックする。ここで、ある純物質が条件を満足しない場合は、それを含む混合物も評価の対象から除外する。

ステップ４　：　ステップ３で残った化合物群の中から最適なものを選択する。この際、目的とする物性値に応じて異なった指標を導入する。

このシステムは知識ベース、化合物導出システム、物性値予測システムおよび化学プロセスシミュレーションシステムから構成され、ＨＰ９０００ワークステーション上で稼働している。

また、このシステムを液液抽出用溶媒やガス吸収用溶媒のデザインに適用したところ、良好な結果を得ることができた。

十河　信二（三井東圧化学）

〔コンテンツリスト〕

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

VOLUME 8 (1991) No. 1-3

Published October 1991

CONTENTS

Contents continued on page 3 of cover

CONTENTS (continued from page 4 of cover)

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

VOLUME 8 (1991) No. 4

Published October 1991

CONTENTS

JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN

Volume 5 Number 5 October 1991

Contents

Cover design

The electrostatic environment of porphyrin at a grid resolution of 1 Å. The calculations were done using the COSMIC force field and include the charge distribution modifications of Sanders and Hunter [Hunter, C.A. and Sanders, J.K.M., J.Am. Chem. Soc., 112 (1990) 5525-5535]. Photograph courtesy of J.G. Vinter, University of Cambridge, U.K.

Journal of
MOLECULAR GRAPHICS

Volume 9
Number 4
December 1991

JMGRDV 9(4) 201–264 (1991)
ISSN 0263–7855

Published in association with the Molecular Graphics Society

Journal of Molecular Graphics is a quarterly update of the latest international developments in computer-aided molecular design.

Assistant Editor
Rebecca H. Hale

Journals Manager
Susan L. Patterson

Publishing Director
Chris J. Rawlins

This journal is listed in *Current Contents, Chemical Abstracts, Computer and Information Systems Abstracts Journal* and *Science Citation Index*.

ISSN 0931-8771
QSARDI
10(3) 191 – 288 (1991)

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

Including Molecular Modelling
and Applications of Computer Graphics
in Pharmacology, Chemistry and Biology

Contents

ISSN 0931-8771
QSARDI
10(4) 289–428 (1991)

QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS

Including Molecular Modelling and Applications of Computer Graphics

Contents

Journal of
Computational Chemistry

VOLUME 12 / NUMBER 9 / NOVEMBER 1991

Journal of
Computational Chemistry

VOLUME 12 / NUMBER 10 / DECEMBER 1991

Continued on next page

Journal of
Computational Chemistry

VOLUME 13 / NUMBER 1 / JAN/FEB 1992

Journal of
Chemical Information and Computer Sciences®

Volume 31, November 1991 JCISD8 31(4) 439–586 (1991)
ISSN 0095-2338

TABLE OF CONTENTS

Papers from the April 1991 Symposium on Computer Retrieval of Polymer Information

■ Supplementary material for this paper is available separately (consult the masthead page for ordering information); all supplementary material except structure factor tables will also appear following the paper in the microfilm edition of this journal.

* In papers with more than one author, the asterisk indicates the name of the author to whom inquiries about the paper should be addressed.

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

☐ July 1991, Vol.68, No.7

The Chemical Information Instructor: Information Sources for Organic Chemistry ,1,
Arleen Somerville, p.553.

Computer Series, 127: The Use of Desktop Molecular Modeler Software in the Teaching of Structural Chemistry,
S.Aduldecha, P.Akhter, P.Field, P.Nagle, E.O'Sullivan, K.O'Connor, and B.J.Hathaway, p.576.

Journal of Chemical Education: Software: Abstract of Volume ⅢC, Number 2, p.587.

☐ Aug. 1991, Vol.68, No.8

Computer Series,128 ,
edited by James P. Birk, p.659.

☐ Sep. 1991, Vol.68, No.9

Computer Series,129: A Basic Program for Computing Reactant Combinations from Approximate Elemental Analysis Data,
Udayampalayam P. Senthikumar, Rajagopalan Vijayalakshmi, and Ramasubbu Jeyaraman, p.773.

Journal of Chemical Education: Software: Abstract of Volume ⅣB, Number 2, p.781.

☐ Oct. 1991, Vol.68, No.10

Computer Series,130: Computer Interfacing: A New Look at Acid-Base Titrations,
John R.Amend, Kathleen A. Tucker, and Ronald P. Furstenau, p.857.

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 10, Number 2
March 1992

目　　　次

第５回情報化学夏期セミナー
－情報化学・基礎と応用－

主催　日本化学会情報化学部会

日　時　　１９９２年８月２６日（水）～２７日（木）［１泊２日］
会　場　　赤穂ハイツ（兵庫県赤穂市尾崎字向山２４７０－６４、電話07914-8-8935）
［交通］　　山陽新幹線相生駅にて赤穂線に乗り換え、播州赤穂駅下車、車で１５分。
（なお、人数がまとまれば、赤穂駅まで送迎バスを出してもらえますので、申込書に送迎バス利用希望の有無を記入してください）

参加申込締切　７月１１日（土）　但し定員（５０名）に達し次第締め切ります。

プログラム
第１日（８月２６日）
午後

１	化学構造知識ベースの構成	（関学大）	岡田　孝
２	分子力学計算法の基礎	（京大・理）	今城　文雄
３	分子軌道計算法の基礎	（兵教大）	木原　寛
４	分子グラフィックス	（システム）	伊賀　祐一

夕食後
　フリートーキング

第２日（８月２７日）
午前

５	コンピュータを用いた農薬のデザイン	（住友化学）	高山　千代蔵
６	蛋白質工学における蛋白質設計	（蛋白工学研）	中村　春木

参加費（資料代・宿泊費・２６日夕食から２７日朝食までの食事代を含む）
部会員（法人会員の場合２名までを部会員扱いとする）１８，０００円
一般　２５，０００円
学生　１０，０００円

参加申込方法
葉書に「第５回情報化学夏期セミナー申込」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、（もしあれば）FAX番号、(5)送迎バス利用希望の有無を明記して下記までお申込みください。会場の詳細な案内ならびに参加費支払方法は、申込受付後お知らせいたします。

申込先・問合せ先
〒６７１－２２　姫路市書写２１６７　姫路工業大学工学部応用化学科　中野英彦
電話　0792-66-1661　内線（325），FAX 0792-66-8868

化学におけるパソコン利用講習会
－モデリングとシミュレーション－

主　催：日本化学会関東支部
協　賛：日本化学会情報化学部会

開催日　平成4年7月9日（木），10日（金）
会　場　7月9日（木）13時～17時　講義：日本化学会7Fホール（千代田区神田駿河台1－5）
　　7月10日（金）10時～17時　実習：JRパソコンステーション上野（JR上野駅内）
募集人員　60名（先着順）。なお、講義のみ参加（先着50名）もお受け致します。
趣　旨　パーソナルコンピューターは、化学分野でも広範囲に利用されており、複雑な計算や図形処理もかなり簡単に行われています。分子モデリングはその一例です。今回とりあげました分子動力学（Molecular Dynamics,MD）もその一翼をになうもので、分子（原子）間の相互作用とそれに由来する分子（原子）の運動を取り扱い、系の物性の予測へと発展させるものですこの手法は、将来的には、新材料・新素材の開発研究に必須となるものと考えられていますので、多数の方々のご参加をお待ちしております。

内　容

講　義：7月9日（木）13：00～17：00

分子動力学（Molecular Dynamics, MD）
東京工業大学大学院総合理工学研究科　教授　岡田　勲　氏

（i）MDの原理
（ii）MDのアルゴリズム
（iii）分子間相互作用
（iv）MDのビデオ映写
（v）MDの応用

実　習：7月10日（金）10：00～17：00

NEC・PC－9801RA2（32ビット）による実習（2名で1台使用します）
東京工業大学大学院総合理工学研究科　教授　岡田　勲　氏
東京工業大学大学院総合理工学研究科　文部技官　巾崎　潤子　氏

（i）液体アルゴン
（ii）アルカリケイ酸塩の結晶とガラス
（iii）水

ご利用になりましたソフトおよびデータは、一部を除いてフロッピーディスクでお持ち帰り頂けます。

参考書　岡田　勲、大沢映二編『分子シミュレーション入門』海文堂出版（1989）

参加費　講義・実習参加者（テキスト・フロッピー含む）：
　　会員（情報化学部会員含む）30，000円、学生20，000円、非会員50，000円
講義のみ参加者（テキスト含む）：
　　会員（情報化学部会員含む）　5，000円、学生　3，000円、非会員10，000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、会員扱いと致します。

参加申込方法　FAX、ハガキまたは適当な用紙に『化学におけるパソコン利用講習会参加申込書』と標記し、1)氏名、2)年齢、3)勤務先と部署名（役職名）、4)会員種別〔会員（会員番号）・情報化学部会員・学生・非会員・法人会員〕、5)連絡先（郵便番号・所在地・勤務先か自宅かの別）、6)参加費金額、7)参加費支払方法（①当日持参、②現金書留、③銀行振込）を明記のうえ下記宛お申込み下さい（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（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）の場合は、事務処理円滑化のため、振込依頼書に参加者の個人氏名を明記して下さい（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。また、領収書は当日お渡し致します。

申込先　〒101　東京都千代田区神田駿河台1－5　日本化学会関東支部　講習会係
電話（03）3292－6163　／　FAX（03）3292－6318

ご掲示願います

部会記事

平成４年度 情報化学部会 役員

日本化学会情報化学部会

〔部会長〕	大澤　映二	豊橋技科大工
〔副部会長〕	吉田　元二	住友化学筑波研
	町田勝之輔	京大薬
〔幹　事〕	相島　鐵郎	キッコーマン
	荒木　啓介	ＪＩＣＳＴ
	飯塚　　健	群馬大教育
	板井　昭子	東大薬
	梅山　秀明	北里大薬
	岡田　　孝	関西学院大情報研セ
	奥山　　徹	豊橋技科大
	柏木　　浩	九工大
	神谷　和秀	武田薬品
	上森まり子	紀伊國屋
	河村　雄行	北大理
	鬼頭　繁治	愛知工大工
	吉良　満夫	東北大理
	小出　昭夫	日本ＩＢＭ東京基礎研
	佐藤　明子	化情協
	中馬　　寛	呉羽化学生物医学研
	中野　英彦	姫路工業大
	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
	服部　　忠	名大工
	張ヶ谷泰二	エーザイつくば研
	平野　恒夫	お茶の水女大理
	深澤　義正	広島大理
	藤田　真作	富士フイルム足柄研
	細矢　治夫	お茶の水女大理
	宮下　芳勝	豊橋技科大
	山崎　　昶	電通大電子
	山田　明文	長岡技科大工
	四居　靖彦	第一製薬中研
〔監　査〕	米田　幸夫	東海大開発研
	藤原　　譲	筑波大電子情報

以上

ＯＭＬ（OXFORD MOLECULAR社）ソフトウェアの概要

（株）東レシステムセンター
取締役　田島　邦生

１．はじめに

このたび英国ＯＭＬ製品について皆様にご紹介する機会をいただきました。
ＯＭＬからリリースされている製品のいくつかは既に日本でもご紹介済みですが、この場をお借りしてＯＭＬの生い立ちやＣＣＳへの取組み姿勢などについてご紹介いたします。

２．組織の沿革

ＯＭＬは、英国オックスフォード大学が優れた学術成果を広く世界に提供する目的で、同大学史上初めて設立した技術移転機構です。
オックスフォード大学では、６０年代の後期にいち早くＣＣＳ技術を開発し、それ以降英国の研究者がＣＣＳ技術の国際的リーダーの一翼を担っていたことは皆様ご承知のとおりです。このような土壌を持つ同大学がＣＣＳの技術移転に特化し、１９８９年に設立したのがＯＭＬで、同大学はＯＭＬに３０％の出資をしています。

２－（1）　ＯＭＬの目標

ＯＭＬが常に強調していることは、state-of-the-art-software を提供するということです。state-of-the-art computer program と表現していないところが注目点です。
つまり、ＯＭＬは、オックスフォード大学内の研究成果に止まらず、広く世界の優れた研究拠点から最も先進科学的なプログラムと科学的アドバイスを含むサービスを提供すると宣言しています。

２－（2）　ＯＭＬの役割

では、アカデミアや先進的な研究拠点で開発されたＣＣＳ技術を他に移転する場面でＯＭＬはどんな役割を演じようとしているのでしょうか。
それにはまず、アカデミックソースのＣＣＳ技術がなかなか広く世間の脚光を浴びない原因を考えてみる必要があります。その原因は大きく二つに整理されます。
一つは、アカデミックフィールドの研究者に開発されたプログラムは自己目的型で作成されるため、通常第三者の利便に供することなど殆ど顧慮されていません。従ってそのプログラムの価値が妥当に評価される機会も極めて希です。

二つ目は、同根の原因に発することですが、アカデミアの開発者やその直接的共同研究者が非常に効果的に使えるプログラムも産業界の研究者の要求には合わないことがしばしばあります。それは、そのプログラムの信頼性に欠陥があったり、マニュアルが不完全であったり、恐ろしく使い勝手が悪いということがある他に、場合によってはコンピューターシステムの一般的な規約からはずれて作成されていることに起因しています。ＯＭＬは、この二つの原因を解消し、アカデミアと産業界の間にＣＣＳ技術の活発な流通を図ることを自己の役割だとしています。

この役割を遂行するために、アカデミックソースのプログラムを対象に、イ．厳密なプログラミング規約の適用　ロ．プログラムの信頼性改善　ハ．使い勝手向上のためのプログラム・チューニング　ニ．解り易いマニュアルの作成　等の（いわば）商品化作業を進め、他方ではアカデミアのプログラム開発者への支援にも力を入れています。

３．組織を支える人達

ＯＭＬ製品の大きな特長として、ＯＭＬからリリースされるプログラムは化学者が自らの研究の為に開発したものがオリジナルになっているということと、組織を支えている人達が化学の研究者としてのバックグラウンドを持っていることが挙げられます。ここに代表的人物をご紹介します。

取締役　ＧＲＡＨＡＭ　ＲＩＣＨＡＲＤＳ　ＭＡ　ＤＰｈｉｌ

- オ大講師、ブレイズノーズ・カレッジのフェロー
- ＩＣＩ、BEECHAM 製薬、ブリティッシュ・バイオテクノロジー社の研究コンサルタント
- J. Mol. Graph. の編集者

ＤＲ．ＲＩＣＨＡＲＤＳの著作は多数ありますが代表的なものとしては、

Quantum Pharmacology, published by Butterworths
Computer-Aided Molecular Design (Editor)
Ab initio Calculations for Chemists, published by Oxford University Press

などがあり、日本語訳本としても次の二冊が出版されています。

「量子薬理学」　地人書館刊
「化学のすすめ」紀伊国屋書店刊

余談ですが、ＤＲ．ＲＩＣＨＡＲＤＳはサッチャー前首相と同期生です。

社　長　ＴＯＮＹ　ＭＡＲＣＨＩＮＧＴＯＮ　ＭＡ　ＤＰｈｉｌ

- オ大ブレイズノーズ・カレッジで化学を専攻、物理化学研を経てＩＣＩに入社
- ＩＣＩで農業用殺菌剤の開発に従事

取締役　ＴＯＮＹ　ＲＥＥＳ　ＭＡ　ＤＰｈｉｌ

- オ大クライストチャーチ・カレッジの生物物理学講師を務めた後、チバガイギーの首席研究員を経験
- 現在、バース大の生物物理学教授を兼務

この他にＯＭＬは社外に専門アドバイザー組織（２０人で構成）を持ち、その主要メンバーとして下記の人が参画しています。

ＤＲ　ＰＥＴＥＲ　ＫＯＬＬＭＡＮ
University of California, Computer Graphics Lab, School of Pharmacy.

ＰＲＯＦＥＳＳＯＲ　ＴＯＮＹ　ＮＯＲＴＨ
University of Leeds, Department of Biochemistry and Molecular Biology.

ＰＲＯＦＥＳＳＯＲ　ＪＡＮＥＴ　ＴＨＯＲＮＴＯＮ
University College London, Biomolecular Structure & Modelling Unit.

４．ＯＭＬの製品について

本誌９１年１１月号（Volume9, Number8）の１５ページに，日本でリリース済みのＯＭＬ製品について簡単に紹介されています。これらの製品の詳細につきましては、いずれ機会をいただきご紹介することにして、ここでは、製品が完成し日本市場への正式リリースを検討中の６製品を簡単にご紹介します。

Python

データ処理（表作成）、統計処理、表示機能が全て一つのシステムでできる構造活性相関プログラムです。特長としては、①置換基の特性や構造についてのデータベースを完備していること（約２７０種の置換基のHanschとLeo の公開データ）②テーブルエディターがLotus のように簡単であること③複数の統計学的手法をサポートしていることが挙げられます。

Anaconda

２分子の表面状態を比較しグラフィカルに表示するプログラムです。'Gromonic projection' 手法により、分子を球状に写し出し色分けします。あらかじめ、２分子の全表面を計算し、最も似ている位置をみつけることもできます。

Serratus

蛋白質シーケンスデータベースおよび検索システムのプログラムです。NBRF-PIR, SWISSPROT, Gen Bankなど複数のシーケンスデータベースの重複をなくしてデータベース化したものです。検索システムは簡単で、同一シーケンスの検索だけでなく、ファジー検索もできます。ホモロジー検索、モチーフ検索も行えます。

Iditis

蛋白質の三次元構造データベースProtein Data Bank (PDB)をリレーショナルデータベース化したものです。２０分野以上（結晶データ、Ｓ－Ｓ結合データ、超二次元構造データetc.）の情報がテーブルにより管理されています。検索はＳＱＬ（Structure Query Language）を使用し簡単で速く、モチーフ検索やファジー検索も可能です。

Rattler

半経験的な量子計算プログラムより分子の静電ポテンシャルと原子の部分電荷を高速に精度よく計算できるプログラムです。オプションには１０個までの立体配座から平均的な静電ポテンシャルを計算するものがあります。

Antibody Modelling

抗体分子の可変領域の構造を予測するプログラムです。このプログラムの特長は、超可変領域（ＣＤＲ）の中でも特に困難なＨ３の予測を①ＣＤＲのループに高次構造が類似化したものをすべて抽出しデータベースとして用い②コンフォメーション検索を行い③エネルギー計算をするという手法をとっています。

５．おわりに

以上のように、ＯＭＬのソフトウェアはアカデミアや先進的な研究拠点で開発されたものを製品化したものであり、非常に興味深い発想に溢れています。

詳しい内容をお知りになりたい方は下記までお問合せ下さい。

〔お問合先：（株）東レシステムセンター　営業部　電話０３－３２４５－５００６〕

MEETINGS

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).

12-14 February 1992.
Supercomputing Europe '92.
Paris FRANCE.
Contact: Marjolein Jocobs, Royal Dutch Fairs, P. O. Box 8500, 3503 RM Utrecht, The Netherlands(31-30-955-662 ; FAX:31-30-955-539).

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).

28 March-2 April 1993.
205th ACS National Meeting.
Denver, CO.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

August, 1993.
Gordon Conference on QSAR.
Tilton, NH.
Contact: Alexander M.Cruikshank, Gordon Research Conferences, Gordon Research Center, University of Rhode Island, Kingston, RI 02881-0801(401-783-4011;FAX:401-783-7644)
22-27 August 1993.
206th ACS National Meeting.
Chicago, IL.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

文 献 紹 介

〔コンテンツリスト〕

JOURNAL OF

CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

VOL. 32 JAN 1992

■ Supplementary material for this paper is available separately (consult the masthead page for ordering information); all supplementary material except structure factor tables will also appear following the paper in the microfilm edition of this journal.

* In papers with more than one author, the asterisk indicates the name of the author to whom inquiries about the paper should be addressed.

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

VOLUME 9 (1992) No. 1

Published February 1992

CONTENTS

computers & chemistry An International Journal

Contents

Vol. 16, No. 1, 1992

contents—*continued from outside back cover]*

ISSN 0913-3747

CICSJ Bulletin

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

情報化学教育　特集号

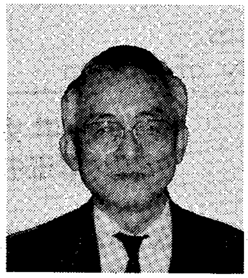
日本化学会
情報化学部会

Volume 10, Number 3
May 1992

目　　次

部会記事

情報化学部会の新しい問題



豊橋技術科学大学　大澤映二

平成４年度から情報化学部会長を勤めさせて頂くことになった。このところ身辺多事を極めていて、あまり時間を割くことはできないから困ったと思っていたところ、案の定大変な問題を抱え込んでしまった。この場を借りて部会員の皆様にまず説明しておきたい。

前部会長の藤原譲先生からの申し送り事項が一つだけあった。それは部会員数が停滞しているので伸ばすようにとの事であった。始めの内はあまり気に止めなかったが、去る５月１８日に日本化学会で開かれた平成４年度第一回部会長会議で早速この問題に出くわした。最新の資料によると個人会員５８０名、法人会員９６社、合計６７６で、これらの指標は総合的に見て三部会中最低である。日本化学会側からは、とりあえず１、０００名を目標に努力せよとの指示を頂いたが、いろいろとお話を聞いて行くと、じつは日本化学会自体に問題山積で、数さえ増やせば良いというような単純な話ではないことが解ってきた。

既に平成３年度の日本化学会研究委員会では、年会をシンポジウム形式に変えるばかりでなく、日化そのものを部会、討論会、研究会のような専門家グループの集団へと転換する方針を決定し、これは平成４年度に改組された研究外務委員会へ引き継がれた。この動きは学会本来の目的である研究活動の活性化という大義名分以外に、重大な財政危機に直面して、これまでの大学の先生中心の同好会的な性格から脱皮し、企業と一体となった化学研究開発学会へと変身する事によって乗り切ろうとする決意の現れと受けとめられる。

となると、折角居心地の良い少数派の寄り合いを作って、数少ない部会の一つだと安心していたのに、そのうちに次々と強力な部会が出来てきて、うっかりしていると押しつぶされかねない。つまり、部会は厳しい独立採算性を強いられた上に赤字補填の手伝いをさせられる筈だから、あまりにも小さな部会は財政的に成り立たないだろう。このような背景を踏まえて会員増強問題を考え直す必要がある。

会員数はここ数年来現在のレベルに停滞しているが、その原因は何だろうか？

ここで武田薬品（株）の神谷氏が本号に書かれた文章を参考にしてみたい〔1〕。同氏はコンピュータの性能向上とダウンサイジングが進み、企業内でコンピュータ利用が普及して誰でも使えるようになったのはよいが、その結果としてコンピュータの専門家としての情報化学者の活躍の場が狭くなったと述べている。先日来日したIndiana-Purdue大学のK. B. Lipkowitz教授もアメリカ化学会のコンピュータ化学部門が不振なのは、コンピュータ化学が普及して啓蒙活動の役割が終わったのが原因であると言っていたのと軌を一にしている。すなわち、情報化学がもてはやされたのは、コンピュータの使い方を教えて貰う為であったので、情報化学そのものを研究の対象としたい人はそれほど多くないということらしい。そうであれば、このままいくら笛を吹いても会員の数が増えるとは考えられない。

それでは、どうしたら良いのだろうか？実は一つの可能性が既に明示されている。それは、本誌が最近行ったアンケート「２１世紀の情報化学の重要テーマと実現時期」に対する本部会会員の回答結果である。お茶大平野先生が指摘されたように〔２〕、元々ほとんどのテーマが化学情報関連ではなく計算化学分野のものであった上に、主要な実現期待テーマ１１件中９件までが計算化学関連であった。本部会会員の間でさえも計算化学に対する関心が圧倒的に高いのは、平野先生も明言しておられるように計算化学の対象は「化学」そのもので、研究者に取って実験を行うのと同様な興奮、期待、満足感をもたらしてくれるからであろう。もしも、部会の性格を広い意味での計算化学、すなわち「実験化学に対する化学理論の適用」に変えれば、ほとんどの化学者が興味をもつであろう。

しかし、元々本部会は情報化学の専門家が主体となって作ったという経緯がある。日本化学会で認められている部会内規にも、本部会の目的は「化学情報、計算機化学など情報化学に関する学術の進歩普及、産業の発展に寄与する事」と定められている。明らかに情報関連化学というかなり特定された分野を想定している。一般会員は部会の名前から考えて、限定られた活動領域を想定するために部会員が増えないとも考えられよう。

情報化学部会が会員を増強して、日本化学会の変身に合わせて生き残らねばならないという問題は部会員全員に課せられた命題である。化学会会員の１％だけしか獲得していないという現実を認識した上で、情報化学の特質を残しつつ、脱皮成長するにはどうしたら良いだろうか？今年の終わりくらいには、何らかの結論を出したいものである。部会員の皆さんのご意見をお聞かせ願いしたい。

（１）神谷和秀、本誌本号。（２）平野恒夫、本誌，10 [1] p. 2-4 (1992).

特集：情報化学教育

情報化学と情報科学

豊橋技術科学大学
工学部・知識情報工学系
阿部　英次

筆者の在籍する豊橋技術科学大学は姉妹校、長岡技術科学大学と共に高専の卒業生を３年次に受け入れて、修士課程を含めた４年間の一貫教育をする事を主たる目的として設立され、昭和５３年度から教育・研究活動を行っている。したがって、学部の各課程はそれぞれ高専に於ける対応学科を定め、そこから学生を受け入れている。カリキュラムもまた、高専教育との重複を極力避けたものとなっている。

本学に新たに知識情報工学課程が設置されたのは昭和６３年度である。この課程は既設の情報工学課程よりも応用指向、ソフトウェア指向を明確にしており、情報科学、分子情報工学（ここに筆者は所属している）、機能情報工学、社会・経済情報工学の４分野の教育・研究を行うことをその設立の趣旨としている。

しかも高専に於ける対応学科を定めず、どの学科からでも編入学が可能となっている。筆者が以前所属していた物質工学課程に入ってくる学生は全て化学を専門としている（ことになっている？）のに対し、知識情報工学課程の学生の学んできた専攻はまことに多様である。勿論、高専で化学を専攻してきた学生もいるが、数は少ない。化学以外を専攻してきた学生の中には、「亀の甲の絵を見ると頭痛がする」というものさえいる。

さて、これらの学生に情報化学や計算機化学、計算化学を教えるに当たってどこから始めたら良いのかが大きな問題である。これまでは、化学の学生にコンピュータの話をしてきたわけだが、今度は情報（？）の学生に化学の話をする事になった訳である。多くの学生にとって、化学は昔習ったことがあるという程度であり、しかも有機化学となるとほとんど縁がなかったというのが実状のようである。

他の分野について言えば、例えば自動翻訳、文字認識、画像処理、自動制御などほとんどどれをとってもなぜそれが研究・開発の対象となっているかが簡単に理解される。これらは、見る、聴く、話すなど人間の日々の営みに直接関わっているからであろう。したがって、対象とする分野についての一般的な解説は特に必要がなさそうである。ところが、現在の情報化学や計算機化学の研究・開発の対象となっているテーマは化学畑の人には簡単に理解できるが、それ以外の人々にとっては説明しにくい事が多い。例えば自動構造推定システムを開発していますと言っても、構造を推定する事がなぜ必要かを説明し、スペクトルとは何かを説明しといった段階を経る必要がある。化学データベース、分子設計、合成設計、構造一活性相関、分子力学など全て同じ事である。

筆者は３年次（本学に於いてはそのほとんどが新入生である）の１学期に授業を担当することになり、いわば情報化学、計算機化学のイントロダクションを行う事になった。上述のように化学、特に有機化学にはほとんど縁がなかった学生に「未知化

合物の構造推定のためのエキスパートシステム」であるとか、「構造ー活性相関」だとかの話をするためにはそれなりの準備が必要である事は言うまでもない。

有機化学のイントロダクションを有機化学の教科書を使って行うことも考えたが、将来とも化学を専門とはしないであろう学生に、求核置換反応や、親電子付加反応の講義をしたところで化学嫌いを増やすだけと考え取りやめた。

それよりは、化学、特に有機化学の世界の共通語である構造式と言う名の「図」に含まれている意味を正しく理解させる事によって、次の段階である**「化学構造式の機械処理」**に入って行けると考えた。すなわち、情報化学、計算機化学の最も基本的な部分がこれであるとした訳である。

何を講義すべきかと言う事について具体的なガイドラインとなるようなものもなかったので、独断と偏見で以下の様な内容となっている。これについては読者諸兄のご意見がいただければ幸いである。

尤も、始めたばかりの講義であり、学生が**「亀の甲」**を好きになってくれたか、あるいはもっと嫌いになったかの答はまだ出ていない。

序

情報化学、計算機化学が化学の世界でどのような役割を果たしているのか、あるいは果たそうとしているのかについてのイントロダクション

1　原子と分子

図として表現されている化学構造、すなわち構造式に含まれている化学者同士の暗黙の了解を明示的に解説し、「点と線」が「原子と結合」であると言うことから始める。

電子と原子核

要は原子番号とはその原子の持っている電子の数であり、原子価電子が各原子の手　の数に対応しているのであるという話。

van der Waals半径

結合

長さと角度という観点だけから説明する事とした。
共有結合、イオン結合、配位結合
単結合と多重結合

構造異性

つながり方が違うと性質が違うという事、数え挙げについて

2　命名法

世の中で使われている化学物質の名前には、慣用名、体系名、一般名（医薬品に使われている化学物質の正式名）及びそのいずれでもない「出鱈目な名前！」の４種類があるということ。
一例として、ＩＵＰＡＣ命名法の体系的な部分だけの抜粋。

3　線形表記法

ＷＬＮの歴史的な意義と規則の一部、演習を含む。

4　結合行列と結合表

Ｍｏｒｇａｎ法など

5　立体化学

たいへん論理的であり、有機化学の知識がなくても一通りの事は理解できるはずなので、説明はしやすい。勿論、立体選択的反応などと言う事には一切触れず、立体構造の表現法だけである。

ＳＥＭＡ法など

有機化学教育雑感

山形大学　工学部　物質工学科
上田　充

1.はじめに

教育と宗教の話しは熱を入れて話し合えば合うほど核心を離れ，詰まるところは人生観の問題になってしまうなどと言われている．また，私は“化学教育とは”の問題に大上段から斬りかかり，その問題に対する考えを披露できる器量は持ちあわせてはいない．そこで，高分子化学科における過去十数年ほどの学部２年後期と３年前期の有機化学，そして高分子合成化学のつたない私の講義経験を基に，本稿では有機化学の講義の進め方や講義を通して感じたこと述べて，特集の化学教育についての話題提供としたい．

2.有機化学の講義の構成

まず有機化学の講義についてその講義内容を述べておいたほうが良いだろう．

有機化学の教科書の構成は二つに大別される：1)有機化合物全体を分子骨格ならびに官能基による分類で講義を進め，個別的知識の集積化を計る各論的構成．2)この個別的知識を整理し，反応論の立場から体系化し，反応をどのように考えるのか，どのように反応するかに重点を置く構成．前者は種々多様な事実や現象が多次元的に組あわさっている有機化学という広大な知識の習得を計り，有機化学の全体像を学生に与える意味を持っている．講義はアルコール，カルボン酸などの身近の化合物と関連させて進められるので，親しみを持ち易い．ただし，そのあまりの多様性のために講義を受ける学生にとって消化し難たい欠点を有し，暗記ものという印象を与える．一方，反応論の立場からの講義は論理的ですっきりし，個々の反応の暗記作業を減らすが，有機化学の全体像を捉らえがたく，物質から遊離した講義になってしまう恐れがある．そこで，織物の縦糸横糸の関係であるこの二つの立場を有機的に関連づけるために，教育的にはまずコンパクトな各論で有機化学の概要を伝え，後に一見関連なく見える反応を関連づける理論で結び，有機化学の全体像と反応論の理解を促す方法が合理的である．このような講義の進め方は，X線による結晶構造解析の分解能が散乱強度測定点の数で決ることと同じようなことである．各論を行うことは，有機化学に関する個々の知識を与えることで，この習得した個別的知識が多いほど，各点を結んだ時，より鮮明な有機化学の絵が現われる．従って，前者は１，２年生，後者はそれ以後の学生を対象にするのが適当である．教育現場では各論と反応論の比重の割合を変え，適度のバランスをもって行っている．

3.有機電子論と分子軌道法

次に，有機反応論の講義を進める際に有機電子論と分子軌道法のどちらで反応

を説明するか問題になる．有機反応論では反応を一般に原子の電気陰性度に基づく誘起効果と共鳴によって説明している．有機電子論は共鳴や置換基の性質などを理解すると与えられた反応がどんな反応をするか定性的に予測ができ，便利である．反応では電子対の流れの方向を矢印で現わす．有機化合物の反応は共有結合の生成と切断が主題であり，曲った矢印を用いると，どの結合ができて，どの結合が切れたかが非常に分り易い．従って，反応論の入門には有機電子論は好都合で，初学者には受入れやすく，教育現場でその果たす役割は依然大きいと私は考えている．しかしながら，電子論の体系は経験に依存する割合が多く，任意性が大きいのであいまいさが常に生じる．学生は有機反応論を電子論的に理解しはじめると，電子吸引性基，電子供与性基，分極，共鳴などを含め反応論の説明にもう少し定量的な話を学生は期待するようになる．そこで，3年生の前期あたりより，私は分子軌道法を導入することにしている．分子軌道法は理論的基礎に基づいているので，有機反応を真に理解する上に非常に重要である．しかし，先の各論と反応論と同様に有機電子論を講義した後に導入したほうが学生の理解が容易である．そこで，有機反応論の講義では共役化合物の化学の項で分子軌道の性質を理解するのに最適な単純Hückel分子軌道法の講義を行い，さらに簡単なフロンティア軌道論，Woodward-Hoffmann則の講義につなげている．Hückel法によりπ電子密度分布や軌道エネルギーなどが得られるので学生にとっても反応機構を理解する上でかなり説得力あるものになる．更に，Woodward-Hoffmann則に代表されるような軌道に関する情報も得られる．そこで，講義を行った後に，必ずパソコンを使用して，学生たちに簡単なポリエンの分子軌道計算をさせ，それぞれの軌道の形，HOMO,LUMOエネルギーを求めさせている．これは分子軌道法を身近なものにする良い方法である．また，単純Hückelの分子軌道法より上位の分子軌道法は講義をしないが，σ系の反応には拡張Hückel法で得た結果を利用した反応機構の説明は行うようにしている．

4.講義

講義の構成が決った．次は実践である．講義経験の浅い頃，むやみに多くの事柄を講義時間内に話すことで精一杯で，学生の反応を見ることなしに独り善がりの講義を進めた．学生が講義内容を消化できるはずがない．従って，定期試験結果を見るたびに愕然としていたことを覚えている．１０％に満たない学生にしか合格点が出せなかったからである．何年かこのような経験を積み，思考錯誤を重ね，現在は以下のような講義を行っている．

毎回の講義において，まず３つ位に絞り込んだ講義の要点をOHPで示す．次に，その要点について手をかえ品をかえ繰り返し説明する．この間に講義が一方通行になるのを防ぐために，その場で要点に関する問題を出し無作為に学生に答えさせる．この質問は講義の理解度を測るだけでなく，学生を講義に積極的に参加さ

せる効果がある．そして講義の終わりには必ず講義のエッセンスをOHPでまとめて示す．このエッセンスをファイルすると有機化学のマニュアルになり，学生にとって内容の整理，理解度のチェックに便利である．さらに，豆テストと称して演習問題を２，３出す．この問題は次回の講義の冒頭，１０分間位で学生に解答させている．

以上のように，その日の講義の焦点を絞り，いろんな角度から講義内容について繰り返し説明し理解を促す．さらに，理解度をチェックし，学生の応答をみるなどきめ細かな配慮をしている．もちろん，講義の息抜きのための話題提供も怠ってはならない．

このような講義のやり方は大学生に対して，手をかけすぎではないか，もっと勉学に対し学生の自主性を重んじるべきでないか，すなわち，講義の要点を話せば，後は学生は講義内容の理解を深めるために教科書，参考書などで自発的に勉強するはずであると批判されるかもしれない．しかし，現実にはこれくらい手をかけても，合格点があげられるのが受講者の５０％程である．

5.OHP,ビデオ教材の活用

黒板とチョークを使用する講義形態は依然として主流であるが，OHPを使用する機会が多くなっている．OHPは黒板を使って講義を進める際に，複雑な図や立体図をきれいに表示したり，その時間の要点のまとめを示すのに使用している．鮮明な文字と綺麗な図のOHPは日頃，私の悪筆に悩まされている学生にとって好評である．ただ，OHPの説明には充分時間をかけ，学生が充分ノートをとる時間を与える配慮が必要である．これからは益々視覚に訴える教育方法の導入が重要であると思う．最近NHKスペシャルで放映された“電子立国日本”は半導体産業の歴史，製造工程などを実際に開発に携わった人達のインタビューを交えて非常に分りやすく解説し，視聴者に大きな反響を読んだのは記憶に新しい．ビデオ教材は講義の理解を助ける上に実際の材料，実験方法の理解に非常に有効である．高分子学会が作成した高分子教材ビデオ“高分子の合成”を高分子合成の講義において併用しているが，まさに“百聞は一見にしかず”で，学生に対する教育効果は大である．

高校の教員までは授業方法の講義を受け，また授業方法の研修を積んでいるが，大学の教官は特にそのような講義や研修を受けていない．各教官が自分の受けて来た講義の体験を基に講義様式，方法を考え，講義を行っている．アメリカ化学会では早くからいろんな講義科目に対してオーディオコース（テキストとテープ）が設けられ，おおいに効果を挙げていると聞く．私も高分子合成の講義を始めた頃，この高分子合成コースを購入し，講義の構成の参考にした．講義内容が簡潔にまとめられ（4時間のテープ）非常に役立ったことを覚えている．日本化学会でも，ぜひこのようなオーディオコースやビデオ教材の製作を御願いしたい．教

官にとっては講義の構成に，学生にとっては自宅学習に必ず役立つと思う．

6.パソコンを利用した演習

講義と演習は車の両輪である．そこで，講義と平行して講義の理解を深めるために，また学生の理解度をみるために必ず行っている．しかし，現実には，演習時間は取れても1単位ほどなので，演習を補充する意味で時間外の演習を行うためにパソコンを利用した演習を導入したいと考えている．研究室に於ける最近の学生のMacintosh 熱は大変である．レポート作成，構造式の作成，スペクトルの作成は勿論，さらには分子モデリングまで綺麗にやってのけている．ただし，それに使われる時間が多く，この情熱を実験に注ぎ込んでくれたらと嘆かれている指導教官は少なくはないと思う．また学部学生も結構自分のパソコンを持っていると聞く．そこで，有機化学反応の演習用のパソコンソフトやHückel法のソフトを学生に参考書のような感覚で提供したい．コンピュータゲームを楽しんできた学生にとって，パソコンを使う演習は従来からの演習書での自習に比べて，より興味を持って実行され，かなりの成果が挙げられると期待される．さらに，学生にとって馴染みにくい立体化学の理解を促すために，各種の分子模型を使ったり，コンピュータを使用し三次元の分子構造をあらゆる方向から描写観察できるようなシステムとその室の確保ができればと考えている．このシステムの導入は構造や機能の特性を視覚からの考察を可能にするとともに，これらを通じて構造学習のみならず教育啓蒙や研究思考への積極的な応用が期待されるからである．

有機合成の方法論に逆合成法がある．有機化学の基礎を修めた者にとって，いくつかの切断や官能基変換ルールを教えておくとかなり合成ステップ数の多い化合物の合成経路を考えることができる．すでに，コンピュータ支援による分子設計のプログラムはかなり充実し，多くの会社で医薬，農薬，材料開発に利用されている．是非，教育現場でも手軽に使用できるシステムがあれば，演習に利用したいと考えている

7.おわりに

以上，私の経験に基づいた有機化学教育について思いつくままに述べた．斬新な考えはなく，当たり前なことを述べて紙面を費やしたようである．学生が講義内容に興味を持ってくれればその講義は成功である．そのためには，充分に練った簡潔な内容をいろんな角度から繰り返し説明し，学生の理解を計る教官の姿勢と新しい教育システムの導入，特に，コンピュータ・ケミストリとの融合が今後一層化学教育分野で重要であると思う．そのためにも良いシステムの構築が急務であり，この情報化学部会の果たす役割は非常に大きいと思う．

理学部化学科における情報処理教育

お茶の水女子大学　理学部化学科　　藤 枝 修 子

1．はじめに

お茶の水女子大学（お茶大）理学部化学科では、教官定員が教授６（臨時増１を含む）、助教授６（一般教育１を含む）、助手３に対し、学部学生は１学年２０名、平成４年度までは臨時増募で２５名である。ほぼ半数ないし２／３が大学院修士課程へ進学する。学生はすべて女子で、全国の大学の中では特殊な状況かも知れないが、情報化学部会の会員が所属される企業にも、少ないながら何人かの卒業生がお世話になっている現在、微力ではあるが、研究および教育現場にある私どもにご意見やご指摘などをいただければ、明日への反省事項にしたいと願っている。

2．お茶大における情報処理教育の背景

2．1　お茶大理学部では

情報処理教育とは何か、どんな内容が必修かなどは、学部や学科によっても違うであろうし、明確にされていないのが実情のように思う。お茶大では、平成２年から理学部に１学年４０名の情報科学科が新設され、平成４年度に最高学年が３年生になっている。完成は４講座の予定で、学年進行中である。数は少ないが、若手教官が既に着任され、コンピュータ人口が急に増えた気がする。日常的にもコンピュータが身近になりつつあることも、化学科にとって大きい収穫であろう。

2．2　今までの経過

時間はさかのぼるが、ＮＥＣからＰＣ－８００１の８ビットマイクロコンピュータが市販され、大学、企業を問わず、競ってこのマイコンを導入した頃から、測定機器の自動化や、コンピュータ化が急激に進みだした。ＮＥＣの販売促進部とソード電算機システム㈱（現ソード㈱）のご好意により、後述のようにホストマシンが導入されて、情報処理教室が使えるようになるまでの何年間かにわたり、ＰＣ－８００１、ＰＣ－８８０１、ＰＣ－９８０１などや、Ｍ６８などをはじめとするマイコンの機材を毎回１０組ほど借用し、化学科３年生向けの授業「機器分析」の一部としてＢＡＳＩＣのプログラミングを集中的に実習していた。企業へ就職した当時の卒業生からはとても好評であった。そして、ホストマシンの導入とともに、情報処理教室の設備を利用する「計算機化学講義・演習」をはじめた。

2．3　卒業生の就職と社会的要請

民間企業からの求人は、学科主任を経由したものが平成３年度に１８０件を越えていた。この何年かはほとんど平均して同じ傾向であった。毎年、公務員、教員、マス

コミ関係などへの就職者もあるが、コンピュータのユーザーとしての民間企業に就職して、研究・開発部門に従事するものがやはり多い。純然たる化学実験の部門は少なく、また最近はコンピュータを全く使わない機器測定はほとんどなくなったためか、何らかの形でコンピュータが関係する部門と、分子設計、反応設計、シミュレーションなどの部門が多いように思う。さらにコンピュータの部門では、ハードウェアの開発よりも、当然ながら化学を中心とするソフトウェアの開発に関係する場合が多い。

企業の研究者の方々から個人的に聞く話では、大学として化学科の学生に教育しておいて欲しいことは、やはり実験を含めた化学であり、コンピュータについては、十分にマスターしているにこしたことはないが、拒否反応を起こさない程度の基礎があればよいと言われることが案外多いのもうなづける。

大学教育はもちろん企業人養成を目的とするわけではなく、もっと広く、しかも長い将来展望に立った議論が必要なことは言うまでもない。雇用機会均等法も実施され、産休制度が男性にも適用されはじめ、女性の研究・開発部門への参画が可能になりはじめた今日、かなりテマエミソにはなるが、数年前にしきりと言われた女子大学廃止論とは違った意味で、人材としての女性の専門的能力をのばす教育が急務になっていることを、このところ実感している。

3．情報処理教育の設備

3．1　情報処理センター

ホストマシンとしてＩＢＭ４３８１－Ｒ２４が設置され、平成元年２月１５日から稼働を開始した。学内の主要建物を２系統のＴｏｋｅｎ　Ｒｉｎｇ　Ｎｅｔｗｏｒｋで接続し、端末としてＩＢＭパーソナルシステムＰＳ／５５（モデル５５５０）を約２００台稼働させている。このＰＳ／５５は日本語ＤＯＳ、ＰＣ－ＤＯＳのもとでパソコンとしても使用している。

ホストマシンをアクセスするために、教育支援システムとしてＯＤＥＳＳＹ（ＯｃｈａＤａｉ　Ｅｄｕｃａｔｉｏｎ　Ｓｕｐｐｏｒｔｉｎｇ　ＳＹｓｔｅｍ）があり、学生管理、授業運用管理、授業利用状況、課題支援などが授業用に準備されている。

3．2　情報処理教室

ホストマシン導入時に教室整備の予算がなかったので、一般教育棟１階ロビーに仮設教室を作って使用している。

端末機として、	ＰＳ／５５（モデル５５４０）	４２台
	プリンター（ドットマトリックス）	１０台
	プリンターサーバ	２台

があり、大型ディスプレイ２台で、ＰＳ／５５の画面拡大を行っている。開室時間は

月曜～金曜の９：３０～１７：００で、授業として使用する以外は開放している。

４．情報処理教育の実際

４．１　基礎レベル（一般教育科目）において

理学部では、時代の流れに対応して教育課程を改正し、平成４年度から実施している。さらに情報科学科新設に伴い、年毎に情報関係の新しい授業科目が増えている。平成３年度入学の化学科学生（現２年生）は、１年生前期に情報科学講義演習（２単位）を全員履修し、情報処理教室でＦＯＲＴＲＡＮのプログラミングを実習している。約半数は１年生後期にコンピュータと人間社会との関わりや情報処理の歴史などの講義を聞いている。ちなみに、平成２年度以前に入学した学生は２単位の講義を履修した学生が１／４程度であった。

４．２　化学科専攻科目（専門）において

４．２．１　分析化学実験（２年生）の中で

ＢＡＳＩＣによる簡単なプログラムと担当者の簡単な自作回路を用いて、測定機器のしくみや、ハードウェアとソフトウェアの関係を身近な実例で理解する。パソコンはＮＥＣのＰＣ－９８シリーズを使用している。

（１）ＡＤ変換器とＰＰＩ経由でパソコンへ実験データを取り込み、計算をする（電位差滴定との関連で）。

（２）ＤＡ変換器とＰＰＩ経由でパソコンから出力信号を出す。キーボードから入力した値に応じて、指定したＬＥＤ（８個）を点灯させ、２進・１６進数の扱いも理解する。

４．２．２　計算機化学講義・演習（２年生、前期２単位）

ねらい：コンピュータに慣れて、その一般的なしくみが理解できるようになること。
　　　　今後、化学を主とする多方面へ応用できる基礎を学ぶこと。

時　間：実習を含めて週３時間（４５分＊３）であるが、実際は講義約７５分＋実習約９０分行っている。

４．２．３　計算機化学講義・実習の内容

１年生で履修した内容により、使う言語を年により選んでいる。平成３年度はＦＯＲＴＲＡＮ、平成４年度はＢＡＳＩＣを使っている。

（１）コンピュータにおけるソフトウェアの意義、プログラミングとは？

（２）化学の中のコンピュータ
　　　どんな分野で、どんなことに使われているか。
　　　グラフィックスと数値計算
　　　卒業生の就職関係とコンピュータ

（３）計測の中で使われるコンピュータ

ＬＡ、アナログ信号処理とディジタル信号処理

（４）コンピュータの種類と規模

特徴、並列演算処理のビット数、演算速度、メモリー、ニューラルネット

（５）お茶大情報処理センターについて

全体構成、ホストと端末、教室と研究室の端末、ＬＡＮ、仮想計算機の考え方、パソコンとしての使用、端末の使い方、情報処理教室での一般的注意

（６）ＣＰＵの働き、ＯＳ、ＤＯＳ、コプロセッサの考え方

（７）プログラミング言語の比較

FORTRAN, BASIC, C, PASCAL, PL/1, COBOL, PROLOG, LISP, APL, ASSEMBLER

（８）数の表し方、ビット、バイト、ｎ進数

（９）キャラクターコード、信号伝達の考え方、転送速度

（10）コンパイラとインタープリタ

流れ図、エディタ、コンパイラの考え方

（11）ファイルの考え方と取扱い

（12）使用するプログラミング言語の文法と注意点

言うまでもないが、講義と実習には、学生に身近で、切実な実例を使うようこころがけ、計算の実例は、可能な限り各自の実験値を使う。

実習では、ＣＡＩ用ソフト（キーボードの文字配列、ＤＯＳ、文字入力の説明など）による実習、電子メール、日本語ワープロ（ＤＯＳ文書）によるレポート作成、Ｍｏｌ Ｗｏｒｌｄ（分子の３次元表示プログラム）による実習、ガウスの消去法による最小二乗法計算、電位差滴定値のグランプロットと３次式近似による解析などの各プログラム作成と、解析結果の検討などを行っている。

ある程度進んだ段階で、平野恒夫先生からＭＯＰＡＣを用いた計算化学入門を何時間かお願いしている。さらに、平成４年度からは長嶋雲兵先生のお話も何時間かお願いする予定にしている。

５．おわりに

どの学年でコンピュータと化学を結びつけるのが得策であろうか。１年生は、化学科の特徴は出し難いが、一般的なことは学べる。２年生は、やや専門に入るが、まだ経験不足である。３年生は、専門もかなり進み、化学の分野に特徴的なことが実習テーマにできる。２～３年生ならどの段階でもそれなりに大きな収穫があると思う。卒業研究でコンピュータを使わない４年生も含めて、コンピュータへの関心はかなり高く、少なくともアレルギー症候は全くないように見うけられる。

化学教育における日本とアメリカのソフトウェア事情

福井工業高等専門学校　工業化学科
吉村　忠与志

1）はじめに

コンピュータ社会である今日，化学教育でもコンピュータ・ソフトウェアの重要性が認識されてきている。月刊されることになった「化学と教育」において1992年１月号から「情報コーナー」欄が新設された。その目的は，化学および化学教育に関連する有用なビデオならびにコンピュータ・ソフトウェアの頒布情報を広く公開しその流通を促進することとなっている。近年性能の進歩が著しい機器を使った化学教育が行われ，なかでもコンピュータが注目され教育機器として導入されてきたことが，教育現場でのソフトウェアの必要性[1]を認識させ，それらの頒布情報を求める声が大きくなっているのである。

ところで，我々は1982年に「化学ＰＣ研究会」を発足して上記と同じ目的を掲げて化学ソフトウェアに関する研究活動を推進してきた（学術活動の詳細[1,2,3]まで記述する紙面がないので省略する）。この研究会も十年目にしてアメリカ化学会プロジェクトＳＥＲＡＰＨＩＭとのソフトウェア交流（国際交流）を開始したのを機に，「化学ソフトウェア学会」（会長:下沢隆埼玉大学教授，以下本会とする）に改組・設立することができた。これも，化学ソフトウェアに関連して十年前に蒔いた種が漸く花が咲き，世に日の目を見るニーズが出てきた顕れといえよう。

筆者は，1991年に文部省在外研究でプロジェクトＳＥＲＡＰＨＩＭの本部があるウィスコンシン大学マディソン校に留学することができた。このプロジェクトは本会と全く同じような目的を掲げてグローバルに学術活動を続けており，今回の在外研究で得たものを基にして表題のテーマで化学教育のソフトウェア事情を論じてみる。

2）化学科だけのコンピュータ・ラボ

ウィスコンシン大学マディソン校化学科の化学教育研究所(Institute of Chemical Education，ＩＣＥ)を主管しているのが，ムーア（J.W.Moore）教授で，教授室の隣に化学科のコンピュータ・ラボがある。そこには，ＣＤ（ビデオディスク）を装備したＩＢＭマシンが約５０台設置されていた。その教室の入口には，利用者のチェックのためにカウンターがあり，管理人が常時居て化学の学生がいつでも利用できるようにすべてのコンピュータのスィッチが常時入れられていた。学生にはコンピュータ・ラボでの実験・実習がカリキュラムの中で義務づけられているようで，単位獲得のためか学生はすごく熱心にコンピュータ学習をしていたようである。

興味があったのでムーア教授の許可を得て，コンピュータ・ラボに入り，セットされているＣＡＩシステムを走らせてみた。このシステムは，一般化学から基礎物理化学の分野をカバーしており，メニュー方式で選択学習するシステムであった。このソフトウェアは，プロジェクトＳＥＲＡＰＨＩＭのスタッフによって制作され保守管理

されていた。すべてのＩＢＭマシンには同じソフトウェアがセットされていて，ゲーム機の感覚で操作できるように工夫されており，コンピュータの操作が容易であった。ＣＤから供給される映像は化学実験の様子をビデオに一駒ずつ編集されており，コンピュータ·グラフィックの画像よりリアリティがあり，教育的効果のあるものであった。コンピュータ支援の化学ドライラボ教育には，このような「化学科だけのコンピュータ・ラボ」の必要性を痛感した。

筆者が次に訪問したテキサス大学オースチン校にも同じようなコンピュータ・ラボがあった。このラボは，プロジェクトＳＥＲＡＰＨＩＭのスタッフのラゴスキー（J. J.Lagowski）教授（Journal of Chemical Educationのエディタ）が主管しており，ウィスコンシン大学と同じ内容のものに大学独自の改良を加えたソフトウェアが搭載され，学生実習に寄与していた。

ところで，日本には我が校も含めて化学系の教室（学科）単位でのコンピュータ・ラボを有している大学・高専はないように思われる。アメリカにおいても訪問した両大学は化学教育におけるＣＡＩ実践の先進校であり，他ではこのようなコンピュータ・ラボを有している大学はあまりないようである。それぞれの教育現場でコンピュータ・ラボを有することができない事情があるのだと思われるが，実践している化学ドライラボ教育の実態を視察して，その教育実践を目の当りにすると，教室（学科）単位でのコンピュータ・ラボの必要性を痛感した。近い将来，化学教育におけるＣＡＩ実践が各校に定着していく中でこのようなラボを普及・実践させたいものである。

3）プロジェクトＳＥＲＡＰＨＩＭ

このプロジェクトは，本会発足の1982年にムーア教授が化学教育におけるコンピュータのソフトウェアと教材を研究・開発および収集・配布するための情報センター（Clearinghouse）を設立した学術団体である。そして，ＮＳＦ科学教育基金に支えられているアメリカ化学会の下部組織である。このプロジェクトの本部はムーア教授のウィスコンシン大学マディソン校ＩＣＥにあり，そこを拠点としてアメリカ各地に支部を有し，更に全世界にも各国の支部がある。 この度，本会が日本支部となり，ＳＥＲＡＰＨＩＭの管理している化学教育に関するソフトウェアの配布の委託を受けた。ＳＥＲＡＰＨＩＭのソフトウェアを本会の無償利用ソフトウェアとして公開し頒布しているので，興味のある方は一報ください。このプロジェクトは，本会同様多くの学術活動を行っているが，ここではソフトウェアについてのみ紹介する。

このプロジェクトでは，新しいソフトウェアがＳＥＲＡＰＨＩＭに登録されると，「Project SERAPHIM News」に載り紹介される。そして，２年毎にソフトウェアのカタログが発行され，最新版は1991年に刊行されている[4,5)]。文献2において，1987年のカタログにおけるソフトウェアの項目分類の件数を紹介したが，引き続き1991年も併せて表１に示す。約225枚のディスクで異なるプログラムを約650種保有している[5)]。このことから，化学教育のソフトウェアの分野でこのプロジェクトが過去４年間で大きく成長していることが伺える。

ＳＥＲＡＰＨＩＭのソフトウェアについて項目分類で見ると，化学の方法論，結合/化学式/化学量論，有機化学/高分子化学が上位を占めている。その中身を見ると，

機種的には旧いアップルⅡのプログラムが多く，この分野での歴史と継承の偉大さを感じる。これに続く機種としてＩＢＭ-ＰＣとＰＣコンパチブルでのプログラムが多く開発されているようである。中でも，分析化学/スペクトロスコピーと一般化学/チュートリアル＆ゲームの項目で極めて多いようである。

表１　化学ソフトウェアの項目分類

分類項目[a]	SERAPHIMｶﾀﾛｸﾞ (1987)	SERAPHIMｶﾀﾛｸﾞ (1991)[b] AR	AP	PC	MC	計	JCPE Nwesltter (Vol.3,No.3,1991)	最新化学PC用ｿﾌﾄｳｪｱ集'91 (1991)
Special Program/Teaching Support ｽﾍﾟｼｬﾙ･ﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑ/教授支援	14	-	23	6	8	37	-	10
General Chemistry/Tutorials & Games 一般化学/ﾁｭｰﾄﾘｱﾙ&ｹﾞｰﾑ	-	-	-	21	-	21	-	-
Methods of Chemistry 化学の方法論	11	7	160	-	2	169	-	4
Atom Structure/Periodicity 原子構造/周期律	15	3	34	8	-	45	-	1
Bonding/Formular/Stoichiometry 結合/化学式/化学量論	12	16	30	19	2	67	-	4
Gasses/Liquids/Solids/ Molecular Structure 物質の３態/分子構造	12	3	21	13	1	38	-	2
Solutions Processes/Acid-Base 溶液論/酸-塩基	8	-	23	12	4	39	-	3
Chemical Reaction/Equilibrium- Kinetic-Redox/Electrochemistry 化学反応/平衡/酸化還元/電気化学	14	1	26	17	-	44	-	1
Organic /Polymer Chemistry 有機化学/高分子化学	19	4	49	10	1	64	-	3
Environmental/Industrial Chemistry 環境化学/工業化学	23	4	10	7	1	22	3	2
Analytical/Qual/Spectroscopy 分析化学/ｽﾍﾟｸﾄﾛｽｺﾋﾟｰ	8	-	9	33	11	53	-	6
Nuclear Chemistry 核化学	2	-	3	1	-	4	-	-
Thermodynamics/Statistical Mechanics 熱力学/統計力学	-	-	-	11	-	11	1	-
Transition Metal Complexes 遷移金属錯体	-	-	-	2	-	2	-	-
Lavoratory Modules/Interfacing 実験ﾓｼﾞｭｰﾙ/ｲﾝﾀｰﾌｪｰｽ	9	1	6	1	-	8	-	9
Instrument Simulators 分析機器ｼﾐｭﾚｰﾀ	5	-	4	1	1	6	-	15
Mainframe Translations/ Molecular Science 汎用機からの移植/分子科学	5	-	-	12	-	12	47	22
Programmer's Tools ﾌﾟﾛｸﾞﾗﾐﾝｸﾞ･ﾂｰﾙ	8	12	11	13	1	37	-	-
合計	163	51	409	187	32	679	51	82

註：a)英文項目はＳＥＲＡＰＨＩＭカタログ(1991)による.
　　b)AR, Apple Ⅱ ProDOS; AP, Apple Ⅱ; PC, IBM PCs; MC, Apple Macintosh

ＳＥＲＡＰＨＩＭのソフトウェア以外では，ＪＣＥ:Software[6]があり，これもムーア教授がエディタとして主管されている。このソフトウェアには，シリーズＡ：アップルⅡファミリーが８件，シリーズＢ：ＭＳ-ＤＯＳ/ＰＣコンパチブルが８件，シリーズＣ：マッキントッシュが４件，そして限定出版：ビデォディスクが１件登録されており，注文に応じてUS＄50で配布されている。

4）無償利用ソフトウェア

本会では，化学ソフトウェアの健全な発展と普及を願い，さらに，その環境向上を目的に1985年からパソコン中心にソフトウェアの実態調査を実施している。具体的には，有料，無料を問わず，公開，非公開を問わず，化学に関したパソコン（ＰＣ）用プログラムをオリジナルに開発･作成している方を対象に，そのソフトウェアを公表（カタログ化）して，この分野のソフトウェア情報の流通と活性化を図っている。

その成果は，「最新化学ＰＣ用ソフトウェア集」[4]（ソフトウェア年鑑）として発行されカタログ化されている。パソコンを活用している化学者･技術者にとって，これはそれぞれの部門で有用な情報源となっているものと思われる。

このように集録された化学ソフトウェアのうち，著者から無償利用の承諾･登録が

あったものについて，1988年から無償頒布を実施している。本会では，巷で普及しているＰＤＳ（Public Domain Software）と区別するために「無償利用ソフトウェア」を次のように定義して無償頒布の活動を行っている。

無償利用ソフトウェアは，プログラム作成者（著者）が営利目的でなく，一般公開による無償利用を認めた作品をいい，その著作権および知的所有権は著者が所有する。

現在登録されているソフトウェアの件数は７８件で，表１に示すように分類されるものが集録されている。ソフトウェア年鑑[4]ではＳＥＲＡＰＨＩＭとは異なる分類を行っている。文献４では，使用目的別に図１のような件数割合を示している。

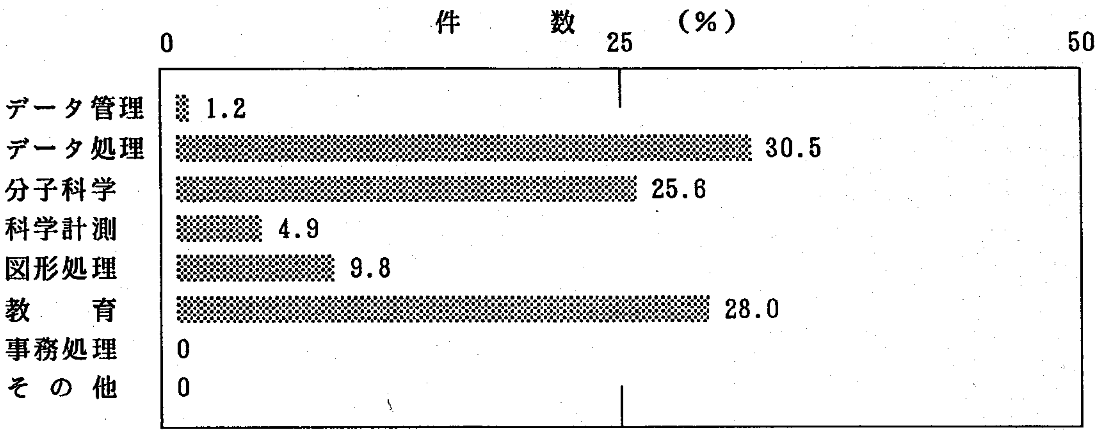


図１　使用目的別の集録内訳

これを見ると，化学教育のソフトウェアの集録件数は第２位と検討している。しかし，ＳＥＲＡＰＨＩＭと比べると，集録件数が表１に示すように格段の差があり，本会の今後の更なる努力目標である。

本会では，この他にＰＣ-ＶＡＮのＳＩＧ「化学とコンピュータ」でも化学ソフトウェアを無償配布している。ＳＩＧでは，これをＯＳＬ（Online Software Library）として登録してソフトウェアの公開･普及に貢献している。ＰＣ-ＶＡＮでは，これらのソフトウェアをＰＤＳといっていたが，ＰＤＳのモラルが再検討されて，フリーウェア（Free Software）のオンライン･ライブラリーとして著作権の保護を維持している。

引用文献

1) 藤枝修子，化学と教育，第39巻，第6号，p.643(1991).

2) 吉村忠与志，油化学，第38巻，第5号，p.385(1989).

3) 吉村忠与志，ＣＢＩ　ＮＥＷＳ，第10巻，第4号，p.3(1990).

4) 吉村忠与志，最新化学ＰＣ用ソフトウェア集'９１,化学ＰＣ研究会(1991).

5) Project SERAPHIM, Software Catalog (1991).

6) アメリカ化学会化学教育部会，J.Chemical Education:Software, Back Issues List(1988-1991).

内外ケモメトリックス教育事情

キッコーマン（株）研究本部
相島鐵郎

1　海外ケモメトリックス教育事情

昨年7月、幕張メッセで開かれたICAS'91では欧米から参加した数人のケモメトリシャンと一夕、海外でのケモメトリックス事情について親しく話す機会があり、いくつかの大学では既にケモメトリックスと名付けた講義が行われていることを確認できた。9月には、初めて来日したケモメトリックスの創始者の一人であるワシントン大学のKowalski教授から、ケモメトリックスに関する数々の興味深い話を聞くことができた。彼のいるワシントン大学でもケモメトリックスの講義が4年生に対して行われているそうである。しかし実験計画法や最適化法を講義した際、学生の一人が授業の終了後、こんな便利な手法をなぜ1年生で教えないのか、卒業実験の後に知ったのでは試す機会もないと苦情を述べたそうである。

顔の広い彼は、欧米はもとより世界各国のケモメトリックス事情に関して非常に詳しい。化学分野のコンピュータ利用に関する話題の中で中国の著しい進歩を述べ、ある面ではアメリカより優れているのではないかと、やや予想外の感想をもらした。そして、そのような進歩に至った理由を幾つかあげた。まず中国の分析機器は欧米や日本のように分解能や感度が高くはないし自動化も進んでいないこと。次に化学の研究室で日常利用できるコンピュータの性能もはるかに劣ってること。さらに彼はやや皮肉混じりの口調で、そのような機器から得た分析結果に基づき試料に関する必要な知識、即ち「情報」を抽出するためにコンピュータの使い方が非常に上手くならざるを得なかったと結論を述べた。つまり性能の劣るハードウェアを数学的な工夫とソフトウェアでカバーしているとのことであった。

しかし私はその時、彼の言に半信半疑であった。ところが僅か半年後、彼の言の正しさを身をもって知ることになった。

2 石博士

今年2月、関係諸氏の御尽力により、大阪大学で開かれた情報化学部会主催の第3回ケモメトリックスワークショップに中国から若いケモメトリシャンを一人招くことができた。彼の名は石楽明博士。中国科学院の若手研究者である。

昨秋、文献を通じて知り合った彼は、私に文献リストと履歴書を送ってきた。そのデータによると、現在27才の彼は16才で大学入学、在学中から中国内外の雑誌に論文を発表、既にその数が44にのぼるとのことであった。もちろん日本でも理解の深さや研究に対する寄与の多少を問わなければ、様々な分野で膨大な数の論文に共著者として名を連ねる大先生も少なくはない。彼の場合はまだ27才、自分の頭と体で生みだした成果に基づく論文である点が大きな違いである。しかし彼の講演を実際に聞き、直接話をするまでは論文数の多さも我国の大先生と同類ではとの疑いがなかった訳ではない。なにしろ、我国以上に出自がものを言う彼の国のことである。

どこそこの有力者の子息ならば、それもありえないことではない。ところが快活な性格の彼は金持ちや政治家の子供などではなく、本当に優秀であり自分で何でもやり、何でも知っている若いケモメトリシャンであった。

石博士によると中国では化学計量学と呼ぶケモメトリックスの研究室が50以上の大学にあり、多数の卒業生を送り出すと共に交流も盛んで活発な研究活動を繰り広げているとのことであった。外貨が制限されている中国では必要な解析手法の理論を理解したら当然、自分でプログラムを書かざるを得ないそうである。

一方、我国ではケモメトリックスの和訳もまだ確定していないし、その名を付けた研究室も存在しない。落差は大きい。しかし考えてみるとケモメトリックス教育だけではなく、お寒いのは自然科学全体である。大学での科学教育には真理を追求し知識を生産する技術の修得という大きな使命がある筈である。しかし現在、職人的な生産技術の訓練にウェイトが置かれ過ぎている感がするが如何なものであろう。

3　我国の土壌

確かにわが国にも優秀な自然科学の研究者は少なくない。しかしどちらかと言えば名門大学の歴史ある講座に属する彼らは、既に確立された分野におけるエリート研究者が多く、新たなパラダイムを創造したり新興分野で世界をリードするようなタイプは少ない感がする。科学は自然界の本質を理解することがその目的であるから、時には科学者は既存の知識体系に対して挑戦し、それを破壊する勇気が必要となる。交友関係や接する範囲も限定された企業の研究者として、経験から語ることの危険を承知で、あえて我国の大学教育について疑問を呈せざるを得ない。

食品では味や香りの善し悪しを嗅覚や味覚で評価する官能検査が品質の評価基準となる。官能検査には絶対という基準はないので、ある程度の人数を用いた評価を統計的に検定して結果を示すことが、その客観性を保証するための常識となっている。ところが、ある学会誌に大学の研究者から投稿された論文を審査したときのことである。投稿されたその論文は、一人の経験豊かな専門家による評価を書き連ねていた。つまり統計的な検定という最低限の常識すら、その常識を教育すべき大学の研究者になかったことになる。いくら何でも学会誌に職人芸の真髄を掲載する訳には行かず、その部分の全面削除を要求した。この件に関しては著者への同情が全くないわけではない。食品あるいは農芸化学分野の学会誌の投稿規定には化合物名や単位などの記載法に関しては詳細な説明があるが、統計処理に関する規定はまったくない。一見ランダムに見える自然界が生み出す正規分布という美しい秩序に立脚する統計学は、経験と勘に基づく職人芸が暗黙の中に包含する技術に論理性を与えるものかも知れないが、数字と言葉で明確に表現できる点が根本的に違う。論理性が科学論文の生命であるから、それの欠如している論文は掲載の価値がないことになる。

一方、アメリカの食品関係の雑誌に対する投稿規定には官能検査の方法と検定法が詳しく記載されており、学会としても委員会を設けて標準的な方法の確立に努めている。それから著しくはずれた投稿論文は審査に回る前に返却されることになる。

4 言葉の壁

複数の外国の友人が不思議そうに述べたのは、日本の電子技術は素晴らしく優れた製品を続々と生み出しているのに何故コンピュータの使い方が下手なのかという疑問である。確かに日本製のマイクロチップがなければ、世界中で電子機器や兵器の製造に支障を来すであろう。しかし"Nintendo"以外には世界で広く利用される日本製のソフトウェアは聞いたことがないし、新しい概念のコンピュータが生み出されたとの話も聞かない。情報化学討論会の話題もスーパーコンピュータ、ワークステーション、メーンフレーム、パーソナルコンピュータなどで日本語はない。日本語がないということは、日本で生まれた概念がないということである。科学に限らず新しい言葉を生み出せるかどうかは根本的な問題である。最近、カタカナで書かれたケイレツ、ダンゴー、ギョーセーシドー等を目にすることが多い。これらは外国に存在しないだけでなく、そのような資本主義の本旨にもとる概念を表す言葉が今までなかったため、そのまま英語になってしまったものである。柔道、空手、相撲などと同じ日本の文化が生みだした独特の存在として位置づけられる。同様に研究開発にとっても、言葉を生み出すか自国語に翻訳するかは本質的な問題である。言葉を生み出せないと言うことは、新しいパラダイムを生み出せないことになり、新しい知識を創造する存在としては真の一流ではないということになる。

パラダイムを輸入する結果、その外国語の概念を適切な日本語に置き換える苦しみは解体新書以来、今日でも自然科学において続いている。たとえばケモメトリックスという言葉の翻訳一つをとっても、その概念を適切に表す日本語の創出には手間取っている。これは考えてみれば当然で、初めて新しいパラダイムに接する日本の研究者はその概念を外国語で理解せざるを得ないし、その外国語に慣れてしまうと特に日本語に変える必要性を感じなくなる。その結果、何かの拍子に適切な日本語を求められるとパニックに陥ることになる。我国ではカタカナ、平仮名があるためか中国と比べると訳語の創造能力はだいぶ劣る。たとえばコンピュータの訳語である電子計算機と電脳を比べただけでもセンスの違いが分かるであろう。

言葉と言えば、コンピュータを操作する度に、それがまさに英語文化そのものであるとの感を深くする。家庭でも広く利用されるようになったPCのMS-DOSを扱うには、英語がある程度理解できなくてはならない。プログラミングの言語しかりである。つまり義務教育に頼る限り、中学生にならなければマニュアルから離れてコンピュータをいじることはできない訳である。一方、英語圏では、プラグラムに使用する単語は子供でも知っているものが少なくないので、アルファベットさえ読めるようになれば、幼稚園児でもプラグラムを理解できる。この落差は大きい。これを埋めるには日本語のOSを開発するか、小さい時から英語を学ばせる以外にない。問われるのは英語教育の質でもある。もちろん日本語自体が本質的に有するファジーな表現、それを用いたファジーな思考も現在のコンピュータを使用するには決して適するものではないことも事実である。

5 科学軽視の風土

ある編集者と話していたとき、日本における科学雑誌の不振が話題となった。確

かに、わが国では良質な科学の啓蒙雑誌は少ない。分野別に科学雑誌の目次だけを集める"Current Contents"で最初に出てくるのがNature、次がScienceである。残念ながら、このような一般科学のカテゴリーには日本の雑誌は全く登場しない。明治以来、何のためになるかで技術や知識を評価してきたわが国では知識自体を評価する文化が生まれず、常に目先の問題解決に役にたつかどうかで評価されてきたので、科学の水準を高めるような雑誌が育たなかったのであろう。また、その他の学会誌でも相対的な評価の低さから、すばらしい研究成果は国内の雑誌には投稿しないという研究者が周囲には結構多い。

最近、話の行きがかり上、理科系学部を出身した社内外の若手研究員に科学の定義を訊ねたところ、明確な答は全く返ってこなかった。彼らは入学試験の偏差値の高さから、世間では一流と呼ばれる大学の卒業生達である。もちろんコンピュータの基礎知識はもとより実験計画法などデータの集め方、統計学的な解析法なども知らないし、そのような分野があることすら聞いたことがない研究者が少なくない。それでも卒業論文や修士論文を書き上げてきたわけである。その結果、彼らの論文には「大きい傾向が見られた」などという文学的な表現がしばしば見られることになる。一方北米では、4年生の卒論でも結果の差異を論じるには統計的な検定が要求される。しばらく滞在した西海岸の大学では新入生に対するコンピュータ教育は盛んであったし、夏休みには学生はもとより市民までも参加できる各種コースが開かれていた。しかもメーンフレームの端末は学内の至るところに張り巡らされ、計算センターでの講習には一人一台の端末を使用できるという豪華さであった。

生理活性物質に関係する講座を選んだ関係で卒論や修論を完成するためにクロマトグラフィーを多用した自分の経験でも、分析条件を論理的に最適化する分野があることは考えたこともなく、日夜ひたすら職人芸的な技術の修得をめざしたものである。最近の卒業生から判断して、今日も状態がそれ程進歩しているとは思えない。つまり彼らの高い学歴のかなりの部分が職人芸的な技術の修得に費やされてきた訳で、論理性の修得や科学に関する広い視野を身につけた結果の高学歴ではない。

6 職人教育ではない科学教育を

中学卒、高校卒など様々な学歴の混在するする職場で大学教育を受けた社員の真の価値は決して職人芸などではないはずである。しかも研究者に個室を与えず、大部屋で他人との和を強要するわが国の職場風土では、じっくり考えて新しい製品や分野を開拓するという創造性よりも、ひたすら職人芸に磨きをかけることになり勝ちである。つまり就職後には考えることの大切さや知識を創造する技術を修得する機会は得難い。この基礎的な部分は是非大学で重点的に教えてほしい。オンザジョブトレーニングという職人芸の磨き上げに偏った教育に企業が疑問も呈せず邁進する今日、理科系とは言え知識の創造という大きな喜びを一生味わうこともなく、それを不思議にも思わないサラリーマンを量産する体制は急に変わりそうもない。しかし今日、単に欧米で発案された製品の改良品などではなく、新たな知識に基づく付加価値の高いユニークな製品の創造なくしては、わが国産業のグローバル化は困難な状態に至っている。情報化学に限らず基礎的な科学教育への期待は大きい。

分子設計とコンピュータ

武田薬品工業(株) 化学研究所
神谷 和秀

近年情報の重要性はますますたかまっており、筆者が関与している新薬の研究開発の分野においても、情報は最優先課題の一つである。 どのようにして良質な情報を入手し活用して行くかが、直接成果に影響してくる事を考えれば、これは当然のことであり、その重要性は今後とも増す一方と思われる。ところで今回のテーマである、化学に関する情報教育はあまりに範囲が広すぎ、筆者の能力にあまるので、ここではコンピュータに代表される情報処理教育およびその応用分野のひとつである分子設計に限って考えてみたい。

化学 特に理論化学の分野ではコンピュータの登場は画期的な出来事であった。それまでは夢の世界でしか実現しないであろうと思われていたような計算が、コンピュータによって現実のものとなったのである。しかし、企業においては、会社の宝ともいうべきメインフレームを中心に、特権階級である情報処理の専門家が一大中央集権社会を形成し、一般研究者はよほどの事がない限り、その一角にはくいこめなかったものである。しかもソフトとなると、何をするにしても自前のプログラムの作成からはじめねばならず、かなりの勉強をした者(普通は独学)にしか利用のチャンスは与えられなかった。これにひきかえ最近ではコンピュータの性能向上とダウンサイジングが進み、誰でも自由にコンピュータを利用出来るようになっている。しかも特殊な問題でない限りソフトは比較的簡単に入手することができる。初期の頃の状況ではコンピュータについての専門教育を受けた人材が数多く要求され、しかも充分に実力を発揮する場が多くあった。一方、今日では、コンピュータ関連の開発についての分業が進み、コンピュータ関連の企業は別として、通常の企業ではそれほど多くの専門家は必要ないようになっている。このような状況はコンピュータが有効に活用されている状況を反映しており、過去に苦労した筆者にとっては喜ばしい傾向と評価されるが、情報化学者にとっては活躍の場が狭くなってきているとも考えられる。

コンピュータ支援分子設計についても状況は非常に良く似ている。 初期の頃は満足なソフトがなかったために、ソフト開発が研究の中心となった。何人かでチームを組んで研究を進めて行く際に、プログラム開発を担当する人の活躍の場が最大であった。しかし最近では目的、手法がはっきりしている問題については良いソフトが入手可能になったこともあり、状況はすっかり変化してきている。

グラフィックスをはじめ、ハードの進歩と世代交代のスピードのあまりの早さに苦心の作もすぐに陳腐化してしまうなど、素人(個人、小グループ)では追従して行けないのもこの傾向を助長している。三次元構造に立脚した分子設計を行う場合に、安定構造と活性構造との問題、無数に存在する準安定構造の問題はあっても、市販のソフトを利用して、一応レセプターマッピング等のアプローチは可能となっている。　特に分子軌道法、分子力学法、分子動力学法関係に代表される計算用ソフト、結果の表示等のグラフィックソフトについては専門ソフトを導入するのが効率の面からも、出来栄えの面からも、望ましい状態になっている。
自前のソフトを作成する必要があるとすれば、独自のシステムを構築したことに起因する、市販ソフトの間を結合するインタフェース部分程度である。 結局、解決法が分かっているものについては、次々と製品が登場し、残るは手法の確立していない、研究段階のものだけとなっている。この状況は、コンピュータ支援分子設計が開花期を迎えたことを表しているわけで、一部の専門家だけが利用していた状態から、必要のある人は誰でも利用可能な状況になってきたといえる。
特にいわゆる合成屋さんは、従来は平面構造の世界のみで考えていたのが、三次元的な思考が加味される訳であり、漠然と考えていた例えば薬物の標的についての概念がグラフィックス等で実際に確認できるようになった意義は大きい。
このような状況下で、時代を担う人達の教育はどのようにすべきであろうか。
情報化学(科学)研究者の育成としての教育の観点からは、一例として人間の持つ特殊な能力である「カン、ヒラメキ」をも解決しうるような専門家の育成の方向へ向かって行くのではないかと思われる。 無秩序かつ曖昧な概念に挑戦する、ニューロコンピュータ、ファジイ、カオスといった研究の成果に期待はするものの、一般の企業研究所としてはこのような専門家を育成するほどの余裕はない。
一方、企業研究所が必要とする分子設計の専門家の育成となると容易ではない。
新規薬物をコンピュータの支援のもとに設計するとなると、薬理学、生化学、有機化学、物理化学等広い分野の知識が要求される。一人でこれらの知識をすべて備えた人はないが、これらの分野の教育を受けた人にコンピュータ関連の技術を習得させることは、アレルギー症状を呈する人以外は比較的容易である。ところがその逆は非常に困難である。結局、非常に有効な道具であるコンピュータ、グラフィックスをアレルギー症状を示さぬように、誰でもが活用して行けるよう、一般教養として若いころに慣れさせる教育が有効であろう。

呉羽化学工業㈱　谷中幹郎・中馬　寛

呉羽化学における計算（機）化学の教育普及の現状

§1．始めに

呉羽は、比較的早い時期から、農医薬の生理活性物質を対象として計算（機）化学に取り組み、自社開発プログラム・導入プログラム・導入プログラムの改良等の整備が進んでいる。各研究所から、種々のシステムが共通ないし個別に、誰でもがアクセス可能な状態になっている。それらの応用対象は、最近では高分子分野にも及んでいるが、研究の効率化ということとも関連し、計算（機）化学に対する期待は極めて大きい。

§2．合成化学／評価からみた計算（機）化学の現状と期待

例えば農医薬分野における生理活性物質を対象とした場合、計算（機）化学は、大きく分子設計技術と合成反応設計技術に二分されると思われる。分子設計技術は、従来のランダムスクリーニングによらないリード化合物の発見や従来のランダム合成によらないリード化合物の最適化、即ち、できる限り無駄な評価や合成を避けたいということで位置づけられ大いに期待されている。”説明から予測への応用”ということが求められている。しかしながら、期待はされ、通りいっぺんの教育がなされ誰でもが利用可能な状態とはいえ、実験化学者の誰もが利用しているとはいい難い。的確な対象にて具体的な問題に接した各人が、よく精通した人に個別に相談しつつ且つ基礎知識を習得しながら進めている現状である。分子設計技術を盲目的に利用すると、発想段階でとんでもない誤りを犯す危険性もある。例えば分子のグラフィック上での綺麗なもっともらしい立体構造には誰でも関心をもつが、お絵書きソフトとも関連して危険な側面である。合成反応設計技術は、プロセス設計における経済的合成法や新規化合物の短期間合成問題等と関連して期待されているが、普及は遅れている。狭い分野では、まだまだ合成化学者の経験知識が勝ることもあるが、この種のシステムは、合成化学者には嫌われる傾向がある。従ってなかなか協力が得られず、システムの進歩自体も遅れるという現状が続いている。反応検索システムや化合物管理システムは、合成化学者に比較的受け入られ易いので、当面これらの普及がコンピュータに慣れ親しむという意味で重要である。いずれにしても、分析データの解析問題等も含め、計算（機）化学に対する社内の期待は大きい。今後は結局人の問題であろう。人的ネットワークが構築されつつ、次章で述べるコンピュータケミストリー研究会のような活動をも通して普及浸透し、基盤技術として大きく育つことを期待している。

§３．計算（機）化学からの今後の取り組み

呉羽においてコンピュータによる分子設計が医農薬分子設計という形でスタートして以来１０年余りが経ったが、この間を今顧み、我々に課されている役割は下図のように表されよう。下図の分子設計の基礎研究が計算（機）化学そのものであり、例えばペプチド間相互作用の解析、有機合成反応設計がこれにあたろう。分子設計技術の応用では社内の各研究部署への支援であるがこの中では農業用殺菌剤の開発への寄与のような成功例も出てきた。分子設計支援システム、プログラムの開発ではANCHOR,LeadMakerの富士通との共同開発が挙げられる。最後の分子設計技術の普及・応用は今まであまり意識していなかったが最近、コンピュータケミストリー研究会を発足させ各研究所間での分子設計、計算機化学コンピュータの運用等を幅広く検討していくことになった。これらの４つの”柱”が互いに強く関連していることは極めて重要なことである。例えば、基礎研究を行う際の問題意識はおうおうにして、応用から出、また応用の際、その技術がブラックボックスなら結果の解釈は到底おぼつかないであろう。また応用の際の我々の実験器具がシステム、プログラムである。逆に基礎研究と応用で得られた技術、ノウハウを集約する場がシステム、プログラムであり、システム化によってそれらの技術、ノウハウに共有性を持たすことができよう(時にANCHOR,LeadMakerのように社外まで共有性の範囲が及ぶこともあるが）。

さて与えられた課題である呉羽における計算（機）化学の教育、普及についてであるが先に述べたコンピュータケミストリー研究会のような活動もその一つであるが、それと同時にやはり分子設計の基礎研究、その応用を通して前章で述べた社内の期待に答えようとする日々の努力こそが肝要であろう。計算（機）化学の普及に関連したソフト、ハードの導入プログラムの整備も勿論大事であるが、計算（機）化学の将来という点に関しては長期的に見れば今の有機化学あるいは無機化学などと並ぶ化学の一分野になりることが予想され極めて楽観している。まどろっこしいようであるが、やはり我々のような計算グループと実験化学者がお互いに信頼と尊敬の念を持って接しお互いに努力していくことこそが、企業の中で計算（機）化学の真の普及につながるものと考えている。

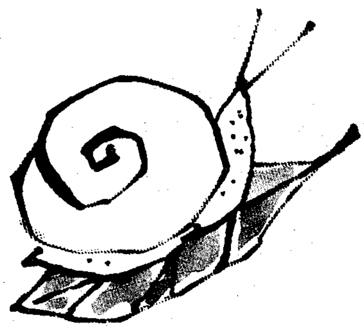
分子設計の基礎研究

／　　　　＼

分子設計技術の応用　－－－－－－－－　分子設計支援プログラム
システムの開発

＼　　　　／

分子設計技術の普及・教育



「情報化学教育について想うこと」

住友化学工業㈱
筑波研究所
吉田　元二

1．はじめに

今年も新入社員を迎える時期となりました。私達の会社でも、コンピュータ・ケミストリのグループに数名の新人が新たに加わってくれることになりました。

幹事の方から、情報化学教育について、何か書くようにとのことでありましたので、企業の立場から新入社員を迎えるに当たっての大学教育に関する所感について述べてみたいと思います。

まずひとつは、当然のことですが、「研究の態度」を身につけてきて欲しいということです。「研究の態度」というと、曖昧藻湖としていますが、基本的には、物事に対する好奇心、分からないことをクリヤーにしようとする追求心、あっさりと諦めないねばり強さではないかと思います。最近の若い人をみていると、この点でなんとなく不満を感ずるのです。ただ単に自分が年をとったためにその様思うだけかもしれませんが…。ものすごく物わかりがよく、すぐに理解しているようでも、本質的なことは全然分かっていないとか、いわれたことは適当に処理はするが、自分から研究を展開していくことはしないとか、地道な仕事は避けて通るとかいったことが目につくように思われてなりません。問題意識が乏しいといってもよいのかもしれません。知識の教育も当然大切であると思いますが、それにもまして、大学教育では、「研究の態度」を身につけさせて頂きたいと思います。このことは、情報化学に限らず、全ての研究分野についていえることですが、特に、情報化学の分野においては、注意しなくてはならない要素が多いように思います。といいますのは、この分野における、最近の進歩はめざましく、優れた商用システムが数多く開発され、それが大学にも導入されるようになってきております。そして、学生もそのようなシステムを利用して研究をおこなうことが、増えてきているように思います。その結果、システムの中身はブラックボックスのまま、計算だけをおこなうという傾向にあるのではないかと危惧されるのです。したがって、手持ちのソフトでうまくいかないと、その原因を追求することなく、「上手くいきません」と諦めてしまうということなしとはしないのです。

大阪市大の西本吉助先生が、「分子軌道計算で最も大切なことは、計算のプロセスを十分に吟味し、途中結果をよく眺めることであるのに、最近は、この一番美味しいところを計算機に食べさせ、その排泄物である綺麗なグラフィックスを眺めて満足しているのではないか。」といわれた言葉が、非常に印象的です。

たしかに、今日のように、進歩の激しい時代に、何から何まで、ソフトを手作りしていたのでは、肝心なそれを使っての研究という目的に到達することが、不

可能となりますが、少なくともこの道のプロの研究者たらんとするからには、ブラックボックスのまま、ソフトを使うということだけは避けなくてはなりません。単なる活用研究ならば、ややもすると、企業における研究レベルの方が、大学におけるよりも進んでいるケースも少なくないのですから。

情報化学ということですから、最近では、計算機と無関係ではいられません。それでは、計算機についての教育がどのくらい必要かという点について、私見を述べてみたいと思います。結論的には、計算機についての知識は、ないよりもあった方がよいという程度ではないかと思っています。さいわい、コンピュータ・ゲームなどの普及によって、コンピュータにアレルギーを持つ若い人は少なくなってきているような気がします。アレルギーさえなければ、計算機のことは、企業に入ってからでも、短期間で修得することができると思います。特に、ハード、ソフトともに進歩の激しい昨今ですから、逆に古いシステムに習熟しすぎているということが足枷にならないとも限らないのです。ここでも、知識も必要ですが、もっと大切なのは意欲とセンスではないかと思います。

ここまでは、若干、知識偏重教育への批判めいた調子で述べてきましたが、当然、専門に関する基礎的な知識を期待していることはいうまでもありません。
うわべだけではない、しっかりとした知識をじっくりと教育して頂きたいと思います。

さらに、情報化学はあくまでも化学の一分野でありますから、化学に対する十分な知識と興味が不可欠であろうと思います。情報化学が研究対象とする「物」への関心から遊離してしまっては、その存在の価値がなくなってしまいます。化学を正しく、深く理解するための方法論として情報化学があるという認識が最も大切なことであると思っています。

教育ということからは少し離れ、大学での研究という点について、最後に言及しておきたいと思います。情報化学は、情報管理の分野においても、理論計算の分野においても、あるいはケモメトリックスの分野においても実際の化学の問題（分子設計や合成反応設計あるいは構造同定）を解決することを目的としています。このような情報化学の一層の進歩のためには、現実に解決したい問題、すなわちニーズを抱えている産業と基礎研究、理論研究というシーズをもっている大学との共同研究が今後ますます必要になってくるものと思います。

現状では、腹蔵無く両者が手の内をみせながらの共同研究というよりは、ある程度の距離をおいての委託研究という形式が多いよう思われます。両者の信頼関係に基づいた、より親密な産学共同が、望まれるところです。

いづれにしても、情報化学は、若い学問でありますが、近い将来、化学研究に必須の方法論となることを信じています。したがって、企業としては、有為の若手研究者のパワーを大いに期待しているところであります。

部会行事

第１５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：11月25日（水）～27日（金）
会　場：京都大学薬学部（京都市左京区吉田下阿達町），京都教育文化センター（京都市左京区聖護院川原町）。　［交通］京阪電鉄丸太町駅下車　徒歩８分（京都大学薬学部），徒歩４分（京都教育文化センター）

なお，本討論会は第20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データベースおよび知識ベース，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18日（土）

１件ごとにＢ５判（縦）の用紙に横書きで次の事項を記入のうえ，下記あてお送りください。　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，ポスターの発表に切り換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18日（金）

講演１件についてＡ４判用紙４枚。　他に半ページの英文要旨を添付してください。記入要領の詳細は申込みを受理したのち送付します。

懇親会　11月26日（木）　18時から，　京都教育文化センターで第20回構造活性相関シンポジウムと合同で開催します。　会費：予約6,000円，当日7,000円

参加登録費（構造活性相関シンポジウムと共通）

予約（一般）6,000円，(学生）4,000円。当日（一般）7,500円，(学生）　5,500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。　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。

参加登録・懇親会予約・要旨集前送申込締切　10月15日（木）

申込方法　　Ｂ５判（縦）要旨に横書きで，氏名・勤務先・住所(電話,ＦＡＸ)，学生は指導教官名，懇親会出欠，要旨集前送希望の有無をご記入のうえ，下記あてお送りください。　なお，予約申込みの方は締切日までに下記銀行口座へ所定の金額をお振込みください。　確認後，確認書をお送りします。

予約申込先：606 京都市左京区吉田下阿達町　京都大学薬学部　町田勝之輔

銀行口座　銀 行 名　第一勧業銀行百万遍支店
　　　　　口座番号　普通預金　476-1749221
　　　　　名　　義　情報化学構造活性実行委員会

問合せ先：606 京都市左京区吉田下阿達町　京都大学薬学部
　　　　町田勝之輔(電話075-753-4523)，多賀徹(電話075-753-4533)

情報化学部会収支報告書

(平成3年3月1日～平成4年2年29日)

〔収 入 の 部〕 (単位：円)

科目	予算額	実績額	差異
部会費	4,540,000	4,426,619	△ 113,381
正部会員 (会員)	(800,000)	(977,652)	(177,652)
正部会員 (非会員)	(120,000)	(125,467)	(5,467)
学生部会員 (会員)	(15,000)	(18,333)	(3,333)
学生部会員 (非会員)	(5,000)	(167)	(△ 4,833)
法人部会員	(3,600,000)	(3,305,000)	(△ 295,000)
事業費	250,000	21,000	△ 229,000
広告掲載料	550,000	210,000	△ 340,000
合計	5,340,000	4,657,619	△ 682,381

〔支 出 の 部〕 (単位：円)

科目	予算額	実績額	差異
Bulletin費	2,280,000	1,878,340	△ 401,660
事業費	1,000,000	840,303	△ 159,697
会議費	752,000	637,392	△ 114,608
事務費	578,000	460,582	△ 117,418
事務負担金	730,000	730,000	0
合計	5,340,000	4,546,617	△ 793,383

収支差額	0	111,002	111,002

第６３春季年会 報告

近畿大学Ｂ４会場において３月２８日（土）に化学情報・計算機化学に関する研究発表が行われた。あいにくの雨天ではあったが、会場は満員の盛況で立ち見の方もおられ、活気あふれる研究発表および質疑討論がおこなわれた。

今回は昨年と同様に一般講演と部会ミニフォーラムの形式の２種類の発表がおこなわれた。一般講演は１４件、ミニフォーラムは５件であった。

一般講演の内容は午前のセッションで、リッジ回帰分析のＱＳＡＲへの応用、ＰＬＳ解析のペプチドＱＳＡＲへの応用、ＨＭＧ－ＣｏＡ還元酵素阻害剤のＣｏＭＦＡ法による3-D ＱＳＡＲ、ＭＤ法によるイオン交換ゼオライトの研究、およびＭＯ計算結果の表示ソフトウェアの研究であった。午後のセッションではタンパク質の立体構造に関する研究、ニューラルネットワークによる酸強度の計算、ニューラルネットワークによるＩＲスペクトルからの官能基の推定に関する研究が報告された。さらに有機合成設計関係（ＣＡＳＩＮＯ、ＡＩＰＨＯＳシステム）が２件、構造解析関係（ＣＨＥＭＩＣＳ、ＰＡＳＥＯシステム）２件、有機化合物の命名法と構造処理のユーザインターフェイスに関するものがそれぞれ１件づつ発表された。

部会ミニフォーラムは５人の講師の方が多様なトピックスについて３０分づつ話題を提供された。内容は（１）社内のコンピュータシステム紹介とタンパク質設計への応用、（２）情報システムのソフトウェアの役割と位置付け、（３）パソコンソフトウェアの現状、（４）化学構造の整理と学習のためのシステム、（５）ケモメトリックスによる海洋での植物プランクトンの識別、定量に関する研究であった。

午後のセッションでは活発な討論が止まらず午後５時の終了予定が２０分ほど延びてしまった。これは多くの方々が化学情報・計算機化学に多くの期待を寄せているためだと考えられる。全プログラム終了直後に情報部会総会が新部会長の大澤映二先生の進行で開催された。

この分野は年々聴衆の方々が増加している傾向がみられる。今回プログラムのスタートが午前１１時１０分であったが、もっと早く開始し、できればコーヒーブレークなどの時間を設けて部会員相互のコミュニケーションがはかられれば良いと思った。最後に座長をされた先生方に感謝致します。

（文責・編集委員会）

関 連 行 事

第２０回構造活性相関シンポジウム

共催：日本化学会・日本薬学会・日本農芸化学会・日本農薬学会・日本生物物理学会・構造活性相関懇話会

日　時：　11月25日（水）～27日（金）

会　場：　京都教育文化センター（京都市左京区聖護院川原町）

［交通］京阪電鉄丸太町駅下車徒歩４分

討論主題　生理活性に関連した構造活性相関

なお，本シンポジウムは第15回情報化学討論会と併催されます。

講演申込締切　7月18日（土）１件ごとにＢ５判(縦)の用紙に横書きで次の事項を記入のうえ，下記あてお送りください。

a)講演題目，b)発表者と所属（講演者に○印），c)連絡先

講演要旨締切　9月18日（金）　講演１件につきＡ４判用紙４枚。　他に半ページの英文要旨を添付してください。　記入要領の詳細は申込みを受理したのち送付します。

懇親会　11月26日（木）　18時から，　京都教育文化センターで第15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（一般）6,000円，(学生)4,000円。　当日(一般)7,500円，(学生)5,500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。　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

参加登録・懇親会予約・要旨集前送申込締切　10月15日（木）

予約申込方法　　Ｂ５判（縦）要旨に横書きで，氏名・所属・住所（電話，ＦＡＸ），学生は指導教官名，懇親会出欠，要旨集前送希望の有無をご記入のうえ，下記あてお送りください。　なお，予約申込みの方は，締切日までに下記銀行口座へ所定の金額をお振込みください。　確認後，確認書をお送りします。

予約申込先　606 京都市左京区吉田下阿達町　京都大学薬学部　町田勝之輔

銀行口座　銀 行 名　第一勧業銀行百万遍支店

口座番号　普通預金　476-1749221

名　　義　情報化学構造活性実行委員会

問合せ先　606 京都市左京区吉田下阿達町　京都大学薬学部

町田勝之輔(電話075-753-4523)，多賀徹(電話075-753-4533)

611 宇治市五ケ庄　京都大学化学研究所植物化学研究部門

西岡孝明(電話0774-32-3111 内線2167)

Third International Conference on Chemical Structures
ご案内

日時 ： 1993 年 6 月 6 日（日） - 10 日（木）
場所 ： Leeuwenhorst Congress Center
Noordwijkerhout, The Netherlands

主なトピックス ： 分子モデリング、化学構造表現、構造活性相関、
合成・反応予測、三次元構造の表現・検索、
分子の性質の予測・検索、
化学構造検索のアルゴリズム、化学反応の表現・検索、
化学構造・反応の類似性の測定、構造推定、
化学構造・反応の自動分類

Sponsors: Chemical Structure Association
Division of Chemical Information of the
American Chemical Society
Chemistry-Information-Computer
Division of the Gesellschaft Deutscher Chemiker
Royal Netherlands Chemical Society
RSC Chemical Information Group

講演申込締切 ： 1992 年 8 月 1 日
講演要旨締切 ： 1992 年 11 月 15 日

詳細案内書（申込書付）をご希望の方は、下記までご請求下さい。

113 東京都文京区弥生 2-4-16 学会センタービル
社団法人 化学情報協会　　千原 秀昭
（電話 03-3816-3389　　FAX 03-3816-7826）

記　事

1992-5-15

CICSJ Bull,10(3)1992

「著作権とデータベース」

(筑波大学)

藤原　譲

藤原　譲

昨今カメラの自動焦点機構やゲーム機の表示について、米国で特許の訴訟が日本側の巨額な特許料の支払いで決着したことは、ニュースで大きく報じられ議論が起こっている。　技術的にも開発の経緯からも支払う必要がないとの考えもあるが、陪審制や法体系、訴訟戦略等の違いで日本側の主張を通すことが困難な状況の中でのやむを得ない選択と思われている。　いずれにしても知的所有権の問題は、日米経済摩擦との関連もあってこれから一層重要になり、慎重な取り扱いを要する事になる。

科学技術の研究開発にとって基盤である情報は、特許または著作権が知的所有権の対象である。　データベースやソフトウェアは著作権として保護、規制される事になっているが、まだ製品の実用化の歴史が浅く、我国においても国際的にも法体系の整備が充分でなく、実務の習慣や制度も確立には程遠いのが現状である。　とは言え情報の原著者、提供業者、流通業者及び利用者の全てに取って重要事項であるから、この際現状を理解しておくことは必要であろう。

そもそも著作権法でいうところの著作物とは「思想又は感情を創作的に表現したものであって、文芸、学術、美術又は音楽の範囲に属するもの」(著作権法第2条1項1号)として定義されている(1)。　さらに具体的には①小説、脚本などの言語の著作物、②音楽の著作物、③舞踊又は無言劇の著作物、④絵画、版画等の美術の著作物、⑤建築の著作物、⑥地図又は図面などの図形の著作物、⑦映画の著作物、⑧写真の著作物、⑨プログラムの著作物の9種類に分類されている。　さらに、翻訳のように原作に創作性を加えたものは、原作とは別の二次的著作物とされている(2条12項11号)。　辞典、雑誌などの編集したものでは記事やデータの選択、又は配列により創作性があるものは編集著作権を生じる(12条)。　さらにここでの関心事であるデータベースは論文、数値等の集合物で、これらの情報を電子計算機で検索できるように体系的に構成したものとし、その情報の選択又は体系的な構成により創作性があるものはデータベースの著作権を有するとみなされる(12条の2、2條1項10号の2)。

著作権の内容

著作者には著作権が認められるが、この権利は特許権等と異なり、著作物を創作した時点で著作者に自動的に発生するもので、著作者にのみ属し譲渡や相続の対象にならない著作者人格権と譲渡や相続の対象となる財産権としての著作権とに分けられる。

前者は未公表の著作物を公表するかどうかを決めることが出来る権利である公表権、著作物を公表する際に氏名を付するかどうか、付すとした場合、実名かペンネームかを決めることができる氏名公表権及び、著作物の内容や題名を著作者の意に反して改変されていないという同一性保持権の３つがある。

後者の著作権は印刷、写真、複写、録音、録画などにより著作物を有形的に再製する複製権が最も基本的な権利である。　また著作物を公に上演、又は演奏する上演権、演奏権や、著作物を放送したり有線送信する放送権、有線送信権等もあり、データベースのオンラインサービスも有線放送権に含まれる。さらに口述権、展示権、上映権、頒布権、貸与権、翻訳権、編曲権、変形権、翻案権、二次的著作物の利用権等もあるが、ここでは説明を省略する。

一方著作物の伝達や利用に重要な役割を果たしている実演家（歌手、俳優など）、レコード製作者、放送事業者、有線放送事業者等にも著作者に準ずる権利が与えられており、著作隣接権と呼ばれる。　これは出版権も含むとの考えがあり、データベースの場合に出版者がこの権利を主張することもあり実務的に重要であるが、権利の範囲とその許諾条件等の基準が確立されていない。米国などではこの点を契約によって分離しているので問題にならないことが多いが、我国では契約ではそこまで言及していないのが普通であり、著作権や編集権が隣接権によって制約される場合が起こっている。

データベースに関する課題

著作権は上述のように各種の著作者に与えられるので、権利とその行使に関しても著作物によって大きく異なる事がある。　科学技術関係の原著論文では、著書も編集者である学会も流通を図ることが第一義である場合は、著作権料の確保が重要である場合とは状況が異なるにも拘らず、隣接権の関係で混乱が生じているのが現状である。

これに関しては、印刷物の複写について複写権センターが設立され、複写機の処理が集中的に行えるようになりつつあることは喜ばしいことである。　データベースに関しても同じような集中的処理機構ができればデータベースの構築や流通が円滑になると期待される。　このことには出版社の版面権に関する議論がある。

また別にデータベース権は基本的には編集権であることが多く、編集著作物としての創作性が明確でないことも厄介な問題である。 さらにデータの内容に関しての責任も権利に対する義務の面からと、原著者との関係から処置の基準が必要である。

参考文献　（１）川瀬　真　「著作権制度の概要について」
情報の科学と技術 40(6)p384-390(1990)

海外動向

MEETINGS

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).

28 March-2 April 1993.
205th ACS National Meeting.
Denver, CO.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

August, 1993.
Gordon Conference on QSAR.
Tilton, NH.
Contact: Alexander M.Cruikshank, Gordon Research Conferences, Gordon Research Center, University of Rhode Island, Kingston, RI 02881-0801(401-783-4011;FAX:401-783-7644)
22-27 August 1993.
206th ACS National Meeting.
Chicago, IL.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

文献紹介

〔コンテンツリスト〕

COMPUTER & CHEMISTRY

☐ VOL.16, NO.1, 1992

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION

AND COMPUTER SCIENCES

☐ VOL.32, MARCH / APRIL 1992

ISSN 0913-3747

CICSJ Bulletin

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

オンライン検索システムの最近の動向　特集号

日本化学会
情報化学部会

Volume 10, Number 4
July 1992

目　　　次

特集：オンライン検索システムの最近の動向

ＪＩＣＳＴ化合物辞書とＪＯＩＳ－ＩＩＩとの結合

日本科学技術情報センター
荒木啓介

１．始めに

ＪＩＣＳＴでは、１９８１－１９８６年の科学技術庁振興調整費プロジェクトによる予算で、有機化合物の体系名から分子構造情報を自動作成する化合物辞書システムを開発し、他のファクトデータベースと結合して、ＪＯＩＳ－Ｆとしてサービスしている。

一方１９８９年にレベルアップしてスタートした文献情報のオンラインシステムＪＯＩＳ－ＩＩＩでは、そのデータベース作成の段階で化合物辞書システムを経由して化学物質の索引を高度化することが可能になった。　しかしながら、実際のデータ入力の対象になる文献を見てみると、化学物質の内容や表現形式は多種多様であり、簡単な構造や名称のもの、複雑で難解な構造や体系名を持つもの、慣用名や商品名のみのもの、構造図の記載が有る場合や無い場合等々、バラエティーに富んでおり、またその正確さや信頼性についてもまちまちである。

これらに的確に対処するために、物質索引の対象雑誌を段階的に増やしつつ要員の訓練行うと共に統計データを取得し、経験を重ねて次の段階へと徐々に移行することとした。これにはかなりの時間を要するが、相応の予算を使い人を組織しているからには、途中の段階ではあっても可能な限り役に立つ物質索引を提供することが求められる。そのため情報部では、主として化学の各分野（有機，物理化学，生化学，医学薬学，農芸化学など）から、有機化合物が多く出現する重要な雑誌を選定するとともに、最もニーズが多く期待の大きい医学薬学分野の雑誌を１９９１（平成３）年から全面的に対象とすることとした。

文献はそこに出現する化合物数、難易度を勘案し、ＡＡ，Ａ，Ｂ，Ｃの４ランクに分け、所要時間や作業料金の管理などの便宜を図ることとした。　今後の拡張計画は、予算その他で変更は有り得るものの、９２年度　３５，０００文献，９３年度　５３，０００文献，９４年度　６３，０００文献と拡大し、とりあえず、有機低分子化合物については、ＪＩＣＳＴで処理する全文献が化合物辞書方式で索引されることになる。　尚この間、従来方式のシソーラスに基づく物資索引も並行して行われる。

２．文献の主題としての物質索引

文献および抄録をチェックし、一般の事項索引を行う担当者が、以下の基準に従い対象となる化合物にマークを付ける。

（１）主題を表すものとしての化合物が、新規なもの。すなわち、

- 新規合成物
- 新発見物など

（２）新しい知見と結びついた既知の物質

- 出所，存在が新しい
- 合成，製造法が新しい
- 物性，生物活性などが新しい

・用途などが新しい

（３）新しい知見に対し、物質を補助的，限定的に索引する必要がある場合。
・新しい分析手法などの対象化合物の例
・新反応，新合成法，新触媒などの適用例

なお、化学合成，製造法などの論文について、出発物質，中間体を含む全ての出現物質を採択して反応が追跡できるような、網羅的な索引は行わず、主題の中心となる物質、特に生成物に重点を置いて索引している．

レビュー，解説記事については、特定の限られた少数の物質が主題で有る場合には索引するが、極めて多数の化合物が問題になっている場合には、索引しない。

索引対象の低分子有機化合物は、平面構造以上で分子構造が明確な、水素を除いた構成原子数　２４７以内の化合物、およびそれらの成分の明確な混合物，ラセミ混合物，付加塩，水和物，オニウム塩，相対的にのみ立体構造の判明している化合物などである。

医薬品などの付加塩や水和物について、特定の商品名や治験番号に結びついた化合物が主題であったり、塩とフリーの違いを問題としている場合は、塩などの形でも索引するが、生体に投与した後の生物活性のみを問題にしている場合には、フリーな形でのみ索引する。

同位体ラベルしたものも、単にトレーサーとして、薬物の代謝研究に用いたような場合は、ラベルしていない形で索引する。

３．物質索引の処理工程概要

上記の基準によりマークを付けられた物質は、次の物質索引工程で、専門家によって索引されるが、先ず、マークされたものが慣用名，商品名，治験番号などであれば、これらが化合物辞書に既登録か否かを、ＪＯＩＳ－Ｆの検索によって調べる。既登録の場合はそのものを記入し、未登録の場合はその体系名を組み合わせる（原稿用紙の関連情報欄に、各名称のＩＤ番号をイコール記号　＝　で結んで記入する）。

文献の化合物が体系名のみの場合にはそれを、また構造図のみの場合は新たに命名する。ただしいずれの場合にも、ＪＩＣＳＴにおいて若干の修正を施したＩＵＰＡＣ方式による日本語の体系名によって記述する。

システム的な制約により、１文献当たり索引できる化合物数は、４０名称まで、１名称で最大３００文字までである。またマーカッシュ方式により、類似化合物をまとめて記述する場合には、９９個の個別の化合物に展開できる式を、９式まで記入できる。

記入の終わった原稿はパンチに回され、磁気テープ化されたものが計算機処理される。第１段階の処理では、入力名称が辞書の名称ファイルと照合され、マッチしたものはただちにそのＩＤ番号（ＳＮ　Substance Number)と文献番号の対応が取られ、文献ファイルに返却される。

アンマッチの体系名は第２段階で辞書システムのプログラムにより構造組立が行われ、成功したものは更に既登録構造ファイルとの構造照合が行われる。マッチしたものは異なる体系名で同一物質のものとみなし、自動的にマージする。アンマッチの場合は新規物質とみなされ、新たなＳＮを与えられて新エントリーを作り、共に文献ファイルに返却される。

構造組立に失敗したものおよび未登録の慣用名を伴うものは、修正とスペル等の確認のためにゲラ出力される。

ＳＮと入力された通りの名称を取り込んだ文献ファイルが全て校了になると、定期的にＪＯＩＳの検索システムに渡される。　新たな化合物エントリーを登録した辞書データベースも、ＪＯＩＳ－Ｆに追加ロードされる。

４．化合物辞書の検索

ＪＯＩＳ－Ｆの化合物辞書データベースは、ファクト系データベースなどから登録した約３２万、　３７，０００文献からの、延べ２１５，０００以上，異なりで９２，０００以上の化合物を合わせて、１９９２年５月末現在で４１万を越えた。

これらは以下の方向から、あるいはそれらを組み合わせて検索可能である。

（１）名称（和名，英語名）

完全一致，前方一致，後方一致，中間任意一致の条件にて　、慣用名，体系名，体系名のフラグメント

（２）分子式

Ｈｉｌｌ方式で記述された分子式の全体およびフラグメント

（３）構造上の特徴

①環数　②環系数　③構成環の員数　④構成環の元素配列　⑤構成環の元素組成　⑥鎖系数　⑦鎖系の形状　など

これらは、専用の検索コードと各々の特徴を示すデータ内容をくみあわせて、検索キーとする。

（４）質問構造の作図による構造サーチ

上記（１）－（３）の検索では完全を期しがたいか、そのような検索のためのキーを設定しがたい場合あるいは何よりも、直接構造を描くことによる簡便で分かりやすいサーチを望む時に行う。

作図には数種類のコマンドを用い、図形の描画、原子種，ボンド種の指定、フリーサイトの指定（この指定が無いと、描いた図形そのものの完全一致検索となる），立体化学の指定（特定の立体化学的異性体のサーチが可能であるが、この指定を行わないと、平面構造的には等しい全ての異性体を検索する）などを行って、質問構造を作る。

構造検索は、スクリーンサーチと　ＡＴＯＭ　ＢＹ　ＡＴＯＭ　サーチの２段階で行なわれる。

（５）混合物のサーチ

ＪＩＣＳＴ化合物辞書では、成分の明確な混合物，ラセミ混合物，また相対的な立体化学のみが判明している化合物を広い意味の混合物として扱い、成分（あるいは立体構造の確定している異性体）のＳＮ番号の組み合わせ（量比が判明している混合物の場合はその情報も持つ）で表現している。

検索においては、上記（１）－（４）の方法によって得た個々の純物質の集合に対し、￥ＭＩＸ　コマンドを指定すると、これらを成分とする混合物が検索できる。　逆に、ある混合物に対して与えられた慣用名をサーチし、その成分を知りたい時には、￥ＣＯＭＰ　コマンドにより目的を達することができる。

（６）検索結果の出力

グラッフィク端末による出力図形を希望する場合には　￥Ｄ、名称のみを出力する場合には　￥Ｐ　Ｎ　のコマンドにより、回答出力できる。

ＪＯＩＳ－ＩＩＩの文献検索の場合と同様、￥ＯＦＦ　コマンドによってオフライン回答書の注文も可能である。

５．文献データベースとの結合

目下のところ、文献のＪＯＩＳと化合物辞書のＪＯＩＳ－Ｆはホスト計算機が異なるため、同一の会話内での自由な相互の渡り検索はできない。
端末側の通信ソフトに辞書検索結果のＳＮをキープし、ＪＯＩＳに接続しなおしてそのキープしたＳＮをアップロードして文献をサーチする機能が加えられれば、検索者側で渡り検索を実現できよう。パソコンに詳しい人であれば、比較的容易につくれるかもしれない。

回答化合物数が少ない場合には、ＳＮをメモし、ＪＯＩＳに再接続して、ＳＮによって文献をサーチすることができる。　これによって得られた文献の集合に対し、一般のキーワードを　ＡＮＤ　演算し、より精密な検索結果を得ることができる。

以下に、化合物辞書の検索出力例と　対応して検索された文献の例を示す。

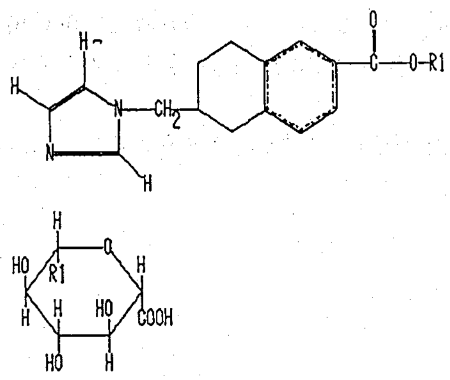
JOIS 文献ファイル 出力例

¥P
#000001* JICST COPYRIGHT
CN 90A0683718, C91031149, L91022133
TI ヒトにおける新規トロンボキサン合成阻害薬6-(1-イミダゾリルメチル)-5,6,7,8-テトラヒドロナフタレン-2-カルボン酸の分解と効果
ET Disposition and effect of the new thromboxane synthetase inhibitor 6-(1-imidazolylmethyl)-5,6,7,8-tetrahydro-naphthalene-2-carboxylic acid in man.
AU TANAKA M, ONO K, HAKUSUI H, TAKEGOSHI T, SHIOZAWA T (Daiichi Pharmaceutical Co., Ltd., Tokyo, JPN); NII S, SHIBATA H (Kitasato Univ., Kanagawa, JPN)
JN A0462A (ARZNA) (0004-4172) Arzneim Forsch
VN VOL.40, NO.6 PAGE.712-716 1990
CI (A) (a1) (EN) (DEU) (写図3, 表1, 参14)
CC GW14020X, CF07083X (615.273.03, 547.781/.785)
KW 抗凝固薬; イミダゾール誘導体; テトラリン誘導体; カルボン酸; 二環; 薬物動力学; ヒト; 経口投与; グルクロン酸抱合; 酵素阻害剤; トロンボキサンシンテターゼ; 尿中排せつ
FT [DP-1904]
SW DP-1904(J325.767C); 5,6,7,8-テトラヒドロ-6-[(1H-イミダゾール-1-イル)メチル]ナフタレン-2-カルボン酸・塩酸塩(J325.767C); DP-1904グルクロニド(J325.326K); DP-1904 Glucuronide(J325.326K); 5,6,7,8-テトラヒドロ-6-[(1H-イミダゾール-1-イル)メチル]ナフタレン-2-カルボン酸(β-D-グルコピラヌロノシル)(J325.326K)

S: 出力終りました (SSNO[2] から 1件)
U: ^PRF

JICST 化合物辞書 出力例

化合物辞書検索システム DATE:92.01.13 PAGE: 3
JICST COPYRIGHT
#00001
SN=J325.326K (C)
分子式=C21H24N2O8
分子量= 432.429



S: コピーをお取り下さい 続けますか? (Y/N)
U: >^PRF
>
¥LOC SN:J ¥P N MF: ¥E & ^NOP] ^PR1] ^PRF] ¥AEND] ^DEND]

化合物辞書検索システム DATE:92.01.13 PAGE: 5
JICST COPYRIGHT
#00001
体系名=5,6,7,8-テトラヒドロ-6-[(1H-イミダゾール-1-イル)メチル]ナフタレン-2-カルボン酸(β-D-グルコピラヌロノシル)
慣用名=DP-1904 Glucuronide
慣用名=DP-1904グルクロニド

「ＤＩＡＬＯＧ情報検索システムの最近の動向」

株式会社　紀伊國屋書店
上森　まり子

コンピュータ技術の発達にともない、文献・資料の調査にオンラインデータベースを利用する機会が増えている。　この情報源として、日本で最初に提供されたオンラインサービスは、1976年、日本科学技術情報センターによるＪＯＩＳサービスである。　その後、1978年に特許データベースのＰＡＴＯＬＩＳが、1979年にはビジネスデータベースのＮＥＥＤＳ－ＩＲがサービス開始された。

通商産業省の「データベース台帳総覧」によると、日本で使用できる商用データベース数は、1990年度には 2,354種に達している。　またデータベース・サービスの市場規模は、1990年度で 1,886億円となり、情報サービス業の売上高の 3.2%を占めるようになってきている[1]。

1．ＤＩＡＬＯＧ情報検索システム

米国では、ＤＩＡＬＯＧ情報検索システム（以後ＤＩＡＬＯＧと省略）が、米国航空宇宙局（ＮＡＳＡ）の委託を受け、ロッキード社のシステムラボラトリーで1972年に誕生した。　当初、提供されているデータベース数は、ＥＲＩＣ（教育学）とＮＴＩＳ（科学技術）の２種にすぎなかったが、その後、増加を続け、現在では約４００種のデータベースを提供するサービスに成長し、世界でも最大の情報検索システムの一つになっている。

ＤＩＡＬＯＧにおけるデータベース数の増加の状況を、図１に示す[2-4]。　過去２０年間にわたりデータベース数は、順調に増加を続けている。　1992年も、ビジネスおよび科学分野のデータベースの増加が続いており、特に、フルテキストデータベースの増加が著しい。

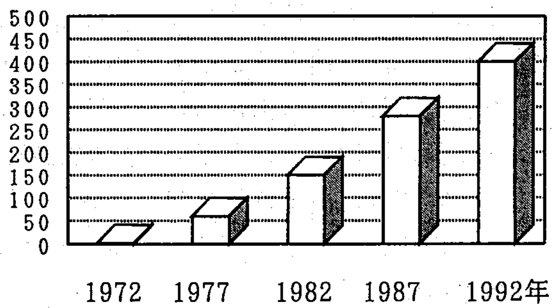


図１．ＤＩＡＬＯＧのデータベース数

2．ＤＩＡＬＯＧで検索できるデータベース

ＤＩＡＬＯＧで提供されている約 400 種のデータベースは、科学技術分野に限らず、あらゆる分野にわたっている。 図１には、ＤＩＡＬＯＧの索引データベースであるＤＩＡＬＩＮＤＥＸでのみ使用可能なスーパーカテゴリーに基づき、データベース野主題別分布を求めた結果を示す（1992年７月現在）。

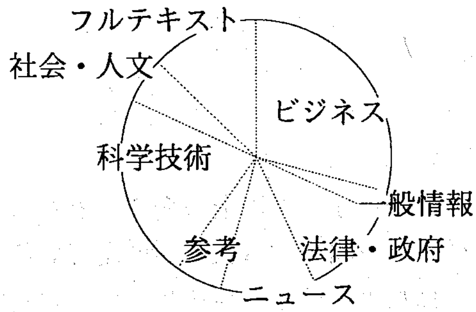


図２．データベースの主題分野

データベース・サービスの発達のきっかけとなった科学技術分野のデータベース、ビジネス分野のデータベースが、各々、約25％を占めている。 従来、科学技術関連の学術文献を収録するデータベースが中心であったが、ビジネス分野の情報が大きな割合を占めるようになりつつある。 また、主題とは異なるが、オンラインで全文を検索・出力することのできるフルテキストデータベースも、増加の傾向にある[5]。

したがって、ＤＩＡＬＯＧの利用により、化学、医学、規制、毒性、工学、特許、生物、ライフサイエンス、ビジネス、経済、市場、統計、教育、心理、法律、新聞情報などのあらゆる情報を、一つのコマンドシステムを用いて検索し、情報収集が可能となる。

3．ＤＩＡＬＯＧの改良

検索可能なデータベースを増やすばかりではなく、より使いやすいシステムへと、検索システムの改良が続けられている。 ＤＩＡＬＯＧの主な改良の経緯を表１に示す。

商用サービスが開始されたあと、①検索結果のレコード中に書かれている指定したデータを検索式として記憶させるＭＡＰコマンド、②検索結果のレコード中の書かれている指定したデータをオンラインで表にまとめるＲＥＰＯＲＴコマンドの提供など、新しい検索機能の提供がおこなわれた。

1985年には、ＤＩＡＬＯＧバージョン２と称して検索ソフトウエアの全面改良をおこない、さらに電子メールサービスとしてのＤＩＡＬＭＡＩＬの提供も開始された。

ＤＩＡＬＯＧは、基本的には検索コマンドを使用して検索するシステムであったが、コマンドを習得する時間のないエンドユーザーのために、メニュー方

式による検索サービスを1987年に開始した。 これには、科学技術情報検索のための DIALOG MEDICAL CONNECTION(DMCと略) およびビジネス情報を検索するためのDIALOG BUSINESS CONNECTION(DBCと略) がある。 いずれも、画面に表示されるメニューの中から必要な項目を選択・指定すると、自動的に検索がおこなわれるためエンドユーザーにとって使いやすいものであった。 しかし、DMCとDBCでは、検索できるデータベースが限られているという、不自由があった。 現在では、DIALOGで利用可能なほとんどのデータベースは、1990年のDIALOG Menusの提供により、共通のメニュー画面に基づいて、コマンドを使用せずに検索できるようになっている。

表1．DIALOGの改良の歴史

1972年	DIALOG商用サービス開始
1979年	日本でDIALOGをサービス開始
1981年	MAPコマンドを提供
1984年	REPORTコマンドを提供
1985年	DIALOGバージョン2
1986年	DIALMAILを提供
1987年	メニュー検索サービスを開始
1988年	OneSearchを提供
1989年	重複レコードの除去機能を提供
1990年	DIALOG Menusを提供
	JOURNAL NAME FINDER を提供
1991年	COMPANY NAME FINERを提供
	PRODUCT NAME FINDER を提供

さらに画期的な改良が続き、複数のファイルを同時に検索できるOneSearchが1988年に提供されるようになった。 次に同じ文献に関するレコードを除去したいと考えるのは誰しも同じであり、1989年、重複レコードをオンラインで除去できるようになった。

DIALOG社は、検索システムを改良するだけではなく、検索システムをバックアップするデータベースの提供もおこなっている。 1990年に提供が開始されたJOURNAL NAME FINDER データベースは、「各データベースで雑誌名の表記方法が異なっているため、特定した雑誌が収録されているデータベースを探しにくい」という問題を解消するために、誕生した。 雑誌名を検索語としてこのJOURNAL NAME FINDER データベースを検索することにより、当該雑誌が収録されているデータベースを探すことができる。 これは、全データベースで雑誌名を標準化する代わりとなるデータベースである。 雑誌名ばかりではなく、会社名・製品名でも同様の問題があるため、これらの標準化の一端として、1991年、各々NAME FINDER データベースの提供を開始された。

4．ＤＩＡＬＯＧの改良方針

ＤＩＡＬＯＧの改良の歴史を簡単に紹介したが、1980年以降のＤＩＡＬＯＧサービスの改善・強化をまとめると、次の「動き」が認められる。　この動きは、そのまま現在のＤＩＡＬＯＧシステムの特徴を示している。

(1)データベース数の増加
　－－ＤＩＡＬＯＧを利用すれば、あらゆる分野の情報が得られるように、
　－－オンラインで全文を入手できるフルテキストデータベースの増加

(2)メニューファイルの増加
　－－誰でも、情報が必要な人が、自由に利用できるように

(3)ゲートウェイの増加
　－－他のコンピュータに搭載されているデータベースも、検索できるように

(4)Ｆｉｒｓｔ　Ｒｅｌｅａｓｅの増加
　－－ホットな情報をすぐに提供できるように、データベースの提供までのタイムラグを短く。　終日更新されるデータベースも登場。

(5)シングルファイル化
　－－コンピュータ技術の発達により検索処理時間が短くなったため、年代ごとに分割して提供していたデータベースを一つのファイルとして提供

(6)検索フィールドの標準化
　－－検索フィールドの標準化、および各種のNAME FINDER データベースの開発・提供

(7)出力形式の標準化
　－－検索結果を出力するときに使用する定型出力形式の番号と出力用コードを統一し、ユーザーにわかりやすく

(8)イメージ情報の提供
　－－図面・化学構造式・商標のマークなどをオンラインて提供

(9)各種の検索機能の提供
　－－これからも、新しい検索機能の提供に期待

5．参考資料

(1)㈶データベース振興センター・編．データベース白書（1992）．
(2)ＤＩＡＬＯＧ　Ｄａｔａｂａｓｅ　Ｃａｔａｌｏｇ．
(3)ＤＩＡＬＯＧ　ＡＮＮＵＡＬ　ＲＥＰＯＲＴ．
(4)長塚隆、根本勝弥．情報の科学と技術，40巻９号 597～605　(1990)．
(5)上森まり子、岩沢一男．情報の科学と技術，42巻６号 507～515　(1992)．

ＳＴＮの特徴 － データベースの統合利用

（社）化学情報協会　オンライン情報部
原　　修

１． はじめに

STN (Scientific and Techinical Information Network) International は、米国化学会の情報サービス部門である Chemical Abstracts Service (以下 CAS) 、ドイツの専門情報センターの一つである FIZ-Karlsruhe、および日本科学技術情報センターの 3 機関が共同で運営する科学技術情報ネットワークである。世界的なデータベース製作機関でもある上記 3 機関のコンピュータが専用回線で相互に結ばれており、これらに分散して搭載されている約 120 種のデータベースが、CAS によって開発された検索ソフトウェアで全世界から利用できる。STN は 1980 年に CAS が単独でサービス開始した CAS ONLINE と称する検索システムに端を発しているため、従来の利用の主体は CAS が作成する CA や REGISTRY 等の 8 データベース（現在はこれらを総称して CAS ONLINE という）であった。

しかしながら、現在 120 種ものデータベースが利用できるようになったため、これらを統合的に利用するための種々の機能が提供されるようになった。本稿では、複数データベースの「統合利用」に焦点を絞って、STN の 2、3 の特徴を紹介する。

２． STN で利用できるメニュー検索システム

現在 STN では、化学物性情報を収録するデータベース群、ならびに金属・プラスチック等の材料物性情報を収録するデータベース群の両者に対して、下記 2 種の専用のメニュー検索システムが利用できる。両分野に対して特にこのようなシステムが用意されている理由は、これらのデータベース群は、収録データが極めて専門的であるため、検索専門家には扱いにくいことが第一の理由である。収録データに通じた研究者や技術者が、通常の検索コマンドを修得しなくても、あるいは検索目的に合致したデータベースが分からなくても気軽に利用できることを目的として開発されたものである。

① 化学物性データベース用メニュー検索システム
② 材料物性データベース用メニュー検索システム

上記①のメニュー検索システムで利用できるデータベースは、現在以下の 7 種のデータベースである。

・DIPPR　　　：主要な市販化合物の物性データ（1,212 化学物質）
・HODOC　　　：有機化合物の物性、スペクトルデータ（25,500 化学物質）
・JANAF　　　：化学物質の熱力学データ（1,100 化学物質）
・NISTFLUIDS：12 種の液体の広範囲な温度と圧力下における熱物性・輸送物性データの演算
・NISTTHERMO：無機および低炭素有機化合物（1-2C）の化学熱力学データ（8,000 化学物質）
・PDLCOM　　：プラスチックの化学物質や環境に対する耐性試験結果（650 プラスチックに対する 3,300 化学試薬、および耐候・耐光・耐 X 線テストなど）
・TRCTHERMO：熱力学物性データ（7,000 化学物質）

これらの他にも、下記の化学物性データベースがあり、メニュー検索システムの準備が整えばそれらもメニュー・システムで利用できるようになる。

・BEILSTEIN：有機化合物の反応・合成、物性情報　（430 万化学物質）
・CRYSTMET　：金属、金属間化合物の結晶構造データ（21,424 件）
・GMELIN　　：無機化合物、有機金属化合物の反応・合成、物性情報（32 万 化学物質）

・ICSD　　　：無機化合物の結晶構造データ（28,952 件）
・MSDS-CCOHS：カナダの化成品に関する労働安全衛生情報（76,727 件）
・RTECS　　　：化学物質の毒性データ（101,100 化学物質）
・SPECINFO　：化学物質の13C、19F、15N、17O、31P の各 NMR スペクトルデータと IR スペクトルデータ（83,800 化学物質）

メニュー検索システムでは、各メニューごとに画面が変わり、選択すべきいくつかのオプションとそれらに対する説明が表示される。以下に「グリセリンの発火点」の検索を例として取り上げ、各画面のオプションによってメニュー検索の流れを示す。

［メニュー 1］でデータベースの指定、または検索タイプを指定する。通常、データベースは指定せず、検索式に基づいてシステムに選択させる。ここでは、化学物質検索（Specify Chemicals）、そして名称検索（Chemical Name）を指定した後、GLYCEROL と入力している。［メニュー 3］で GLYCEROL 近辺の化学物質名のアルファベット順リストが表示されるので、その中から目的とするものを選択する。［メニュー 4］でここまでの検索式が確認できる。その後、物性による検索を指定し、［メニュー 5～7］で物性に関する階層関係付きシソーラスをオンラインで表示させ、適切な物性を選択している。その後、［メニュー 8］で発火点のデータが存在することを条件として検索を実行させ、DIPPR から得られた結果をオンラインで出力させている。なお、波線部は選択したオプションを示している。

```
［メニュー1］
1 Specify Databases
2 Specify Chemicals  ──→
3 Specify Properties
```

```
［メニュー2］
1 Chemical Name  ──→ GLYCEROL ──→［メニュー3］
2 Molecular Formula
3 CAS Registry Number
```

```
［メニュー3］
   Count      Chemical Name
   -----      -------------
1    1       GLYCEROISOSTEATATE
2    1       GLYCEROKINASE
3    1       GLYCEROL  ──→［メニュー4］
4    1       GLYCEROL .ALPHA.,.ALPHA.'-DIENATHATE
5    1       GLYCEROL .ALPHA.,.ALPHA.'-DIGRICIDYL ETHER
```

```
［メニュー4］
1 Databases  SYSTEM WILL
  SELECT DATABASES
2 Chemicals --  GLYCEROL
3 Properties  ──→［メニュー5］
```

```
［メニュー5］
Select SP to enter a specific
       property name
Select MP to choose a property
       name from menu of properties
```

［メニュー－6］へ

[メニュー6]

```
1 Atomic and Molecular          8 Optical
2 Crystal                       9 Safety
3 Dencsity and Volume          10 Spectral
4 Electric/Magnetic            11 State of Aggregation
5 Electrochemical              12 Structure/Energy
6 Mechanical                   13 Thermodynamic
7 Multicomponent               14 Transport
```

[メニュー7]

```
1 Autoignition Temperature
2 Flammability Limit, Lower
3 Flammability Limit, Upper
4 Flash Point
5 Toxicity
```

[メニュー8]

```
1 Limit search to a specific
  value or range of values
  for this property
2 Accept any value or
  range for this property
```

[メニュー9]

```
1 Databases  SYSTEM WILL SELECT DATABASES
2 Chemicals --
        GLYCEROL
3 Properties
        Autoignition Temperature (any value or range)
U Specify Units System  STN
S to conduct search.
```

[メニュー10]

```
Now searching database DIPPR      1  RESULT

D  Display results
PR Print results
MS Modify Search
U  Specify Units System STN
NS Begin New Search (DELETES your search terms)
```

[メニュー11]

```
1 Chemical idetification, plus the data were searched;
2 Chemical idetification only; or
3 To see returan to CURRENT SEARCH RESULTS screen
```

検索回答の表示

```
RN    56-81-5  DIPPR
MF    C3 H8 O3
LSF   CH2OHCHOHCH2OH
CN    GLYCEROL
FN    Polyols

Autoignition Temperature
    AIT     |     |Data |Accept
     K      |%Err |Type | Code
==========+=====+=====+======
6.66000E+02|unkwn|exper|accept
```

３．　化学物性データベースの案内ファイル　－　NUMERIGUIDE

一方、STN の通常のコマンドで検索したいが、適切なデータベースが分からない、また適切な検索フィールドやデータの単位を知りたいという時には、化学物性データベース用の案内ファイルであるNUMERIGUIDE が利用できる。当ファイルには、前項のメニュー検索システムと共通の物性名に関する階層関係付きシソーラスが収録されており、適当な物性名から、そのデータを収録するデータベース、検索フィールド、単位等を調べることができる。発火点に対する NUMEIRIGUIDE のレコード例を以下に示す。

```
AN   5003  NUMERIGUIDE
PPN  autoignition temperature          ←  物性に対する優先名
UF   autoignition point
UF   self-ignition point               ←  物性に対する同義名
UF   self-ignition temperature
UF   spontaneous ignition point      単位        データベース名
UF   spontaneous ignition temperature ↓               ↓
FQ   ---------------------------------------------------------
検索       FQ         FQ Type     Default Search      File
フィー →              S=search        Unit(*)
ルド                  D=display
     -------------+---------+----------------+----------------
     AIT          S,D       K                   DIPPR
     ---------------------------------------------------------
     (*) Original file units.  For more information use the HELP
         UNITS message in the specific file.
```

４．　重複文献を識別・除去する機能

科学技術分野のオンライン情報検索は、現状では文献ファイルの利用がまだまだ大きな割合を占めている。ある検索分野に圧倒的に強い単一のファイルがあれば一つのファイルのみを利用すればよい。一方、たとえば医学・医薬分野のように有力なデータベース（MEDLINE, EMBASE, BIOSIS, CA など）がいくつかあると、同一テーマで複数データベースを検索した時の重複文献の処理が問題となるる。STN では、以下のような、同一文献に由来する異なるデータベースからのレコードを識別したり、また検索結果から削除することが

```
       [BIOSIS からのデータ]
TI  INHIBITION OF LIPID PER OXIDATION BY A NOVEL COMPOUND
    IDEBENONE CV-2519.
AU  SUNO M; NAGAOKA A
SO  JPN J PHARMACOL 35 (2). 1984.  196-198. CODEN: JJPAAZ
    ISSN: 0021-5198
```

```
       [MEDLINE からのデータ]
TI  Inhibition of lipid peroxidation by a novel compound,
    idebenone (CV-2619).
AU  Suno M; Nagaoka A
SO  Jpn J Pharmacol, (1984 Jun)  35 (2)  196-8
    Journal code: K07  ISSN: 0021-5198
```

できる。標題や著者名は重要な識別キーとして利用していないので、次頁のような同一著者の同じ標題の文献を誤って重複文献と認識することもない。

```
    [BIOSIS からのデータ]
TI  EFFECT OF IDEBENONE AND VARIOUS NOOTROPIC DRUGS ON LIPID
    PEROXIDATION IN RAT BRAIN HOMOGENATE IN THE PRESENCE OF
    SUCCINATE.
AU  SUNO M; NAGAOKA A
SO  61ST GENERAL MEETING OF THE JAPANESE PHARMACOLOGICAL SOCIETY,
    FUKUOKA, JAPAN, MARCH 23-26, 1988. JPN J PHARMACOL 46 (SUPPL.).
    1988. 89P. CODEN: JJPAAZ ISSN: 0021-5198

    [BIOSIS からのデータ]
TI  EFFECT OF IDEBENONE AND VARIOUS NOOTROPIC DRUGS ON LIPID
    PEROXIDATION IN RAT BRAIN HOMOGENATE IN THE PRESENCE OF
    SUCCINATE.
AU  SUNO M; NAGAOKA A
SO  FOLIA PHARMACOL JPN 91 (5). 1988.  295-300. CODEN: NYKZAU ISSN:
    0015-5691
```

5. CAS 登録番号の役割

CAS 登録番号 (CAS Registry Number) は、CAS 化学物質登録システム (CAS Chemical Registry System) 中で CAS が各特定化学物質に対してユニークに付与した背番号である。この登録システムは、CAS が発行する抄録誌 Chemical Abstracts の化学物質索引である Chemical Substance Index 作成時における化合物命名の手間を省力化するために開発されたものである。Chemical Abstracts に対応する CA ファイルの検索では、この番号を使って化学物質の検索をする。現在は、CA ファイルのみならず、医学、薬学、生命化学分野のデータベースから化学物性や材料物性のデータベースまで、多数のデータベースで、特定化学物質の索引・検索に CAS 登録番号を使われるようになった。現在、STN で利用できる約 120 種のデータベースのうち、実に 45 種のデータベースで CAS 登録番号による化学物質検索が行える。

REGISTRY ファイルで、ある化合物を検索し結果を表示すると、その化学物質に関する情報を収録するデータベース名が LC フィールドに表示される。次頁にビタミン C の REGISTRY ファイルからの表示例と、CA、BIOSIS 両ファイルでの簡単な検索例を示す。いずれのファイルとも、REGISTRY ファイルで得られた回答セットの L 番号で SEARCH するだけで、ビタミン C の CAS 登録番号による検索が実行できる。以上のとおり、CAS 登録番号が STN の多数のデータベースで化学物質検索の統合利用の助けとなっている。

6. おわりに

近年、STN の化学物性と材料物性を中心とするファクトデータベースは非常に充実されてきた。ファクトデータベースには、文献ファイルとは違った利用形態があり、そのための種々の機能を必要とする。その代表例が本稿で紹介したメニュー検索システムである。その他、数値データに対する単位変換・誤差指定・範囲指定等の検索機能、存在しないデータを予測するための演算機能、検索結果を見やすくするためのテーブル型表示機能などがある。

一方、どのようなファクトデータベースが世の中にあるのか、またそれらをどのように利用すればよいのか、果たして実用になるものなのかといったことを、いわゆるエンドユーザーに広めて行くのもなかなか困難な状況にある。本稿が、STN の最近の状況把握とともに、ファクトデータベースへの興味につながり、ひいてはそれらの利用拡大につながれば幸いである。

```
=> FILE REGISTRY          ←  REGISTRY ファイル

=> S VITAMIN C/CN
L1            1 VITAMIN C/CN

=> D RN CCN LC

L1   ANSWER 1 OF 1  COPYRIGHT 1992 ACS
RN   50-81-7  REGISTRY     ←  CAS 登録番号
CN   L-Ascorbic acid (8CI, 9CI)  (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN   (+)-Ascorbic acid; 3-keto-L-Gulofuranolactone;
     3-Oxo-L-gulofuranolactone; Adenex; Allercorb; Antiscorbic
     vitamin; Antiscorbutic vitamin; Ascoltin; Ascorbajen; Ascorbic
                 :
                 :
     Viforcit; Viscorin; Vitace; Vitacee; Vitacimin; Vitacin;
     ***Vitamin C*** ; Vitamisin; Vitascorbol; Xitix; Xyloascorbic
     acid, L-
LC   ANABSTR, BEILSTEIN, BIOSIS, CA, CAOLD, CASREACT, CHEMLIST, CIN,
     CJACS, CSCHEM, CSNB, DIPPR, DSL, EINECS, EMBASE, GMELIN, HODOC,
     IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, MEDLINE, PDLCOM, PHAR, RTECS, SPECINFO,
     TSCA, VTB, WHO                                ↑
                           ビタミン C の情報を収録するデータベース *
=> FILE CA                ←  CA ファイル

=> S L1 AND IMMUN?        ←  L1 によってビタミン C の CAS 登録番号
         25492 L1              による検索ができる
        149773 IMMUN?
L2         228 L1 AND IMMUN?

=> D TI HIT

L2   ANSWER 1 OF 228  COPYRIGHT 1992 ACS
TI   Ascorbic acid with cupric ions as chemotherapy for human lung tumor
     xenografts implanted beneath the renal capsule of immunocompetent
     mice
IT   ***50-81-7*** , Ascorbic acid, biological studies
        (cupric ion and, lung carcinoma inhibition by)

=> FILE BIOSIS            ←  BIOSIS ファイル

=> S L1 AND IMMUN?
         14898 L1
        606045 IMMUN?
L3         404 L1 AND IMMUN?

=> D TI RN

L3   ANSWER 1 OF 404  COPYRIGHT 1992 BIOSIS
TI   METABOLIC AND  ***IMMUNE***  EFFECTS OF ENTERAL ASCORBIC ACID AFTER
     BURN TRAUMA.
RN   ***50-81-7***  (ASCORBIC ACID)
```

* DSL, EINECS, TSCA, WHO はデータベース名ではない。化学物質の政府規制に基づく台帳等に収載されていることを示す。

部会記事

第２回　情報化学部会　講習会
ー化学者のためのパーソナルコンピュータ利用講習会ー

主催　日本化学会情報化学部会
協賛　キヤノン販売（株）

化学研究のデータのまとめや論文作成や化学計算までパソコンは便利な道具となってきました。そこで、実際にパソコン（マッキントシュ）を使って、初心者でも論文作成や簡単な化学計算ができるようになることを目的とした講習会を企画しました。お気軽にご参加ください。

日時：平成４年１２月９日（水）　１０：００～１６：００

会場：キヤノン販売（株）　セミナールーム　東京（詳細は後日案内）

参加申し込み：平成４年１０月３１日まで　（定員４０名になり次第締切）

参加費：１０、０００円（但し、情報化学部会非会員は１５、０００円）
（注）申し込み締切日以後のキャンセルは、参加費相当の取り消し料をいただきます。参加できなくなった時はできる限り代理の方を立ててください。

内容：マッキントッシュを１台を２人で触りながら講習する。
［午前の部］　１０：００～１２：００
マッキントッシュの基本的な使い方　　キヤノン販売（株）
ワープロ・表計算
［午後の部］　１３：００～１６：００
化学関係ソフトの使い方　　京都大学　渡辺芳人先生
化学構造式の書き方（ＣｈｅｍＤｒａｗ）
化合物立体構造の作成と計算（Ｃｈｅｍ３Ｄ）
報告書の作成法（上記ソフトの統合した使い方）

参加申し込み方法：ＦＡＸまたは葉書で「第２回情報化学部会講習会申し込み」と必ず標記し、参加者氏名、年齢、所属、連絡先（住所、電話番号、ＦＡＸ番号）を明記して、下記お申し込み下さい。

申し込み、問い合わせ：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　講習会係
電話０３－３２９２－６１６３、ＦＡＸ　０３－３２９２－６３１８

渡辺先生の書かれた「Macintoshによる　科学論文の仕上げ方」をテキスト（当日配布）に使います。
また、当日マッキントシュのハード・ソフトの割引販売があります。どうぞご利用下さい。
なお、情報化学部会の入会（年会費２、０００円）は常時受け付けております。問い合わせは上記「情報化学部会」までお願いします。

□　参加費支払方法
①郵便振替（口座番号：東京7-6058、名義：社団法人日本化学会。通信欄に第２回情報化学部会講習会と明記）、②現金書留（第２回情報化学部会講習会と明記）、③銀行振込（第一勧業銀行、神田支店、普通預金、№1073505 、名義：社団法人日本化学会。振込日をお知らせください。）

計算化学講演会

共催：日本化学会情報化学部会
新世代研究所
日本化学プログラム交換機構

９月２２日からのＣＡＭＳＥ’９２に出席のため来日される下記４博士による講演会を企画しました。計算化学の最先端を行く方々ですので興味あるお話をして頂けることと思います。ご来聴をお待ちしています。

日時：平成４年９月２４日（木）　午後１時～５時
場所：日本化学会講堂（東京都千代田区神田駿河台１－５）
講師および講演題目：
Prof. N.L. Allinger (Univ. Georgia) "Recent Work on Molecular Mechanics & Conformational Analysis"
Prof. K.N. Houk (UCLA) "Computational Studies of Organic Stereo-selectivities"
Dr. J.J.P. Stewart "Recent Advances in MOPAC"
Prof. W.C. Still (Columbia Univ.) 題　未定
会費：無料
連絡先：お茶の水女子大学理学部化学科　平野恒夫
Tel. 03-3943-3151 (内線 551);　FAX. 03-3944-2120

■ 日本化学会第64秋季年会
プログラム抜粋

（詳細は“化学と工業”誌
8月号でご確認ください）

会期：平成4年10月2日（金）
〜5日（月）
会場：新潟大学五十嵐ｷｬﾝﾊﾟｽ
（新潟市五十嵐二の町8050）

一般研究発表
〔化学情報・計算機化学〕部門は、
右記ｼﾝﾎﾟｼﾞｳﾑに組込まれています。

E5 会場
工学部 107教室

シンポジウム

〔情報化学・計算化学のフロンティア〕

（情報化学のフロンティア）

10月2日　午前

座長　山田　明文（9：00〜9：40）

1E501　CADの画層機能による三次元状態図の作図（芝浦工大）○太田剛志・佐藤敏彦

1E502　新規手法における化学反応の研究と開発（8）自動化反応装置を利用した化学反応における相互干渉制御（相互薬工開発・東海大理）○及川健一・諏訪部伸夫・城所忠彦

座長　細矢　治夫（9：40〜10：40）

1E503　**招待講演**　CA1の新しい動き（福井高専）吉村忠与志

座長　吉村忠与志（10：40〜12：00）

1E504　**依頼講演**　ケモメトリックス・計測の自動化の進歩（長岡技科大）山田明文

1E505　**依頼講演**　コンピューターセキュリティをめぐる諸問題（新潟大法）名和小太郎

10月2日　午後

座長　山崎　昶（13：00〜14：00）

1E506　**依頼講演**　化学物質の情報検索における最近の話題（豊橋技科大）阿部英次

1E507　有機構造解析システムの理念と実践（山形大工）工藤喜弘

座長　阿部　英次（14：00〜15：00）

1E508　IUPAC SOLUBILITY DATA PROJECTの現状と溶解度データのデータベース化の試み（新潟大教育）宮本弘

1E509　**依頼講演**　データベース利用に関する最近の話題（紀伊国屋）岩沢まり子

座長　宮本　弘（15：00〜16：00）

1E510　**招待講演**　海外情報科学事情（図書館情報大）山本毅雄

座長　中山　伸一（16：00〜16：40）

1E511　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（15）ベンゼン置換基の判定（化技研・富士通）○田辺和俊・田村禎夫・上坂博亨

1E512　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（II）（大正総合研・北里大薬）○川島　豊・山田由紀・富沢一雪・荻野和正・漆崎文男・畑山勝男・島村治夫・森口郁生

座長　田辺　和俊（16：40〜17：20）

1E513　**依頼講演**　生体関連物質に関する情報化学の諸問題（図書館情報大）中山伸一

（分子設計に向けた計算化学の新展開）

10月3日　午前

座長　大澤　映二（9：00～9：40）

2E501　**依頼講演**　フラーレンの成長機構（都立大理）阿知波洋次

座長　山辺　時雄（9：40～11：00）

2E502　**依頼講演**　フラーレンアナログの電子状態（京大工）田中一義

2E503　C_{60}分子間相互作用のMM，MO計算（豊橋技科大）○大澤秀一・吉田満帆・本多一彦・大澤映二

2E504　ペリ縮合多環芳香族炭化水素の局所芳香族性サーキット磁化率による比較（2）（明治薬大・お茶女大理）溝口則幸○岩田　恵・細矢治夫

座長　平野　恒夫（11：00～12：00）

2E505　**依頼講演**　プラズマCVD法における分子設計（千葉大工）佐藤浩太

2E506　プラズマCVDにおけるイオン－分子反応（京大工・基礎化研・昭和電工樹脂研）○川内　進・立花明和・山口耕一郎・山邊時雄

10月3日　午後

座長　稲垣　都士（13：00～14：00）

2E507　**依頼講演**　振動混合による反応性理論（お茶女大理）平野恒夫

2E508　分子内の局所的なハード性と反応の予測（京大工）○佐藤眞市・藤本　博

座長　藤本　　博（14：00～15：00）

2E509　σ結合間の反結合的電子非局在化と角度ひずみ（岐阜大工）○石谷嘉史・稲垣都士

2E510　重なり配座の理論設計（岐阜大工）○桜井克彦・水上　修・稲垣都士

2E511　分子力場パラメータの最適化（45）飽和炭化水素ab initio力場（化技研）○田辺和俊・都築誠二・内丸忠文

座長　吉田　　弘（15：00～16：20）

2E512　有機分子の三次分子超分極率計算に及ぼす電子相関と波長分散の影響（大工試）○太田浩二・福見俊夫・阪口　享

2E513　ab initio法によるCO_2接触水素化反応機構（RITE・資源環境研）○角本輝充・渡辺大器・武内正己・河井基益・守屋圭子・金井勇樹・斉藤昌弘

2E514　**依頼講演**　昆虫フェロモンの分子設計（日本たばこ）島崎和子

座長　酒井　章吾（16：20～17：00）

2E515　アノメリック効果と酸性度（横浜市大文理）○榊原徹・伊藤新次・池川　浩・瀬田明則

2E516　非経験的分子軌道法と振動分光法による両親媒性物質集合体構造化学（広島大理）○吉田　弘・松浦博厚

10月4日　午前

座長　岡田　　勲（9：00～10：20）

3E501　**依頼講演**　分子動力学の基礎と最近の話題（富士通）三上益弘

3E502　結晶中のイオンの相互作用と3次元回転状態（名工大化）尾崎芳昭

3E503　SiO_2の仮想的な最高および最低密度多形の計算物理学（岡山大地球研セ・東大物性研）○松井義人・常行真司

（無機量子化学の新展開）

座長　中辻　　博（10：20～11：00）

3E504　**依頼講演**　金属および金属酸化物の電子構造と反応性－クラスターモデルから周期モデルへ（京都府大）小林久芳

座長　永瀬　　茂（11：00～12：00）

3E505　$DVX_α$法およびX線結晶構造解析法によるヒドロキシエチルイミノジ酢酸のスカンジウム錯体の結合電子密度（近畿大理工・京大工）○高橋紘一・西川泰治・足立裕彦

3E506　金属酸化物の電子状態と酸素イオン半径（兵庫教大・京大工）○田中ひかり・小和田善之・足立裕彦

3E507　半経験的分子軌道法および化学因子分析法による吸収スペクトルの解析（兵庫教育大）○木原　寛・尾関　徹

10月4日　午後

座長　岩田　末廣（13：00～14：20）

3E508　**依頼講演**　固体触媒のab initio（京大工）中辻　博

3E509　**依頼講演**　遷移金属錯体による分子の活性化と反応（熊本大工）榊　茂好

座長　榊　　茂好（14：20～15：40）

3E510　**依頼講演**　遷移金属錯体による触媒素反応のポテンシャル面（分子研）古賀伸明

3E511　**依頼講演**　カルコゲンやケイ素を含む環状化合物の構造と合成（筑波大化）安藤　亘

座長　古賀　伸明（15：40～17：00）

3E512　**依頼講演**　f電子をもつ遷移金属錯体の化学（阪大基礎工）巽　和行

3E513　典型金属触媒反応の反応経路に対する理論計算（阪産大工）酒井章吾

3E514　アルミニウムとナトリウムの混合クラスターの電子構造（慶大理工）○花輪智之・松澤秀則・鈴木一規・岩田末廣

情報化学部会　役員会　活動報告書

日本化学会情報化学部会

第１回　平成４年３月28日

出席者：16名

議　題：(1)　役員および役割分担の確認

(2)　関係規定等の確認

(3)　部会員数の確認

(4)　前回議事の確認

(5)　年間スケジュールの確認

(6)　予算の確認

情報化学部会　常任幹事会　活動報告書

日本化学会情報化学部会

第１回　平成４年６月６日

出席者：６名

議　題：(1)　活動状況の確認

(2)　活動方針の検討

(3)　各担当報告（総務・編集・企画）

(4)　検討事項

部会記念事業、特集企画、年会との連携、会員勧誘など

以上

関連行事

「１９９３年　情報学シンポジウム」　論文募集

－　オブジェクト指向と利用者インタフェース　－

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・利用に関するアイディアや経験を，研究者・開発者・利用者が共有し，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。

トピック：　ホットな話題となっているオブジェクト指向技術と利用者インタフェースについて，データ・知識の整備・利用・流通等の視点から，それらの評価，基本的問題，課題，今後の潮流，等を検証したい。例えば，次の分野（限定はしない）を討議対象とする。
１）オブジェクト指向によるアプリケーション設計，プログラミング言語，データベース，システム分析／設計，開発／実行環境，利用者インタフェース，分散，他。
２）利用者インタフェースへのニーズ，ヒューマン・ファクタ，モデル，実現技術（マルチメディア，オブジェクト指向，ウィンドウ・システム，ハード，等），設計技法（対話形式，直接操作，コマンド言語），評価技法，他。

共同主催（予定）：
日本学術会議　情報学研究連絡委員会
学術文献情報研究連絡委員会
学術データ情報研究連絡委員会
情報工学研究連絡委員会
情報処理学会，人工知能学会，日本医学会，日本化学会，日本数学会，
日本地理学会，日本物理学会，情報知能学会，日本生物物理学会

後援（予定）：
学術情報センター，計測自動制御学会，国際電信電話，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，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，ＩＣＯＴ

日時：　１９９３年1月１３日（水）～１４日（木）　９：３０～１７：００

場所：　日本学術会議講堂　１０６　港区六本木７－２２－３４（地下鉄千代田線，乃木坂駅）

講演申込方法：　ワープロ使用でＡ４用紙４～１０枚の論文と題目，氏名，連絡先，職名を記入した別紙を添えて下記に申し込む。

講演申込締切：　１９９２年9月１９日（土）

採否通知：　プログラム委員会で審査し，採否は１９９２年１０月１日までに通知する。

最終原稿締切：　１９９２年１１月３０日（月）

参加申込：　氏名連絡先，職名，資料必要の有無をはがきに記入し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）予定：　共済学協会員７，０００円，学生２，０００円，一般１０，０００円

宛先：　情報処理学会　シンポジウム係
１０６　東京都港区麻布台２－４－２　保科ビル３Ｆ
TEL．０３（３５０５）０５０５　ＦＡＸ　０３（３５８４）７９２５

バイルシュタインとデータベース

（社）化学情報協会　第7回化学情報講演会のお知らせ

恒例の化学情報講演会では、今回ドイツの誇る化学情報データベース Beilstein の開発を当初から推進してきた Clemens Jochum 博士、およびユーザ・サポートを担当されている Gabriele Ilchman 博士両氏をお招きして、Beilstein データベースの開発状況、今後の展望、オンライン・データベースの効果的な使用法などについてご講演頂きます。皆様のご参加をお待ちしております。

日　時：　1992 年 9 月 24 日 (木)
時　間：　13:30 ～ 16:30
会　場：　中央大学駿河台記念館 2 階 281 号室
　　　　　東京都千代田区神田駿河台 3-11-5 (TEL: 03-3292-3111)
参加費：　無料 (ただし先着 200 名様に限らせて頂きます)

＜プログラム＞　(通訳つき)

1. バイルシュタインのオンライン検索
   Dr. Gabriele Ilchmann (Beilstein Institute)

2. バイルシュタイン・データベースの最近の発展
   Dr. Clemens Jochum (Beilstein Institute)

＜お申込方法＞

ご氏名、連絡先住所、電話番号、FAX 番号明記のうえ、ハガキまたは FAX にてお申込ください。

＜お申込先＞

(社) 化学情報協会　化学情報講演会係 (担当　田中友子)
〒113 東京都文京区弥生 2-4-16 学会センタービル
TEL: 03-3816-3462, FAX: 03-3816-7826

＊懇親会 (有料) も予定しておりますのでお問い合わせください。

CHEMICS研究会「特別講演会」のお知らせ

CHEMICS研究会では、今回コンピューターケミストリー分野で世界的にも著名な先生方をお招きし、下記の要領にて講演会を開催いたします。
CHEMICS研究会会員以外の方のご参加も歓迎いたしますので、ふるって御参加下さい。

日　時：平成4年9月28日（月）
時　間：9:30～17:00
会　場：日本化学会館　化学会館 7Fホール
　　　　東京都千代田区神田駿河台1-5
参加費：￥3,000-（CHEMICS研究会会員は無料）

<プログラム>

1)挨　拶
　CHEMICS研究会会長　豊橋技術科学大学　佐々木慎一学長
2)「Computer-Aided structure elucidation」
　アリゾナ州立大学　M.E.Munk教授
3)「自動構造推定システムCHEMICSの現状と今後」
　豊橋技術科学大学　船津公人助教授
4)「Application of Neural Networks in chemistry」
　ミュヘン工科大学　J.Gasteiger教授
5)「コンピュータ分子設計の現状と展望」
　東京大学　薬学部　板井昭子助教授
6)「The Beilstein Information System:
　Everything for Somebody or Something for Everybody?」
　バイルシュタイン　C.Jochum博士

<お問い合わせ．お申込先>
CHEMICS研究会事務局　山口裕樹あて
東京都中央区日本橋小舟町5-1　長瀬産業（株）開発室内
TEL03-3665-3861　FAX03-3665-3890

定員　50名（定員になり次第締め切らせて頂きます）
＊懇親会も予定しております。

海外動向

MEETINGS

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).

28 March-2 April 1993.
205th ACS National Meeting.
Denver, CO.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

August, 1993.
Gordon Conference on QSAR.
Tilton, NH.
Contact: Alexander M.Cruikshank, Gordon Research Conferences, Gordon Research Center, University of Rhode Island, Kingston, RI 02881-0801(401-783-4011;FAX:401-783-7644)
22-27 August 1993.
206th ACS National Meeting.
Chicago, IL.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

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
BIOCES〔E〕	日本電気	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 ＳＸ-３シリーズ	月間レンタル50万円 月間レンタル75万円	90年９月 92年７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	90年７月 89年11月	約2,000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	75万～200万円	92年３月	500本
ISIS	富士通	ＭＤＬ社	統合化学情報管理システム。化合物情報(ＭＡＣＣＳⅡ)、反応情報(ＲＥＡＣＣＳ-ＤＢ)、化合物の物性・活性情報(ＲＤＢⅡ)を統合的に管理。パソコンのウィンドウベースで利用可能	ＶＰ、Ｍ、ＦＭ、マッキントッシュ	120万円～2,800万円	91年２月	
MACCSII	〃	〃	化合物情報管理システム。化合物に関する種々の情報を統合的に管理し高速に検索することができる		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ＤＢを高速に検索。各種の反応情報ＤＢを提供可能		1,600万円～	85年５月	
Lead Maker V2	〃	富士通、呉羽化学工業	分子設計支援システムANCHORの後継ソフト。化学者のイメージに合った操作性、計算結果の解析機能を充実。計算結果の一括表示、多重制御機能等実用性を徹底的に追求	Ｓファミリ(ＳＵＮ)			
ＳファミリADAPT	〃	富士通、ペンシルベニア州立大学、ＭＤＬ社	パターン認識によるＱＳＡＲおよびケモメトリクス支援システム。構造式から180種類の数値データを創出可能。発見型アプローチで手軽にＱＳＡＲを実行できる	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	600万円		
KAMELO	〃	富士通	化学ＯＡシステム。スプレッドシートにより、化学構造式を中心とした種々の情報を一括表示し、研究者間のコミュニケーションを支援するツール	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	300万円	91年４月	
EMIL	〃	〃	有機化学者の思考様式にそって、新規化合特の構造を提示する、新発想のＣＣＳシステム。化合物構造と薬理活性の相関などの膨大なデータを活用	Ｓファミリ(ＳＵＮ)		92年７月	
CRYSTRUCT V2	〃	〃	結晶構造設計支援システム。結晶構造のモデリング、解析等の機能をもつ。超電導物質や磁性体等の無機材料設計を支援	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	180万円	90年９月	
COMDEP	〃	〃	計算材料設計支援システム。分子動力学法等各種のシミュレータ及び結果の解析機能等から構成。半導体、セラミックス、液晶材料等の設計を支援	ＶＰ、Ｓファミリ(ＳＵＮ)	1,000万円 300万円	92年５月	
FROENS/MT	富士通、富士ファコム制御	富士ファコム制御	材料開発支援システム。実験依頼から測定作業に至るまでの膨大なデータの整理と解析機能を提供	Ｓファミリ(ＳＵＮ)		92年11月	
BIORESERCH シリーズ/DB V1	富士通	富士通	遺伝子/たん白質の配列ＤＢから目的とする配列情報をキィおよびホモロジーにより高速に検索	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	80万円	92年７月	
/SQ V1	〃	〃	遺伝子/たん白質の配列ＤＢの配列に関する付加情報を視覚化し、配列解析情報として表示	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	40万円	92年７月	
/AE V2	〃	富士通、京都大学	複数配列のアライメントを行う専用配列エディタ。カラー表示により、アライメント結果を視覚化	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	40万円	91年７月	
/3D V2	〃	〃	たん白質の立体構造の表示/解析システム。アミノ酸の一次配列と立体構造の連動等、実験研究者用に開発	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	180万円	91年７月	
/3M V1	〃	富士通、九州大学	たん白質のプレモデリングシステム。ポイントミューテーションの結果の表示および解析を行う	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	80万円	92年７月	
/SM V1	富士通、富士ファコム制御	富士ファコム制御	分子生物学実験支援システム〝MOLBESS〟のＳファミリ版。遺伝子組み換え実験等の実験をシミュレート	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	100万円～	92年９月	
SINCA V2	富士通	富士通、遺伝学研究所	分子進化学解析シミュレート。遺伝学的距離を計算し、進化系統樹を作成	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	40万円	91年１月	
SINCAIDEN	〃	〃	〝ＳＩＮＣＡ〟の海外版	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	$1980	91年７月	
SODHO	富士通、ハイパーメディア	〃	相同性分類アライメントＤＢ。Gen Bank™の全データをスーパーコンピューターで解析した結果を収録した高付加価値データベース	Ｓファミリ(ＳＵＮ) ＭＳ-ＤＯＳマシン	６万円 $600	91年10月 91年10月	
LATOX/F	富士通、富士ファコム制御	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」で実施。一般毒性・生殖試験をサポート	Ｓファミリ(ＳＵＮ)	1,200万円～	92年	
CHEMTERM/MM-MO	富士通	富士通	パソコン用の理論化学計算システム。コンピューター・ケミストリーの入門システムとして教育等で利用	ＭＳ—ＤＯＳマシン	30万円	89年11月	
G^3TERM	〃	富士通ビー・エス・シー	ソニーテクトロニクス社製のＴ4105と富士通のＦ9430型のグラフィックスエミュレータ。Ethernet型ＬＡＮにも対応	〃	25万円	89年10月	
理論化学計算入門 CALMM2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	理論化学計算プログラムMM2の教育用ＣＡＬ	〃	２万4,000円	90年11月	
MOPAC編	〃	〃	理論化学計算プログラムＭＯＰＡＣの教育用ＣＡＬ	〃	２万4,000円	90年11月	
MO解析	〃	〃	ＭＯＰＡＣの解析結果を視覚化	〃	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シリーズ	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	ＥＷＳ、ＷＳ	800万円	89年３月	61システム

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
HOELMATE/LEAT HODELMATE/ LEAF/WS	〃	日立製作所	独自のLEAF(LINKAGE of EMBEDDED ATOMIC FIELDS)ポテンシャルをベースにした分子軌道法。遷移金属を含む系など多様な解析対象に適用が可能	HITAC Sシリーズ、Mシリーズ、EWS、WS	180万円～(S、Mシリーズ) 8万円～(EWS、WS)	92年2月 92年3月	
HODELMATE/DVX2	〃	〃	実験値を使用せず電子数などの原子固有のデータから多原子系の電子構造を解析できるSシリーズ向けの分子軌道計算プログラム	HITAC Sシリーズ	180万円～	92年2月	
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 〃 MS	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 低分子、素材設計エントリーシステム	COMTEC4Dシリーズ、IRIS-4D/GTシリーズ、IBM POWERステーション COMTEC4Dシリーズ IRIS－4Dシリーズ IBM POWERステーション	700万円～ 700万円～ システム価格720万円～	87年7月 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 92, 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	180万～1,000万円	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	IRIS4D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	綿状ホモポリマーの基本的か特性の予測を通じ、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
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				
ISIS	〃	〃	分散処理型統合化学情報管理システム	サーバーマシン…VAXシリーズ クライアント…Macintosh、IBM・PC(PC-9801)		91年11月	
ISIS/Desktop	〃	〃	パソコン用化学(化合物、反応式)情報管理システム	Macintosh、IBM-PC(PC-9801)		91年11月	
ISIS/Draw	〃	〃	パソコン用化学反応、構造式作画ツール	〃		91年11月	
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	〃	米モレキュラーシミュレーションインク	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ーシリーズ、クレイ、IBMパワーステーション、コンベックス		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、IBMパワーステーション		87年3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	

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
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、ＨＰ9000、Deskstation	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	〃	〃	92年4月	
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、ＴＩＴＡＮ	〃	91年4月	
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、ＩＲＩＳ、ＨＰ	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	
DAYLIGHT	物産アドバンストシステム	米デイライトケミカルインフォメーション					
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、フラットフォーム機能	ＶＡＸ、ＶＭＳシリーズ	約180万円(ユーザー限定)	92年1月	
Daybases	〃	〃	ＴＨＯＭデータベースの管理機能		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、ホモナ大学レオ教授開発		約90万円		
POMONデータ	〃	〃	約2,700件の化合物の活性炭、構造のデータ		約81万円		
PCmodels	〃	〃	CLogP-疎水性(オクタノール/水の分配係数)LogPの計算。ＣＭＲ-分子の屈折率(分極率)の計算	ＵＭＸシリーズ、Sun sparc他	個別相談	92年1月	
Thor	〃	〃	データベースにアクセスし、構築したり、編集したり、データ入力が可能	〃	〃	〃	
Merlin	〃	〃	データベースの中の構造の一覧表を作成。与えられた構造、又はパターンの上位、下位構造の検索	〃	〃	〃	
Castor	〃	〃	構造検索のフォームを使用し、同位元素掌性、互変異性、構造検索を完全サポート	〃	〃	〃	
Discover	菱化システム、三菱商事	米ＢＩＯＳＹＭ	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。コンソシアムで吟味した精度の高いポテンシャルエネルギー関数を使用	ＩＲＩＳ、ＥＳＶ、ＶＡＸ、ＣＯＮＶＥＸ、ＡＬＬＩＡＮＴ、ＦＡＣＯＭ、ＩＢＭ、ＣＲＡＹ	920万円～	87年9月	
InsightⅡ	〃	〃	一般低分子からペプチド、たん白質、核酸等の生体高分子、合成高分子等の分子システム全般を対象とする分子設計用三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、ＲＳ6000、ＥＳＶ	690万円～	87年4月	
DMol	〃	〃	局所密度汎関数法によるAb initio分子軌道法プログラム。計算精度が高く、有機化合物・金属クラスター・無機物にも適用可能	ＩＲＩＳ、ＥＳＶ、ＩＢＭ、ＣＯＮＶＥＸ、ＦＡＣＯＭ、ＣＲＡＹ	960万円～	89年3月	
Del Phi	〃	〃	生体高分子等の静電ポテンシャル計算プログラムで、非線形型Poisson Boltzmann方程式の数値解を求める。分子及び溶媒のイオン強度、誘電率を考慮した計算が可能	ＩＲＩＳ、ＲＳ6000、ＥＳＶ	690万円～	89年4月	
Homology	〃	〃	Ｘ線結晶構造解析された相同たん白質の三次元構造に基づき、その構造ホモロジーを活用して一次シーケンスのみ既知のたん白質モデリングを行うプログラム	ＩＲＩＳ、ＥＳＶ、ＩＢＭ	580万円～	90年4月	
Open Interface	〃	〃	三次元グラフィックスプログラム InsightⅡに、ユーザー独自の外部ソフトを組み込むインターフェース	ＩＲＩＳ	390万円	91年7月	
POLYMER	〃	〃	合成高分子の物性推算及び分子設計のためのプログラム群	ＩＲＩＳ、ＲＳ6000			
QSPR			構造式とデータベースから、構造と物性の相関関係を求めるプログラム				
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				
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				
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				
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				
Interphases			DillのLattice法を用いてInterphaseの物性を求めるプログラム				
Apex	〃	〃	ＱＳＡＲによる化合物の薬理活性予測プログラム	ＩＲＩＳ	未定	92年7月	
Ludi	〃	〃	酵素活性部位の三次元分子構造に基づいてリガンド設計を行うプログラム	ＩＲＩＳ	未定	92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したコンソシアム。会員にはソフト入手権のほか利点が与えられる。現在会員募集中			91年4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評価、改善を目的としたコンソシアム。現在新会員募集中			90年10月	
ポリマーコンソシアム	〃	〃	ポリマー用の実用的な分子設計ソフトの開発を目的としたコンソシアム			89年7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
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・システムー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、IRIS、NEC、EWS-4800、HP、SUN、Macintosh	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。オプションプログラムとしてNMRシフト予測、MASSスペクトル予測可能	VAX、HP、IRIS、SUN、NEC、EWS-4800、TITAN、PC-98シリーズ	EWS版350万円 PC版115万円	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	WAVEFUCTION INC	3次元グラフィックインターフェースを備えた非経験的および半経験的分子軌道法プログラム	IRIS－4Dシリーズ	360万円	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の分子軌道・振動表示、MDアニメーション機能も備える（MM機能開発中）	IRIS－4Dシリーズ	80万円	91年4月	
GEMS/MD	〃	〃	機能性分子材料を主対象とした汎用分子動力学コードで液晶、ポリマー、界面の各々に特有の機能をオプションで提供	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	360万円～	90年6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	9万8,000円	89年1月	20本
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	92年7月（予定）	
TOPIQUS	〃	〃	各種たん白質関連データベースを効率的に運用し、たん白工学研究者を支援する高速検索システム。マッキントッシュをクライアントとして採用し、操作が容易	サーバ：SUN、HP クライアント Macintoshシリーズ	45万円	92年7月（予定）	
Chem3D	ヒューリンクス	米ケンブリッジサイエンティフィック	分子の立体構造描画ソフト。2,000個以上の原子からなるモデルの作成表示が可能。ボール&スティック、シリンダー、スペースフィル図など表現力も豊か	マッキントッシュ	12万5,000円		
Chem3D Plus	〃	〃	カラー表示機能、MM2によるエネルギー最小化機能、モレキュラーダイナミクス機能を付加	〃	17万円		
Chem Draw	〃	〃	化学用のグラフィックツール。マウスだけで構造式などが簡単に描ける。日本語入力も可能で、レポート作成はこれ1本でオーケー	〃	12万5,000円		
SYBYL Basicモジュール	住商エレクトロニクス	米トライポス	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、INDIGO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			合成高分子構造活性相関操作			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	
ALCHEMYIII	〃	〃	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、INDIGO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、INDIGOシリーズ、ESVシリーズ、RS6000シリーズ	150万円	91年9月	
BOSS	〃	〃	有機分子モデリング、溶媒中の複合、活性計算	IRIS4D、INDIGO、VAX、SUN	約300万円	92年2月	
MM2(91)/MM3	〃	〃	分子力場法による分子構造の決定	IRIS4D、INDIGO、VAX、IBM社（MM2(87)）	370万円	92年2月	
NMR TRIAD	〃	〃	多次元NMRデータ分析結果の画像出力、及び3次元構造の決定	IRIS4D、INDIGO、VAX、ESV	約1,000万円	92年9月	
3DB UNITY	〃	〃	ケミカル・ベータベースの3次元検索システム	〃	約1,200万円	92年6月	

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
ＭＯＬＤＡ＆ＧＲＩＭ-MVer5.15/5.1J	サイエンスハウス	広島大学　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	５万2,000円(5.1)、５万8,000千円(5.1Ｊ)	89年２月	250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	〃	７万8,000円	89年８月	30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	〃	５万8,000円	87年８月	120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	〃	７万8,000円	87年11月	30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	〃	２万8,000円(民間)、９,800円(公共)	86年６月	125本
MOLDA-S	〃	広島大学　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	〃	１万8,000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	５万8,000円	90年10月	15本
MMHS-ex	〃	群馬大学　中田吉郎、藤沼一信	分子の設計からコンホメーションの解析そして、シェーディングつきの立体模型表示まで、分子設計のための各種計算を一つのパッケージで提供	ＰＣ―9800シリーズ	５万8,000円	92年５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 ＰＣ-98ＸＬ^2 ＰＣ-98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―Ｈ98シリーズ	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(Ｖ6.0)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―Ｈ98シリーズ	19万円	89年11月	
パソコンMOPAC/386（拡張モジュールＶ）	〃	〃	基本プログラムとの組み合わせでＭＯＰＡＣ(Ｖ6.0)のＥＳＰを除く全機能に対応、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	ＩＲＩＳシリーズ	150万円	90年10月	
Constrictor	〃	〃	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オメトリ法のプログラム	ＩＲＩＳシリーズ ＶＡＸシリーズ SUN Spark-Stationシリーズ	150万円	90年10月	
Asp	〃	〃	"bioisosterism"の概念を論理的に定量化した"Similarity index"を計算することにより、複数分子の類似性を求めるソフトウエア	〃	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	〃	〃	知識データベースとＡＩ手法の組み合わせで安定配座群を探索し複数の初期構造を生成するソフトウエア	ＩＲＩＳシリーズ ＶＡＸシリーズ SUN Sparkシリーズ	200万円	92年６月	
PC-Cobra	〃	〃		ＰＣ―9801シリーズ(32ﾋﾞｯﾄ)	25万円	92年６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 Quadraシリーズ	25万円	90年10月	
Pimms	〃	〃	３次元分子モデリングシステム。力場計算、動力学計算、部分電荷計算の解析プログラム内蔵。また、Asp、Cobra、Constrictorとのインターフェース完備	ＩＲＩＳシリーズ	290万円	91年６月	
Python	〃	〃	データ処理(表作成)、統計処理、表示機能が全て一つのシステムでできる構造活性相関プログラムです。HanschとLeoの置換基データベース内蔵	〃	250万円	92年７月	
GDPS98Mini GDPS98 GDPS98pro	日興通信 〃 〃	東京大学　磯見二郎 〃 〃	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 〃 〃	５万8,000円 17万円 35万円	89年４月 86年５月 87年11月	
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塡モデル、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
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	
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)32万5,500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)23万5,500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(キャッシュ)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CAChe Scientific.Inc.	3次元(立体)分子設計モデリング・システム。Macintoshの直観的操作でMOPAC、ZINDO、拡張MM2等の計算および結果の視覚化ができる	MacintoshⅡfシリーズ(ci/cx/fx)、Quadr900/700、PR88プロセサボード	183万8,000円〜	91年4月	
MM2KIT	帝人システムテクノロジー	帝人システムテクノロジー	PC版MM2インターフェース。分子の三次元構造を作成してMM2の入力ファイルに自動変換。パラメータ欠落チェックあり。単独でスペースフィル描画までサポート	PC-9801シリーズ	12万円	86年8月	490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	140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填、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	50本
POLYGRAF	〃	米国モレキュラーシミュレーション	ポリマー設計支援システム。独自の力場パラメータを用いたメカニクス、ダイナミクス計算により高分子の構造や物性のシミュレーションができる	IRIS、IBM、RS/6000	1,050万円〜	92年4月	
CERIUS	〃	〃	無機/有機の結晶化合物、設計支援システム。X線回折シュミレーション、電子顕微鏡画像シミュレーション、吸着シミュレーション等が可能	IRIS、IBM、RS/6000	モジュール販売500万円〜	92年4月	
PC/GENE	〃	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-9081シリーズ、IBM PC/XT、ATPS/2、互換機	84万円	90年10月	海外含め1,500本
GeneWorks	〃	〃	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	海外含め350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	1,400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)		
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)		
GENETYX-IN	〃	〃	核酸配列入力、DNAフラグメントサイジング装置。核酸配列フィルム映像パターンを自動的に核酸塩基情報として入力		48万円(ハード含む)		
GENETYX-PLOT	〃	〃	遺伝情報図形処理。DNA、アミノ酸配列解析で必要なKbP単位の結果を一紙面に出力		30万円(ハード含む)		

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
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)		
GENETYX-Σ/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	〃	〃	マッキントッシュ用遺伝子解析ソフトウエア、核酸マルチアアライメント、たん白機能ドメイン検索など	マッキントッシュ	38万円	91年12月	120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	90本
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900本 海外1,800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	国内80本 海外100本
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	10台
Mac Molly®Tetra	アロカ	独ベルリン自由大学	DNA・プロティン解析ソフト。シーケンス入力・編集から比較・結合、PCRプライマー部位探索、プラスミド作図、データベース検索などの機能を持つ	マッキントッシュ	80万円		
Chem Window	東京化成工業	米ソフトシェル社	化学構造式作図用ソフト。リングやボンドなど基本的なツールが用意されており、マウスを使った簡単な操作で短時間に美しい作図ができる	NECPC-9801シリーズ	3万7,000円	90年9月	
Chem Inotsh	〃	〃	Chem Windowの機能の他に自分自身のツールが登録できるなど、多種類の機能が追加されている	Macintoshシリーズ	8万5,000円	92年5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	

文献紹介

［書評］

Shinsaku Fujita, "Symmetry and Combinatorial Enumeration in Chemistry"
Springer Verlag, 1991

藤田眞作博士（富士写真フイルム足柄研究所）の労作である．なにぶんにも化学と数学という１８０度近く離れた２つの分野を群論で結ぶ書である．

化学への群論の適用を一歩すすめたこの本の内容については，門外漢の評者がなにかを言うより，最近出たＪＡＣＳの書評[*1]から専門家の表現を紹介するのがよさそうだ．"この本では分子の対称性の体系的分類と構造異性体の数え上げに coset表現とmark tableの概念をエレガントに適用する．現在の世代が群論の応用において character tableを理解し利用しているように，次世代の化学者がmark tableを活用するようになるとすれば，その功績は Dr.Fujitaとこの本に帰せられる"．

もうＪＡＣＳに取り上げられたからといって喜ぶ時代でもないだろうが，世界の専門家からこういう評価を得ていることはもっと知られてよいだろう．

内容はさておき，数学といえば受験代数で進歩が終わった評者には，ΣやΠで書かれる一般式が展開され，新しい定義を導入して再び簡単な式にまとめられるプロセスはマジック以外のなにものでもない．１年ぐらい前のこと，われわれの研究所を訪れたフランスの化学者に例のＩＴＳ（Imaginary Transition Structure）にもとづく有機反応検索システムＦＯＲＴＵＮＩＴＳをデモした際に，" Dr.Fujita は数学と有機合成というおよそ科学のなかでもっとも離れたものをむすぶ力がある希有の人だ" と言ったら，" 確かに自分もそういう人を知っている" と言って目を丸くしていた．

日本の研究者がドイツの出版社から英語で出したこの本（全文 368ページ）は，目次から索引にいたるまですべて著者個人が LaTeXで自作したものであり，その一部には自作のマクロも組み込まれている． LaTeXの実力がわかるとともに藤田博士の実際的なシステム化力をも如実に示すものになっている．新しい出版形態のよい例でもある．

常日頃著者と机を並べて仕事をしている評者としては，一人でも多くの人がこの書の内容を活用し化学における論理的解析の応用がさらに発展して，化学の世界がより広いものになることを願ってやまない．

[*1] C.Alden Mead, J.Am.Chem.Soc., vol.114, 4018 (1992)

富士写真フイルム（株） 足柄研究所 花井荘輔

〔コンテンツリスト〕

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

☐ May 1992, VOL.9, NO.4

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

☐ May 1992, Vol.69, No.5

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

□ VOL.32, May/June 1992

☐ VOL.16, NO.2, 1992

OPEN PROBLEMS OF COMPUTATIONAL MOLECULAR BIOLOGY

ISSN 0913-3747

CICSJ Bulletin

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

超並列処理と化学への応用　特集号

日本化学会
情報化学部会

Volume 10, Number 5
July 1992

目　　次

特集：超並列処理と化学への応用

ユーザからみた超並列計算機

東京大学理学部情報科学科
小柳義夫

Abstract

スーパーコンピュータとは、科学技術分野における数値計算を主要目的とする高性能計算機のことである。数値計算、とくに数値シミュレーションはそもそもコンピュータの誕生を促した原動力であり、今日までコンピュータの能力の向上を絶えず要求し続けてきた。ベクトル処理に基づく従来のスーパーコンピュータは 1970 年代に登場し、急激に発展した。今日、世界中で急速に普及し利用されているが、その能力が半導体技術の限界に近づきつつあり（幸い限界は何回も破られているが）、これまでのようなペースで性能が向上することは期待できない。この限界を破るには、並列計算機しか考えられない。

1　対象モデル

シミュレーションとは、系を構成する個々の要素に関するミクロな運動方程式を数値的に追跡することにより、マクロな振舞いを導出する手法である。要素の数はきわめて多く、各要素に関して複雑な計算を行うので、天文学的な演算量が必要になる。科学技術の急激な進歩にともない、数値シミュレーションの必要性、有用性が急速に増大した。科学研究においては、複雑な現実の現象を基礎方程式から数値的に導出し、その振舞いを実験データのように分析する「計算理学」的な方法が市民権を得つつある。技術の分野でも、直接には実験できない分野、実験に莫大な経費のかかる分野が急速に拡大した。航空機やロケットの設計のための超音速風洞を建設するには数百億円かかるし、実験にも多くの人手と時間が必要である。

数値シミュレーションは個々の要素を記述する多数の量の間の数値的関係で表現される。このような量は、プログラム上では配列要素で表され、計算の進行につれて値が変わって行く。このとき、ある要素の値の計算に他のどんな要素の参照が必要かがそれぞれの問題を特徴づける。例えば、2 次元の拡散問題

$$\frac{\partial\phi(x,y,t)}{\partial t} = k\frac{\partial^2\phi(x,y,t)}{\partial x^2} + k\frac{\partial^2\phi(x,y,t)}{\partial y^2} + f(x,y,t)$$

を 5 点差分によって離散化し、オイラー法のような「陽解法」で解く場合には、時間ステップをひとつ進めるために、4 個の隣接点の値が分かればよい。このように、それぞれの問題、対象には、特徴的な参照パターンがある。ここに並列処理の可能性がある。

参照パターンは次のように分類することができる。

1. 動的に変化する場合
2. 変化せず静的な場合
   - 参照が規則的な場合

- 参照が不規則的な場合

上記の場合には、参照パターンは固定的で、時間的に変化せず、しかも4個の隣接点という規則的なケースである。もちろん、境界だけは特殊であるが。同じ拡散方程式でも、不規則(非構造) メッシュの有限要素法で離散化した場合には、参照は静的ではあるが、不規則になる。また、解に応じて物理量の変化の激しいところのメッシュを細かくするような場合(解適合格子) には、参照パターンは動的に変化する。

従来ベクトル計算機が得意としてきたのは、静的で参照が規則的な場合である。このような問題は、明白な並列性を持ち、CM-2, MasPar などのいわゆる SIMD 型計算機にも容易に載せることが出来る。静的でも参照が不規則な場合は、並列性は自明ではない。適応するアルゴリズムにもよるが、ベクトル計算機ではリストベクトルの機能を使ってベクトル化することが多い。並列計算機で扱う場合には、SIMD 型計算機ではかなり困難であろう。MIMD 型計算機のほうが柔軟性は高い。しかし、各要素計算機の負荷のバランスが保たれないと、遊休状態になる要素が生じて効率が悪くなる。それでも、静的であれば事前に負荷が予測できると考えてもよい。しかし、参照が動的に変化する場合は、負荷のバランスも動的に取る必要があり、効率の高い並列処理を行うことはさらに困難である。

2 言語モデル

実際に問題を解くには、対象をモデル化し、適応するアルゴリズムに従ってプログラムを書かなければならない。プログラミング言語は、ユーザと計算機とのインターフェースであり、計算機のあるレベルの断面を表している。Fortran や c などのこれまでのプログラミング言語は、いわゆるフォン・ノイマン型の逐次型計算機モデルを仮定していた。これにより、パソコンからベクトル計算機まで一様に取り扱うことが出来た。

しかし、並列計算機では事情が異なる。それは、従来の言語は、逐次実行を仮定していたので、本来、実行の順序をつける必要のない(並列化可能な) 処理にも順序を与えているからである。並列処理を記述する言語についてはさまざまな議論が行われている。しかし、普通のユーザにとっては、そんなことはどうでもいいことであろう。とにかく処理を高速にやってくれればよい。そこで、従来の逐次型のプログラムを、並列計算機向きに自動的に変換する研究が盛んに行われている。これは従来からのプログラム資産を生かすためにも有効であろう。

しかし、それだけでは十分ではない。なぜなら、問題の持つ並列性は、プログラムの字面だけからは明らかにならず、データに依存することが多いからである。そこで、ユーザと対話しながら並列化するシステムとか、一度実行させて履歴を取り、それを分析して並列性を抽出するとかいろいろな提案がある。しかし、筆者が一番本質的だと思うことは、並列計算機を使いこなすには、用いるアルゴリズムから考え直す必要があるからである。場合によっては、対象のモデル化の手法から再構成することも有効である。筆者は、「自動並列化」の研究を尊重しつつも、これに過度な期待をもつなと警告したい。

数値計算の観点からは、並列プログラミング言語を、大域言語とノード(局所) 言語の二種に大別することができる。前者は、対象全体を陽に記述し、それに対する処理を書く形式の言語である。後者は、一つの要素計算機(ノード) が対象とする部分系とそれに対する処理を記述するもので、対象全体は陽には見えない。

2.1 大域言語

従来のプログラムは、もちろんこの形式である。従って、ユーザにとって、書きやすいといえる。同時に、既存のプログラムから移行しやすいという長所もある。しかし、従来型のプ

ログラムから、並列性を自動的に抽出して、並列処理のオブジェクトを出力するようなコンパイラは作りにくい。

Cray YMP や SX-3 のような多重ベクトルプロセッサは、従来からのプログラム資産が走るようにこの形の言語を使用している。実際には Fortran 77 に何等かの指示文を付け加える場合が多い。この場合は並列度が高々16程度であり、主記憶を共有しているので比較的容易である。典型的には、多重 DO ループの、最内側ループをベクトル化し、外のループを並列化する。

超並列計算機ではどうであろうか。とくに分散メモリの計算機では一般的には難しいが、問題やアルゴリズムに制限をつければ可能な場合もある。たとえば、CM-2 のような SIMD 計算機では大域言語をサポートしている。最大の問題はデータと演算の各要素計算機への割付であり、規則的な問題ではともかく、不規則な問題や、構造が動的に変化するような問題では、自動的に割り付けることはできない。

2.2 ノード言語

分散メモリの計算機の各ノードは、ノード間の通信を除けば、単なる一つの計算機であり、Fortran でも c でも既存のコンパイラを利用できる。これに、通信や同期のライブラリを付加すればよい。PAX も AP-1000 もこの型の言語を用いている。しかし、既存のプログラムからの移行はたやすくはない。また、すこし慣れないとプログラムを書きにくい。とはいえ、問題が静的で規則的な場合は、それほど困難ではない。多くの場合、すべてのノードに同一のプログラムをロードする。もちろん、実際に走るコードはノード毎に違っていてよい。このようなプログラミングスタイル（＋それを許すアーキテクチャ）を SPMD(Single Prgram Multiple Data) と呼ぶこともある。

2.3 並列アルゴリズムの研究

何度も強調しているように、並列計算機を使いこなすには、並列計算機向きのモデル化やアルゴリズムを考えなければならない。従来のプログラムをいくら解析して並列性を見いだしても、所詮限界がある。目下必要なのは、並列アルゴリズムの研究である。そのための道具としては、並列計算機の構造がそのまま見えている、ノード言語の方が有用であろう。その様な研究が進めば、大域言語をどのように並列化したらよいかの方向も見えて来るであろう。

いわば、ノード言語はアセンブラ言語、大域言語は高級言語である。計算機のアーキテクチャを使いこなすにはやはりアセンブラ・レベルで分析改良する必要がある。もちろん、ユーザ皆にアセンブラを使えなどというわけにはいかないが、アセンブラや機械語レベルでの研究があって、高級言語のよいコンパイラができるのではないだろうか。

3 計算機モデル

並列処理技術を現実のものにした最大の要因は、いうまでもなく半導体技術の進歩である。集積回路が初めて登場したのは 1959 年であったが、その後、LSI 、VLSI と飛躍的に発展してきた。集積度の急速な進歩により、大容量のメモリと高性能のマイクロプロセッサが製造されている。とくに、最近の RISC アーキテクチャに基づくマイクロプロセッサの進歩は驚異的である。

高集積化は、処理速度の向上をもたらしただけではなく、一つのチップに多数の素子を収容することを可能にした。さらに、半導体チップは量産効果が極めて大きい、すなわち設計やマスクパターンの生成には多額の費用がかかるが、同じものを多数製造するのは比較的

たやすい。したがって、多数個の同一のコンピュータを並べた並列コンピュータは、まさにVLSI技術向きなのである。

しかし、重要なことはユーザにとって並列計算機どう見えるかということである。ただしこの場合はプログラミング言語レベルではなく、機械命令のレベルで考えることにする。まず重要なことは、記憶装置の構造である。大きく共有メモリと局所メモリの二種に分けることが出来る。共有メモリとは、システム中に論理的に1個だけ存在し、どの要素計算機からも同等にアクセス出来るものをいう。局所メモリとは、メモリが多数に分かれていて、それぞれどれかの要素計算機から特別にアクセスしやすいようになっているものをいう。もちろん両方をそなえている並列計算機も考えられる。

共有メモリだけの計算機は、データの割付を考える必要がなく、使用する観点からは使いやすい。しかし、並列度が高い場合には、メモリへのアクセスの衝突の回避、メモリの保護(あるノードがある時間あるメモリを占有するため)、キャッシュの同一性の確保などの要求を満たすことが困難になる。実際には、ノードとメモリの間に巧妙なスイッチ網を置くが、その遅延も問題になる。

局所メモリは、どれかのノード（複数のこともある）に所属し、あたかもそのノードの主記憶のように機能する。たのノードに属するメモリ上のデータを使うためには、ノード間のネットワークを通じてデータを転送しなければならない。規則的な問題のように、あらかじめどこでどのデータが必要かが分かっている場合には、メッセージとして、必要なノードにデータを送りつけてやるのが普通である。しかし、あらかじめ分かっていない場合には、まずこれこれのデータがほしいというメッセージを送り、受け取ったノードがそのデータを返送するという二重の手間を掛けなければならない。

もう一つ重要なのは、機械命令の起動形態である。科学技術計算で実用になっているのは、SIMD と MIMD マルチプロセッサである。SIMD は、プログラムカウンタが全体に1個しかなく、すべてのノードの演算器は、そのカウンタの指し示す命令を実行する。マスキング機構がある場合は、実行を抑止することはできるが、別の処理を行うことはできない。MIMD は、データ駆動から要求駆動まで広い範囲の並列計算機を指すが、マルチプロセッサで MIMD という場合は、各ノードが独立にプログラムカウンタを持ち、独立のプログラムを実行するような並列計算機をいう。さきに述べたように、実際にはSPMD方式で実行することが多い。要するに、MIMD マルチプロセッサの各ノードは通常の CPU であり、とくに局所メモリの場合は、独立な計算機がネットワークで結合されていると見ることが出来る。

4 終わりに

本来なら化学の大規模計算が並列にどう実行されるかを論じるべきであろうが筆者にはその力がない。分子動力学の並列化ぐらいなら想像もできるし、実際成果も出ているようであるが、電子軌道計算はどうなるであろうか。同じ量子力学でも、格子ゲージ理論は経路積分によって4次元空間の幾何学的並列性を利用できたが、量子化学では関数空間を扱わなければならない。別の観点で見れば、量子化学は、量子色力学と異なり、かなりよい基底が分かっていて、精度も高い。ここに違いがあるようである。

いずれにせよ、90年代は超並列の時代となろう。並列処理には、アーキテクチャ、アルゴリズム、アプリケーションの3つのAが重要である。計算理学の各分野の研究者から、計算機の単なるユーザの域を越える人が出て来ることを期待している。

化学における超並列処理の可能性

九工大情報工　　柏木　浩

1．テラフロップスの始まり

最近のニュースを見ていると、富士通が1GFLOPS以上のプロセッサを数百台結合した300GFLOPSのスーパーコンピュータを年内に発売とか、CRAY社がDEC社のAlphaチップ2048個使い300GFLOPSのマシンを来年度出荷とか、CUBE社が65536個のプロセッサの6.5TFLOPSの計算機を再来年出荷予定とか、超並列によるテラフロップスの時代が始まったようである。

化学計算の並列性はベクトル計算機を利用するために詳細に研究されていて、ベクトル計算機への適合性の善し悪しはよく知られている。一般的にいって、パラレル計算機の方が自由度が高いので、適合性はベクトル計算機よりよくなるだろうと推定できる。ただし、パラレル計算機の場合には、個々のプロセッサのCPU速度とプロセッサ間の通信速度の兼合によって効率が決まるので、計算機のアーキテクチャによって異なるアルゴリズムを検討しなければならないだろう。しかし、基本的に適合性が良いか悪いかについては、1980年代に試作されたパラレル計算機で、数種の化学計算がテストされ、おおむね良好な結果が得られている。

2．分子軌道計算における並列処理

Clementiをリーダーとする IBMの研究グループはLCAP(Loosely Coupled Array of Processors)システムを開発し、このやや原始的なパラレル計算機を用いて、ab initio MO法と呼ばれる分子軌道計算のいろいろなステップのテストを行った[1][2]。以下に示すように、ほとんどのステップの並列計算機への適合性はよい。

Clementiらの製作した初めのシステムはLCAP-1と呼ばれ、汎用機IBM4381をホストとし、アタッチドプロセッサFPS164を10台、図1のように接続したものである。彼らの用いたFPS164はベクトル機能をもち1台で最高55MFLOPS、10台で550MFLOPSの上限性能になる。LCAP-

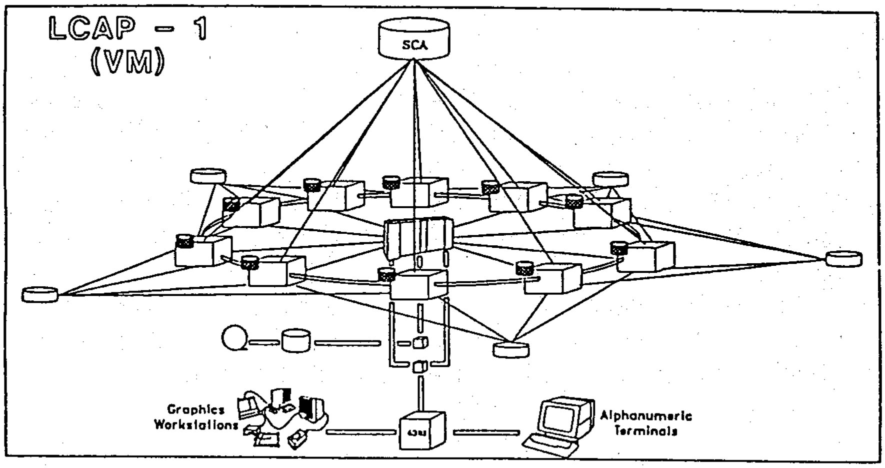


図１　LCAP-1の構成。図の中央に円形に並んでいるのがFPS164。

表1　LCAP-1の実行性能。3APsなどはプロセッサの台数を示す。

JOB	Elapsed time for lCAP-1 (minutes) 1 AP	3 APs	6 APs	10 APs	Cray-XMP
Integrals (42 atoms)	203.7	68.9	38.3	21.2	23.2
SCF (42 atoms)	73.0	26.0	14.3	10.6	8.7
Monte Carlo	162.1	57.8	32.0	22.0	20.4
Molecular Dynamics	99.6	34.6	19.3	13.7	17.0

2はより高速なFPS264が用いられているが、構成は同じようなものである。

Hartree-Fock計算では、電子間のCoulomb相互作用を見積るための二電子積分の計算(integral)と固有値方程式の計算(SCF)が主なものである。個々の積分の計算は独立にできるから、複数のプロセッサに配分することは容易である。実際、表1のように計算時間はプロセッサの数の逆数にほぼ比例している。分子構造を最適化したり、反応経路を探索するのにはグラジエント法が有力である。これは二電子積分の計算をさらに多量に行うものなので、並列処理にはよく適合する。SCFのステップの方の効率は幾らか悪くなる。このステップは基本的には行列演算で、プロセッサ間のデータ転送が必要になり、プロセッサが多くなると効率が落ちてくる。それでも表1はこのステップでも並列処理が有効であることを示している。

分子軌道法にはHartree-Fockを越える方法として配置間相互作用、CI法というのがある。CI法には積分の変換、ハミルトニアン行列要素の計算、行列の固有値問題の3ステップがある。このうち積分の変換を除けば、LCAPは有効であることが示されている。積分の変換はプロセッサ間の高速なデータ転送が必要なのでLCAPでは効果が見られないが、次節で示すように、本格的な並列計算機なら効率よく処理できる。

このように並列計算機としては原始的なLCAP型の計算機ですら、分子軌道計算のほとんどのステップで有効なのである。

3．積分変換における並列処理

積分変換というのはCI法とかMCSCF法で必要なステップで、原子軌道ベースの二電子積分(pq|rs)を分子軌道ベースの(ij|kl)に線形変換するものである。この変換は次の4個のステップに分解される。

$$(iq|rs) = \Sigma(p=1,N)\ Cpi(pq|rs) \qquad (1)$$
$$(ij|rs) = \Sigma(q=1,N)\ Cqj(iq|rs) \qquad (2)$$
$$(ij|ks) = \Sigma(r=1,N)\ Crk(ij|rs) \qquad (3)$$
$$(ij|kj) = \Sigma(s=1,N)\ Csl(ij|ks) \qquad (4)$$

これらの式で、p、q、r、sは原子軌道の番号、i、j、k、lは分子軌道の番号、Nは軌道の数、

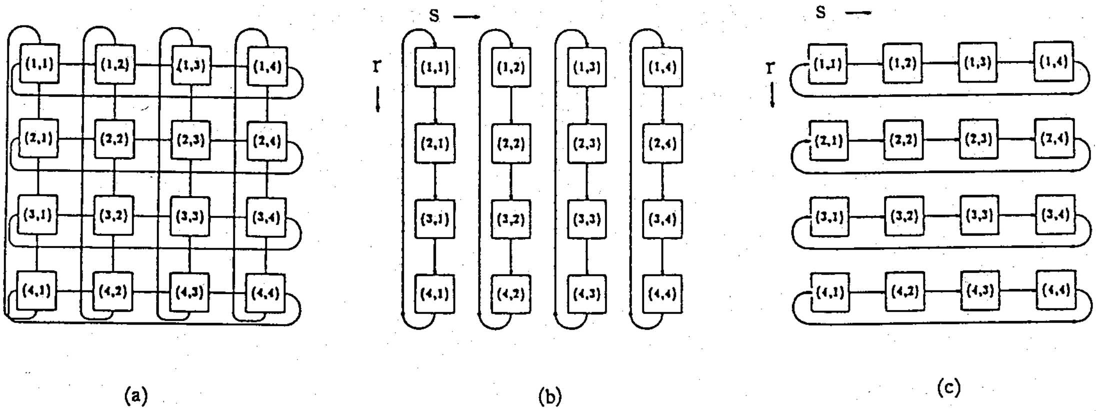


図2　Intel社のハイパーキューブ計算機の構成とデータの流れ。

Cpiなどは分子軌道の係数である。

パラレルプロセッサ上での積分変換のアルゴリズムについては、LivermoreのSandia国立研究所のIntel社のハイパーキューブ計算機上で研究が行われた[3]。彼らのアルゴリズムを説明するために16個のアレイプロセッサが図2(a)のようにマトリックス状に連結しているものと想定する。さらに説明を簡単にするために軌道の数Nは4であると仮定する。各プロセッサのメモリにはそれぞれに定められたrsをもつ全てのpqの積分(pq|rs)が用意されているものとする。例えば、(2,3)プロセッサには(pq|23)型の全ての積分が蓄えられている。さらに全てのプロセッサには変換行列Cも記憶されているものとする。(1)-(4)式の4ステップのうち(1)と(2)はそれぞれのプロセッサ内で容易に実行でき、(2,3)プロセッサ上には(ij|23)の全てが作成される。(3)は単独のプロセッサでは実行できないので、図2(b)のように列方向に積分を送りながら計算する。最後の(4)のステップは図2(c)のように行方向の移送により(ij|kl)を計算する。

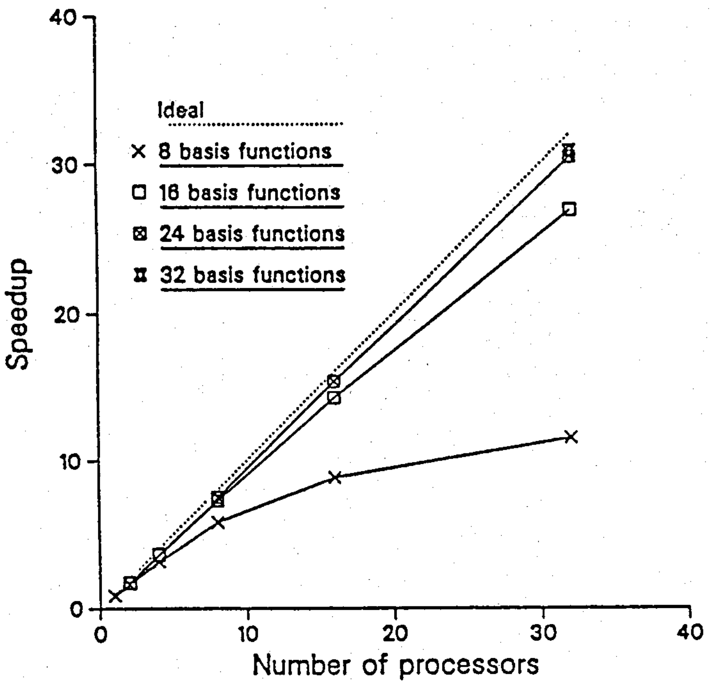


図3　積分変換の効率

実際には彼らは32個のアレイプロセッサからなる計算機を用い、軌道の数は8-32につい

てテストした。一つのプロセッサに複数の軌道の対rsを割り当てる。その結果は図3に示すように、軌道の数が充分大きければプロセッサの使用効率は100%に近くなる。

各プロセッサはIntel80286と80287および512KBのRAMからできていて、総計算能力は0.5 MFLOPSである。隣接プロセッサ間の通信能力は200kbits/secである。このパラレルプロセッサではCPU速度と通信速度のバランスがとれていて使用効率は高くなっている。したがって、このようなバランスのとれた高速で大型のパラレル計算機であればプロセッサの台数倍の高速計算ができる。ただし、全積分がアレイプロセッサ群のメモリに入らなければならない。

4．モンテカルロ計算と分子動力学計算における並列処理

2．で紹介したグループが液体の水のモンテカルロ計算と分子動力学計算の並列性についてもテストを行っている。その結果が表1に示されている。計算時間はプロセッサの数の逆数にほぼ比例していて、パラレルプロセッサへの適合性がきわめて良いことを示している。情報化学部会が1990年に行った未来予測ではタンパク質の1秒間の動力学計算ができるようになるのは2010年とのかなり早めの予測であったが、これはひょっとすると実現されるかも知れないという状況である。

5．並列処理を利用した新しい方法の可能性

これまで述べてきたのは、化学計算のいわば古典的方法についてである。計算機がこれまでと違って超並列になり、テラフロップスの速度をもつようになれば、化学計算の新しい展開の可能性も開けて来ることだろう。この方向にも研究を進めなければならない。

通産省の新しいプロジェクトで４次元計算機の開発というのが開始された。これは超並列マシンの上に人間のように柔らかい情報処理を実現しようというものである。画像処理を得意とする超並列光コンピュータでも開発されれば、パターン処理は今よりはるかに容易になって、人間の視覚やイメージで判断する能力をコンピュータが凌駕するようになり、化学や生物の研究に新しい展開をもたらすだろう。このように人間の知的能力の本格的なコンピュータ化の時代が始まっている。

文献

[1] E.Clementi, G.Corongiu, J.H.Detrich, H.Kahnmohammadbaigi, S.Chin, L.Domingo, A.Laaksonen, N.L.Nguyen, Physica, 131B, 74-102(1985).

[2] E.Clementi, S.Chin, G.Colongiu, J.H.Detrich, M.Dupuis, D.Folsom, G.C.Lie, D.Logan, V.Sonnad, "Biological and Artificial Intelligence Systems", (E.Clementi and S.Chin Eds., ESCOM Science Publishers, B.V.Leiden, 1988).

[3] R.A.Whiteside, J.S.Binkley, M.E.Colvin, H.F.SchaeferⅢ, J.Chem.Phys. 86, 2185-2193(1987).

コネクション・マシンCM－5

日本シンキング・マシンズ株式会社
山田　　　實

超並列コンピュータ、コネクション・マシンＣＭ－５は、現在世界中に７５台以上の納入実績を誇るコネクション・マシンＣＭ－２、ＣＭ－２００の後継機種として開発され、最新のＲＩＳＣプロセッサー技術、シンキング・マシンズ社の最新並列プロセッサー通信技術、現在３０００人以上のユーザーを擁する超並列処理オペレーティング・システムＣＭＯＳＴ、データ並列処理型標準言語Ｆｏｒｔｒａｎ－９０準拠のＣＭＦｏｒｔｒａｎ、Ｃ＊言語その他のコンパイラー技術、ソフトウェア・ライブラリー、ソフトウェア開発環境、ディスク・アレイ・サブシステム、ＦＤＤＩ、ＨＩＰＰＩなどの高速ＬＡＮネットワーク技術をＵＮＩＸベースのオープン・システム環境の中に総て統合している。

コネクション・マシンは並列処理による数値解析の高速化のみに留まらず、ニューラル・ネットワーク、ＭＢＲ（Memory Based Reasoning）、ＣＢＲ（Case Based Reasoning）、人間ゲノム、巨大数値解析、巨大データベース検索、並列コンピュータ・サイエンス、コンピュータ・ビジュアリゼーションなどの最先端超並列処理研究の分野で既に多くの論文が発稿され、更に超並列による格段の処理能力改良により初めて可能になる米国政府策定による２０のグランド・チャレンジ・プログラム分野へも応用が拡大している。

コネクション・マシンＣＭ－５はデータ並列型（ＳＩＭＤ型）アーキテクチャーとメッセージ・パッシング型（ＭＩＭＤ型）アーキテクチャーの双方をそのノード・プロセッサー・ネットワーク技術により実現し両者を混在使用する事も可能、スカラー演算、ベクトル演算、超並列演算を融合して多様なプログラミング・スタイルに対応している。

科学技術の分野で取り扱われる巨大データは、圧力、温度、速度、力、振動、その他の性質などを表現する要素データの巨大集合である場合が多く、その処理も或る一定アルゴリズムを全データに適用すれば完成する。
コネクション・マシンＣＭ－５はこの巨大データを構成する要素データの一つ一つにプロセッサー（仮想プロセッサー）を割り付けて全プロセッサー（仮想プロセッサー）を同一アルゴリズムで駆動する事により巨大データを一挙に処理するデータ並列型アーキテクチャー、性質の異なる複数データ領域のそれぞれに仮想プロセッサー群を割り付けて複数アルゴリズムを並列駆動する複合データ並列型アーキテクチャー、それぞれのプロセッサーが割り当てられた独自のデータとアルゴリズムを他のプロセッサーとデータ交換しながら全体処理を進めるメッセージ・パッシング型アーキテクチャーの全てをサポートし、それらを混合使用する事もできる。

ユーザー・プログラムは全て仮想プロセッサーを使用して書かれるのでユーザーはノード・プロセッサー数やハードウェア構成から独立にソフトウェア開発を行える。

ＣＭ－５のノード・プロセッサー群は幾つかのサブグループ（パーティション）に分割して各々のパーティションを互いに独立したＣＭ－５システムとして超並列ＵＮＩＸ環境を設定する事が出来、それぞれのパーティションにてＴＳＳサービスやバッチ処理サービ

スが提供される。

ノード・プロセッサー群はフロントエンド・コンピュータ（パーティション・マネージャー）を親として、１対N、N対１、（１対N）＊n、（N対１）＊nの集合演算、シンクロナイゼーション、ブロードキャスト、コンテクスト・スイッチングなどの超並列処理機能とノード・プロセッサー間で使用されるN対Nの非同期メッセージ・パッシング機能を備えており、これらの機能はコンパイラーやオペレーティング・システムにその使用を一切任せる事も、またユーザーが独自にその使用を制御する事も可能である。

ノード・プロセッサー・ネットワークはデータ並列処理（ＳＩＭD処理）に必要なシンクロナイゼーション機能、メッセージ・パッシング処理（ＭＩＭD処理）に必要な非同期ポイントーポイント通信機能、並列処理に重要なノード・プロセッサー間論理演算機能、仮想プログラム空間の物理アドレス空間変換機能、システムエラー検出機能などの超並列集合通信機能を内蔵したハイパーツリー構造を持っており、あらゆるトポロジーに対してデッドロック・フリーな高速通信を可能にしている。

システム・ソフトウェアは教育・研究・科学技術の分野で主流になっているＵＮＩＸによるオープンシステムに基盤を置いており、利用環境、ファイル・システム、ＮＦＳ、Ｘーウインドウなどはそのまま継承されている。

コネクション・マシンＣＭ－５の物理プロセッサーは最小１６個、最大８，１９２個の間で構成する事が出来、最高性能１テラ・フロップス（毎秒１兆回の浮動小数点演算）にまで拡張可能、入出力バンド幅、ノード・プロセッサー間通信性能、メモリー容量や処理性能に関しても同様に広い拡張性を有しており、それぞれがノード・プロセッサー数に比例して自在に伸縮する。

アプリケーション・ソフトウェアにも十分な融通性と拡張性が確保されており、データが小量であれば数ノードで処理、巨大になれば数千ノードで並列処理、その間性能が向上するのみでソフトウェアの変更・修正の必要はない。

ＣＭ－５の構成

ＣＭ－５は図ー１に示した様に超並列ユニット、ネットワーク、入出力機器、コントロール・プロセッサーより構成されている。

超並列ユニットは図ー２に示したノード・プロセッサー（ＮＰ）の集合で各々のＮＰはネットワークに接続されて相互に並列高速通信を行う。

ＮＰはネットワーク・インターフェース（ＮＩ）、ＲＩＳＣプロセッサー、４対のベクトル・ユニットとそれぞれのメモリーとをMーバス結合して構成されており、そのピーク性能は１２８ＭＦＬＯＰＳ／１２８ＭＯＰＳ、メモリー容量は３２ＭＢ、メモリー・アクセス・バンド幅は５１２ＭＢ／秒である。

ＣＭ－５のネットワーク

ＣＭ－５のネットワークにはノード・プロセッサー群への命令フローを制御・管理するコントロール・ネットワークとノード間データ転送を駆動するデータ・ネットワークがある。

ＣＭ－５のコンパイラーはアプリケーション・プログラムを分析して集約型処理部分と離

散型処理部分に分けて、必要に応じて双方を交互に繋ぎ合わせながらコンパイルを進める。
１つのアルゴリズムを全データに適用できる集約型処理部分ではコントロール•ネットワークにより同期的に全ノードにて実行ステップが進められ、多岐分岐のような幾つかの異なった処理を必要とする離散型処理部分ではそれぞれの部分データ量に応じて分割されたノード群毎にコントロール•ネットワーク制御が分散し、多重並列処理が行われる。
コントロール•ネットワークは命令の実行を統合するだけでなく、データ•ネットワークがブロードキャストやポーリングを実行するときにも相互使用される。
これらのプロセッサー間同期やネットワークの為の複雑な制御コードはコンパイラーによって自動生成され、ノード間競合や並列デッドロックが避けられる。

データ•ネットワークはそれ自体高い評価を得たＣＭ－２００のデータ•ルーターをさらに改良したもので、不規則な通信パターンや局所的な通信に最適化され、グローバル通信にも高い性能を維持している。

グローバル•ブロードキャスト、リダクション、スキャン操作の様な特化通信パターンの実行にはコントロール•ネットワークの制御支援が得られ、特に全ノード出力の加算、並列長大連続データの最大値、論理演算、ランニング•トータル等を得るスキャン操作は並列処理に取って最重要機能である。
１０２４ネットワーク•ノードの場合の総合データ転送性能は最高２０ＧＢ／秒、最低５ＧＢ／秒。

ＣＭ－５の入出力

バランスの良い超並列コンピュータにとって性能スケーラビリティーと同様に入出力スケーラビリティーも重要な要素になっている。
大型ＣＭ－５システムで２０人のユーザーがディスク•アレイ（３３ＭＢ／秒）からデータを読み出しながら処理結果を同時にＨＩＰＰＩフレーム•バッファー（１００ＭＢ／秒）にアニメーション表示をすると、２．６ＧＢ／秒の合計入出力性能が必要になる。
ＣＭ－５のＩ／Ｏポートは１本が５、１０、２０ＭＢ／秒でデータ転送速度が１００ＭＢ／秒のＨＩＰＰＩフレーム•バッファーはＩ／Ｏポートを６本、３３ＭＢ／秒のスケーラブル•ディスク•アレイは１６本のＩ／Ｏポートを並列接続して高速転送に対応している。

合計２．６ＧＢ／秒のデータ転送要求も、将来出現してくる超高速入出力機器もＩ／Ｏポートを必要本数並列接続すれば超高速データ転送が可能になる。
転送されるデータは常にデータ•ネットワークを通るので、Ｉ／Ｏコントローラはプロセッサー•メモリーへ読み書きするだけでなく、Ｉ／Ｏ機器からＩ／Ｏ機器への読み書き、パーティションからパーティションへの読み書き、読み込みながら配列の行順から列順への並び換えなど、パワーフルなＩ／Ｏ命令が使用できる。
スケーラブル•ディスク•アレイ（２５．３ＧＢ／台）、ＩＢＭ３４８０互換テープ•ライブラリー、ＨＩＰＰＩ、ＦＤＤＩ、標準ＶＭＥバス、標準ＳＣＳＩ－２バスが接続可。

コントロール•プロセッサー（フロントエンド•コンピュータ）

ＣＭ－５の全てのユーザー環境はフロントエンド•コンピュータ上にあり、オペレーティング•システムＣＭＯＳＴ、ソフトウェア開発環境ＰＲＩＳＭ、高級言語群、ソフトウ

ェア・ライブラリーＣＭＳＳＬ、外界とのコミュニケーションなど全てがフロントエンドとそれに接続されたネットワーク環境上で使用される。
フロントエンド・コンピュータはその機能を分離して複数のフロントエンド・コンピュータに分散させて用途別に使い分ける事が出来る。
その種類には、超並列ユニットを幾つかのパーティションに分割して構成する各々のユーザー領域に１台づつ割り付けてＵＮＩＸによるＴＳＳ、バッチ処理環境を構築するパーティション・マネージャー、パーティションの設定やロード・バランシング、システム起動・停止制御、エラー・ログ管理などを実行するシステム・コンソール、システム診断や遠隔診断を実行管理するダイアグノスティック・サーバー、全てのシステム・ソフトウェアの管理・供給を行うシステム・ファイル・サーバー、ユーザー・プログラムのコンパイル・サーバー等がある。

ＣＭ－５のシステム・ソフトウェア

　ＣＭ－５システムのオペレーティング・システムＣＭＯＳＴは標準ＳｕｎＯＳにＣＭ－５の並列処理管理、プロセッサー間通信、入出力管理、並列プログラムのＴＳＳ実行などをつけ加えた物で、ユーザーの利用環境はＵＮＩＸのオープン・システム環境をそのまま継承している。
　言語はＦＯＲＴＲＡＮ７７、データ並列型のＣＭＦＯＲＴＲＡＮ、データ並列型のＣ＊、データ並列型の＊Ｌｉｓｐで、メッセージ・パッシング型超並列処理のためにＣＭＭＤＬライブラリーがある。
ＦＯＲＴＲＡＮ７７プログラムを解析して並列型、ベクトル型に改良しＣＭＦＯＲＴＲＡＮへ変換するＣＭＦｏｒｇｅがあり、ＦＯＲＴＲＡＮ７７プログラムの超並列化とベクトル化を推進できる。
科学技術計算ライブラリーＣＭＳＳＬ、可視化ライブラリーＣＭＸ１１があり並列プログラミングを支援する。
並列ソフトウェア開発環境としてＭｏｔｉｆベースのＰＲＩＳＭがあり、編集、デバッグ、性能解析、データの可視化をサポートしている。

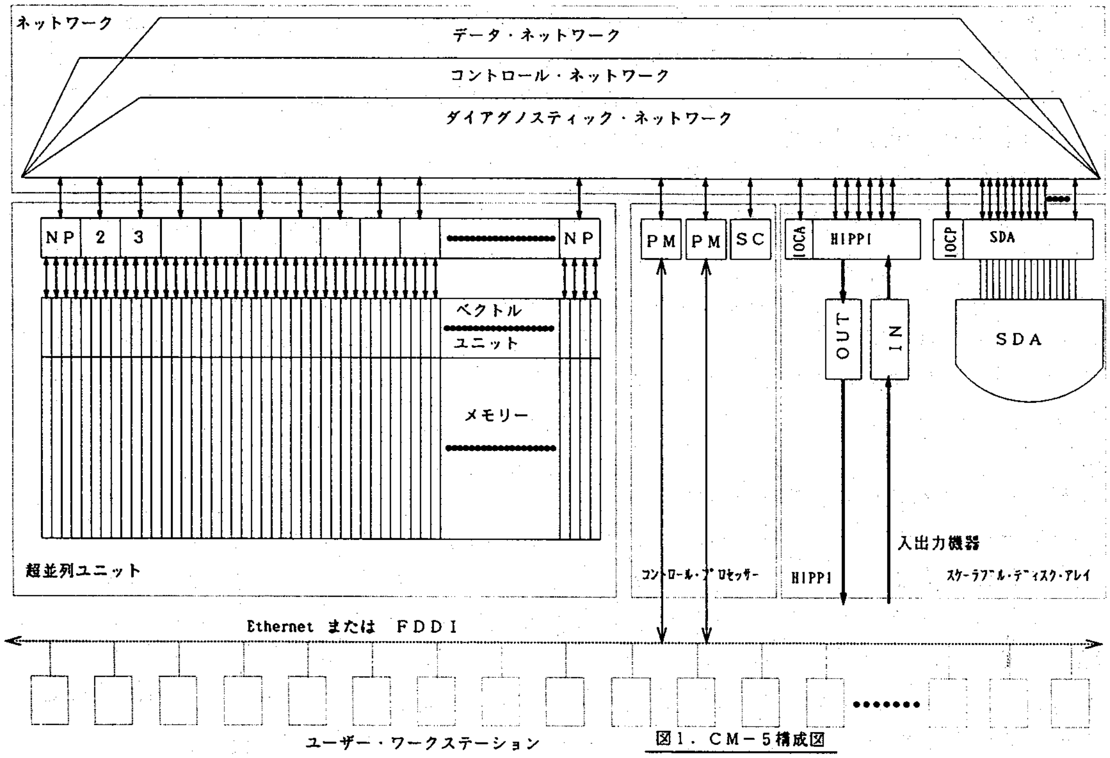


図1．CM−5構成図

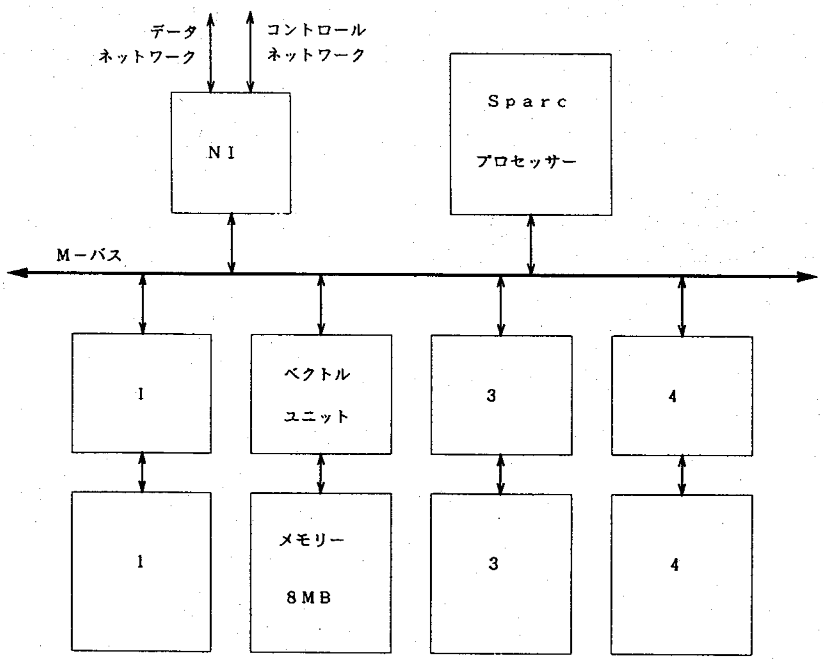


図2．　ノード・プロセッサー

高並列コンピュータ AP1000

㈱富士通研究所
白石 博

1．まえがき

次世代の超高速コンピュータとして分散メモリ型の高並列コンピュータが注目を集めている。各要素プロセッサに固有の演算装置とメモリを持たせ，数百～数千のプロセッサが通信ネットワークを用いて通信を行いながら処理を並列に進めるもので，プロセッサ台数に比例した性能向上が得られる可能性がある。近年のマイクロプロセッサの高速化に伴ってピーク性能ではベクトル型スーパーコンピュータを凌駕するようになってきており，世界的に研究・開発が活発化している。

本稿では，富士通研究所で開発された，最大1024プロセッサエレメントで構成される高並列コンピュータAP1000について，そのハードウェア・ソフトウェアの概要を紹介する。

2．AP1000のアーキテクチャ[1)]

科学技術計算分野など多くの応用では，データ全体を分割して並列に実行する「データ並列」処理によって，効率良く問題を解くことができる。このとき，データを必要とするプロセッサにいかに速く届けるか，すなわち，通信の遅延をいかに小さくするかが，高性能な並列コンピュータを実現する鍵となる。プロセッサ台数が増え，一つのプロセッサの扱うデータが小さくなったときには，通信ネットワークだけではなく，データの送受信に要する遅延時間の短縮も必要となる。さらに，通信ネットワークには，多数プロセッサが頻繁に通信を行ったときに発生するネットワーク輻輳が引き起こす性能低下をいかに小さくするかが要求される。この低レイテンシと高スループットを満たす通信機構を実現することが，AP1000アーキテクチャ開発の第一のねらいである。

高並列コンピュータAP1000は16台から最大1024台のセルと呼ぶ高性能プロセッサを，3種類のネットワークで接続した構成をとる（図-1）。専用の同期ネットワーク（S-Net)に

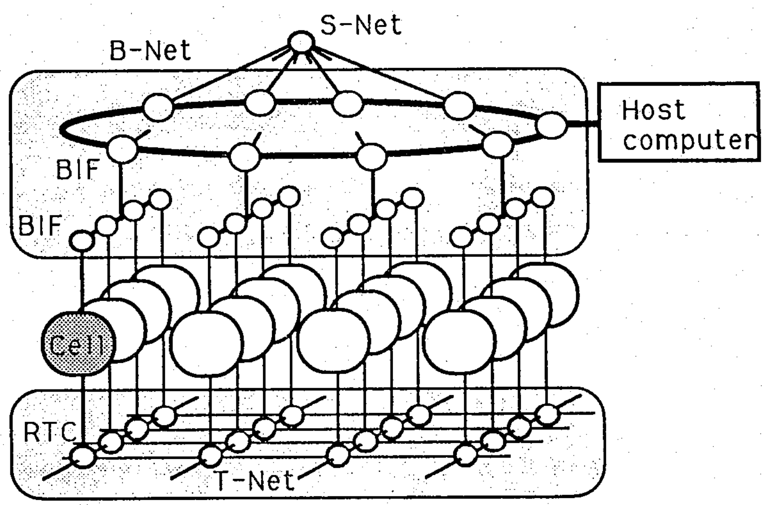


図-1. AP1000のシステム構成

よって，ホストや多数セル間でのバリア同期を高速に実現できる。ブロードキャストネットワーク（B-Net)は，ホストとセルを含めた，1対多通信やデータの分配と収集に用いられる。トーラスネットワーク(T-Net) はセル間でのデータ通信に用いられる。新しいルーティング方式の採用により，隣接セルだけでなく遠隔セルとも高速に通信できる。各セルはSPARC プロセッサ(IU,FPU)，メモリ(DRAM)，キャッシュメモリ，メッセージコントローラ(MSC) とネットワークデバイス(RTC,BIF) で構成されている（図-2）。

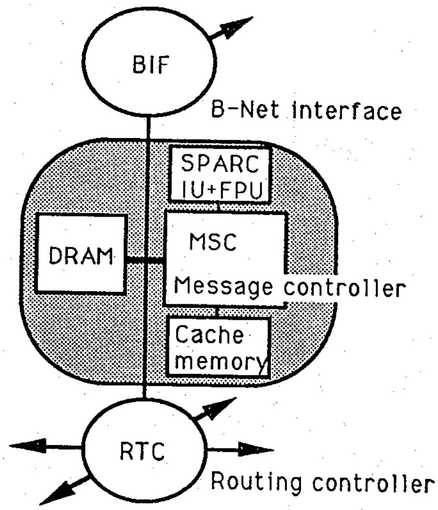


図-2. セル構成

3．AP1000のネットワーク

セル間のデータのやりとりはT-net を介して行われる。T-net は二次元トーラス構造のネットワークで，メッセージのルーティング方式として，低レイテンシを満たし，かつ，デッドロック回避と高スループット達成のため，「ワームホールルーティング」に「構造化バッファプールアルゴリズム」を取り入れた新しいルーティング方式を実現した。

ネットワーク自身の高速化と共に，メッセージの送信と受信におけるセットアップオーバーヘッドの削減も重要な課題である。送信メッセージがキャッシュ上にあるとき，ネットワークに直接出力する高速な送信機能（ラインセンド）を開発した。従来の送信セットアップが不要であり，送信時の遅延を短縮できる。受信側では，ネットワークからメモリ上のリングバッファに，メッセージを直接受信する機能(バッファレシーブ) を実現している。従来行われていた受信に対する割り込み処理が不要であり，実行とメッセージ受信を並列に行うことができる（図-3）。

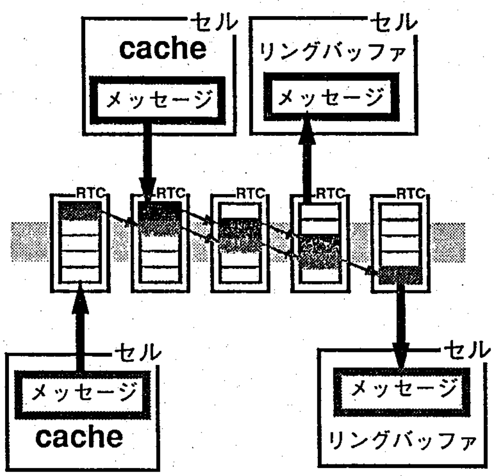


図-3. 構造化チャネル

一例として，LU分解によって連立一次方程式を解くLINPACK ベンチマークの実行結果では，小さなデータの通信をも高速化したことによって，問題サイズが比較的小さいとき，あるいは，台数が増えたときにも，AP1000では高い性能が得られている。[2)]

4．並列アルゴリズムと並列化支援ツール

高並列コンピュータの利用技術の面から見ると，個々の応用問題でどのようにして高速化を達成するか，すなわち，「並列アルゴリズム」が重要なポイントとなる。従来から，粒子系の問題などでは並列処理の有効性が知られていたが，最近は流体系の問題や VLSI のCAD 分野の大規模組み合わせ問題などの並列アルゴリズムの研究も進みつつある。

自動並列化技術が未成熟な現段階においては，並列プログラムの開発を効率化する並列化支援ツールも重要である。並列プログラムの開発をワークステーション上で行うための「シミュレータ」，各セル上で動くプログラムをソースレベルでデバッグするための「デバッガ」，各セルの動作や負荷状況を実行時にホストのウィンドウにグラフィクス表示する「ランタイムモニタ」，通信や同期のタイミング，実行・通信・アイドル時間の割合など，並列処理の性能解析に用いる「パフォーマンスアナライザ」などが開発されている。図-4はパフォーマンスアナライザの画面表示例である。

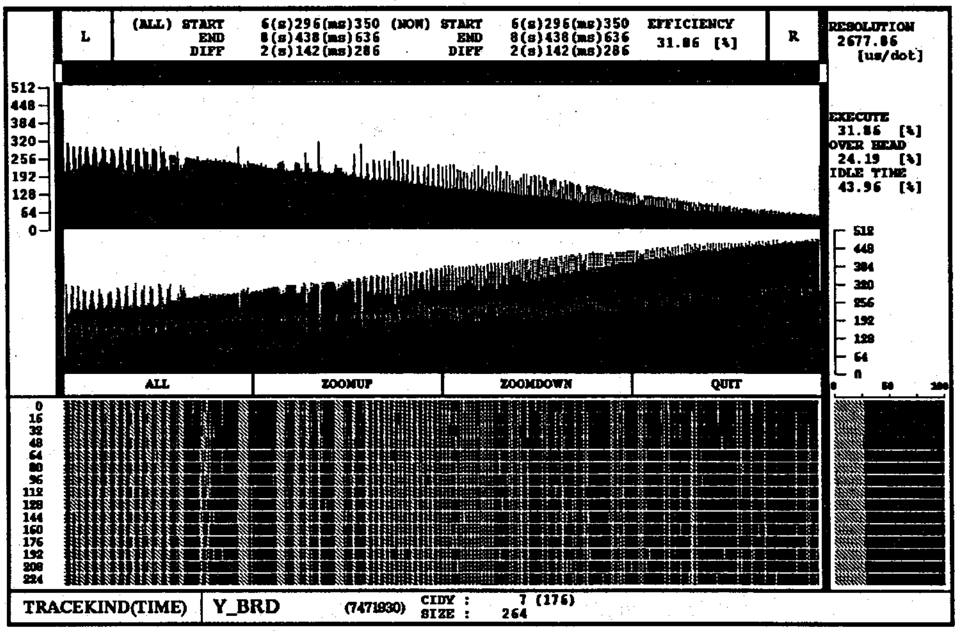


図-4．パフォーマンスアナライザの表示例

5．並列処理研究センター

富士通では『並列処理研究センター』を昨年６月に設立した。当センターでは、並列処理の研究の輪を拡大し，並列ソフトウェアやアルゴリズムの研究を促進することを狙っている。AP1000の利用環境を大学や国公立の研究機関の研究者にも開放し，各問題分野に応じたアルゴリズムの蓄積や並列計算機の適用評価を進めることを目的としている。

現在，センターには 512セル,128セル各 1台，64セル２台，計４台のAP1000を設置している。また，これらをWIDEインターネットに接続し，社外の研究者が身近に並列処理の応

用を試みることができる環境を実現している(図-5) 。現在，国内外の約90研究グループが登録しており，並列言語や並列コンパイラなどの基本ソフトウェア分野の研究，量子色力学，高エネルギー物理学，流体力学，分子動力学，回路シミュレーションなどの応用分野の研究が試みられている。

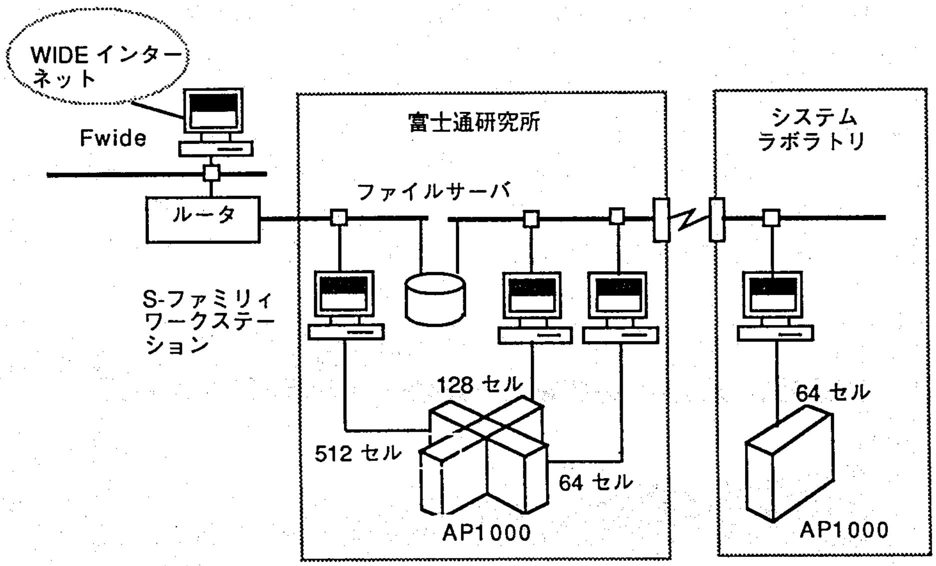


図-5. 並列処理研究センターの構成

6．今後の課題

超並列コンピュータが世に広く受け入れられるためには，ソフトウェアの研究，特に並列コンパイラが重要である。アーキテクチャ面では，通信・同期の更なる高速化に加え，数千台を越えるような超並列システムの実現に必要となる，CPU と通信機能を集積化した要素プロセッサの開発が重要となると思われる。また，利用分野の面では，現在中心となっている科学技術計算分野以外にオンライントランザクション処理やデータベースなど事務処理分野への適用拡大も検討課題である。

〔参考資料〕

(1). H. Ishihata, et al. : An Architecture of Highly Parallel Computer AP1000, IEEE Pacific Rim Conf. on Communication Computers and Signal Processing, 1991, pp13-16.

(2). T. Horie, et al. : AP1000 Architecture and Performance of LU Decomposition. Proc. of 1991 International Conf. on Parallel Processing, 1991, pp634-635.

高並列コンピュータAP1000（その2）
分子動力学計算プログラムAMBERの並列処理

(株)富士通研究所　佐藤弘幸

1.はじめに

分子動力学法は、原子、分子レベルの物質のシミュレーション法の一つである。高速なベクトル型コンピュータの出現によって、広く行なわれるようになってきた。最近では、単体のベクトル型コンピュータを大幅に凌駕する性能を持つ分散メモリ型の高並列、超並列のコンピュータが開発されており、アメリカを中心として商用化されている。

富士通研究所では、最大で1024プロセッサからなる高並列コンピュータAP1000[1, 2]を開発した。このような、高／超並列コンピュータで高い性能を得るには、通信のオーバーヘッドを極小化するデータの分散配置や計算負荷の平均化等を考慮して応用プログラムの並列化を行なう必要がある。我々は、蛋白や核酸を対象とする分子力学／動力学計算プログラムAMBER[3]の分子動力学計算モジュールを高並列コンピュータ用に並列化し、その性能をAP1000で評価した。

2.分子動力学法の並列化

計算原理　分子動力学法では、各原子に加わる力を求め、原子毎にニュートンの運動方程式(1)を時間積分する。

$$F_i = m_i \frac{d^2 X_i}{dt^2} \qquad (1)$$

ここで、F_i, m_i, X_iはそれぞれ原子の力、質量、座標でtは時間である。

これを、数千から数万ステップ以上繰り返し、原子の運動を求め、これから種々の統計量を得る。各原子に加わる力は、原子間のポテンシャルのグラディエントから求める。実際には、各原子毎にこれと相互作用する原子との間で(3)式のポテンシャル関数の微分を計算し、求めた力を原子毎に加算していく。計算量の大半は(3)式の4項以降のボンドを持たない弱い結合（ファンデアワールス力、クーロン力）に費やされる。これらの力は距離と共に減衰するので、ある一定距離（カットオフ距離と呼ぶ）以上離れた原子間の計算を省略する。

$$F_i = -\sum_{j \neq i} {}_iE(X_{ij}(t)) \qquad (2)$$

$$E_{total} = \sum_{bonds} K_R (R - R_0)^2 + \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{dihedrals} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\phi - \gamma)]$$
$$+ \sum_{i<j} \left[\frac{A_{ij}}{R_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{R_{ij}^{6}} + \frac{q_i q_j}{\varepsilon R_{ij}} \right] + \sum_{H\text{-}bonds} \left[\frac{C_{ij}}{R_{ij}^{12}} - \frac{D_{ij}}{R_{ij}^{10}} \right] \qquad (3)$$

空間分割法　カットオフを用いた計算では、原子の相互作用は近接原子間のみとなる。こうした近接作用のみの計算は、問題の空間を分割し、並列計算機上にマッピングすると、データの参照や移動がローカル化されることから、通信量が減り、有利とされてい

る。このような空間分割法による分子動力学計算の並列化については多くの報告があるが、比較的単純な分子／原子で構成されるモデルを扱う場合がほとんどで、蛋白質等の高分子を対象とするものは見当たらない。

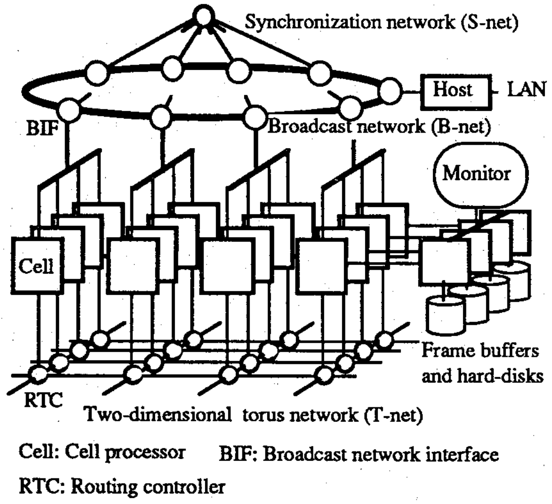


Fig. 1 AP1000 architecture

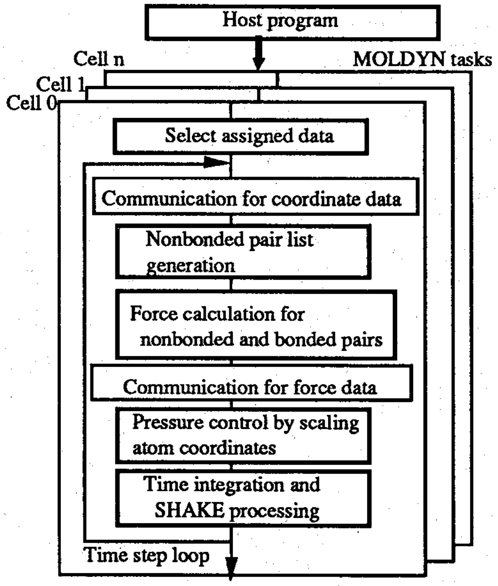


Fig. 2 MOLDYN program structure

空間分割法の適用性　空間分割法は、AMBERに適用しようとしたとき次のような問題がある。(1)カットオフ距離を一辺の長さとするキューブで分割したとき、充分な数(数百以上）の並列度(空間の数)が得られない。(2)原子間のカットオフの距離チェックは、原子単位でなく残基（あるいは水分子）単位で行なうため、アルゴリズムが複雑になる。(3)計算コストが空間内で一様でない(蛋白質部分の計算量が水部分のより数倍多い）ため負荷分散が悪くなる。

粒子分割法　これに対して、粒子（原子）をプロセッサに固定的に割り当てる粒子分割法は、粒子の個数相当の高い並列度が得られる上、ランダムに原子をプロセッサに割り当てることで、負荷分散も図れる。一方、プロセッサ間で大域的な通信が必要になる。AP1000は、効率的なグローバル通信が可能なネットワークを備えているので、粒子分割法が適用可能で空間分割より有利と判断し、粒子分割法による並列化を行なった。

並列化法　評価用のモデルは、水の溶媒中に置かれた蛋白質で130残基からなるライソザイムを用いた。残基と水分子を単位としてプロセッサに固定的に分散配置する。

Fig.2 に並列化したプログラムのフローを示す。時間ステップ内で発生する主要な通信は2箇所である。一つは、座標データの参照である。各プロセッサは、担当原子に加わる力を計算するが、これと相互作用する原子の座標データが必要になる。各プロセッサは担当原子の座標データをAP1000(Fig.1を参照）のB-netを使って放送し、各プロセッサはこれを受信して、全原子の座標データのコピーを作成する。

各プロセッサは、担当する残基と水分子について他の全残基/水との間でカットオフ

チェックを行なって、相互作用する原子の組の情報(ペアリストと呼ぶ)を作成する。カットオフ距離は1.0nmを使用した。ペアリストは、25ステップに一回更新する。残基／水相互のカットオフチェックは、同じ組について一回だけ行なうようにFig.3のような選択ルール(黒まるのペアが選ばれる)を用いた。

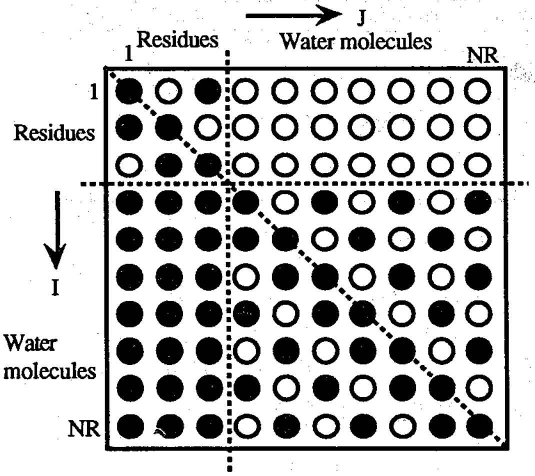


Fig.3 Selection of submolecule pairs

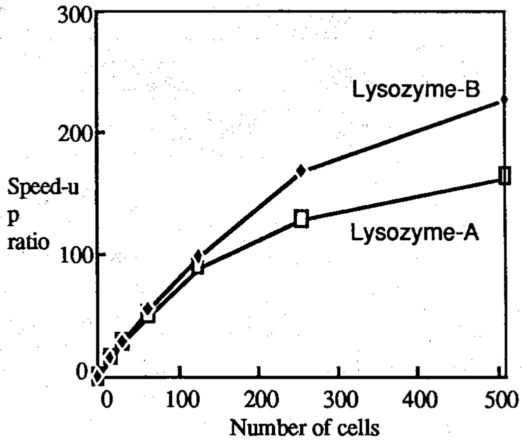


Fig. 4 MOLDYN performance on the AP1000

力の計算は、原子ペア毎に行ない、求めた力を双方の原子の力に足し込む。この時、ペアの片方の原子は任意のプロセッサに割当られているので、そのプロセッサへ力のデータを送信し、そのプロセッサで加算処理を行なう。この通信は、1対1通信に向いたT-netを用いる。

3. AP1000における評価

ライソザイムと水からなる2種類のモデル（Table 1 参照）を用いて評価を行なった。

Table 1 Model data

Parameter	Lysozyme-A	Lysozyme-B
Protein	Lysozyme	Lysozyme
Atoms (total)	20665	41095
Atoms (protein)	2041	2041
Atoms (water)	18624	39024
Residues	130	130
Water molecules	6208	13008
Box size (nm)	7.03x5.89x5.44	7.51x7.51x7.51
Cut-off radius (nm)	1.00	1.00
Cut-off checking	residue base	residue base
Pair list generation	every 25 steps	every 25 steps
#nonbond pairs(initial)	4711181	8965917

Fig. 4にAP1000上での台数効果を示す。Fig. 5は、41,095原子からなるLysozyme-Bの処理時間の内訳である。ペアリスト生成および力の計算部分は、並列化の効果が高い。また、負荷分散が良好でアイドル時間の割合が小さい。通信では、座標データの放送通信がプロセッサ台数によらない一定の時間を要しており、256プロセッサ以上では性能を

悪化させる要因になっている。

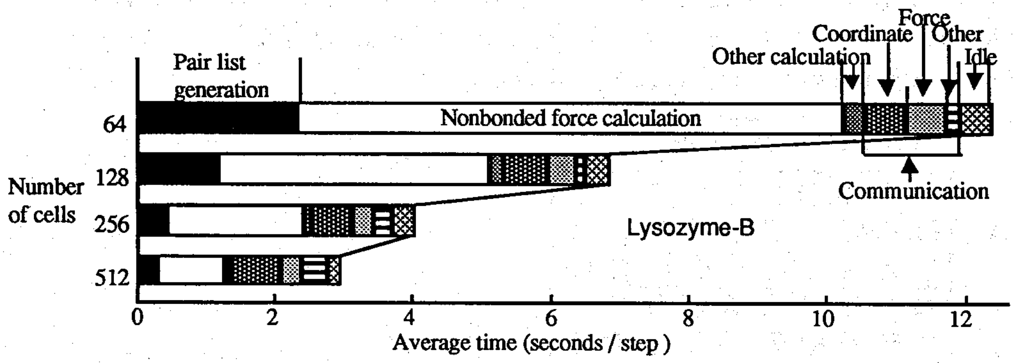


Fig. 5 Timing results for Lysozyme-B

比較のために汎用機のM-780での実験も行なった。512プロセッサのAP1000では、M-780と比較して、Lysozyme-Aで17.3倍、Lysozyme-Bで22.4倍高速であった。

4. おわりに

粒子分割法により分子動力学計算プログラムAMBERを並列化し、高並列コンピュータAP1000で評価し、数百プロセッサまで台数効果が得られることを確認した。今後の課題は数千プロセッサまでのスケーラビリティのある並列アルゴリズムの開発である。また、こうした応用プログラムを自動で並列化するコンパイラの開発も大きな課題である。

謝辞: 本研究は、次の方々と共同で進めたものです。蛋白工学研究所の八尾徹（現三菱化成）、川北栄継、斉藤稔、森上賢治(現東燃)、岩間博の諸氏。富士通の田中康正氏。プログラミング担当のFQSの堤重信氏。映像化プログラム担当の吉嶋秀明氏。この場を借りて諸氏に深謝致します。

参考文献

1. Ishihata, H. et al., "An Architecture of Highly Parallel Computer AP1000," Proc. IEEE Pacific Rim Conf. on Commun., Comput. Signal Processing, 1991, pp. 13-16
2. Shimizu, T. et al., "Low-Latency Message Communication Support for the AP1000.," Proc. 19th Int'l Symp. on Computer Architecture, May 1992, pp. 288-297.
3. Weiner, P. K., and Kollman, P. A., "AMBER, Assisted Model Building with Energy Refinement. A General Program for Modeling Molecules and Their Interactions," J. of Comput. Chem., Vol. 2, No. 3, 1981, pp. 287-303
4. Sato, H. et al., "Parallelization of AMBER Molecular Dynamics Program for the AP1000 Highly Parallel Computer," Proc. Scalable High Performance Computing Conference (SHPCC'92), pp.113-120.

部会行事

第15回情報化学討論会プログラム

主催　日本化学会情報化学部会
共催　日本化学会ほか
日時　平成4年11月25日（水）～27日（金）
会場　京都大学薬学部記念講堂
〒606 京都市左京区吉田下阿達町 TEL 075-753-4523
FAX 075-753-4544
交通　京阪電鉄丸太町駅下車徒歩8分

本討論会は第20回構造活性相関シンポジウムと併催されます。
参加登録・懇親会各予約および要旨集前送申込締切　11月5日（木）
一般講演の講演時間25分　（講演18分、討論7分）

第1日　(11月25日(水))
一般講演
10:00～10:50　［座長］藤田忠男
25I01 "Partial-Heating Molecular Dynamics"-立体配座解析の効率的な手法の開発
（北里大薬）　○辻下英樹、広野修一、森口郁生
25I02 分子動力学シミュレータのためのワークベンチ：ＭＡＳ　ＰＨＹＣ － ポテンシャル関数ライブラリ・エディタ －　（富士通）　○酒井広太、山本優子、三上　亨、林　広海、竹内宗孝、三上益弘
11:00～11:50　［座長］三上益弘
25I03 Ab initio分子軌道法による不斉フッ素原子をもつ強誘電　性液晶のモデリングおよび静電ポテンシャルと物性との関係　（分子）　○藤田忠男
25I04 ベクトルプロセッサとパラレルＩＯを利用したオキシヘ　ムの大規模ＣＡＳＳＣＦ計算　（中京大教養・九工大情報工）　山本茂義、○柏木　浩
13:30～14:20　［座長］菰岡仁志
25I05 メリチンの高次構造形成機構　（東京農工大工）　○園山正史、安川民男
25I06 球内残基数を用いた蛋白質立体構造予測の試み（２）
（旭化成）　○鎌田朋子、戸澗一孔
14:30～15:20　［座長］安川民夫
25I07 類縁蛋白質のモデリング法の進展　（北里大薬）　○山下憲文、梅山秀明
25I08 タンパク質受容体部位の自動推定：静電解析にもとづく　候補部位の評価
（豊橋技科大）　○カルロス・デルカルピオ、高橋由雅、佐々木慎一
15:30～16:20　［座長］戸澗一孔
25I09 ＤＮＡを基礎にした蛋白質一次シーケンス解析
（北里大薬）　○菰岡仁志、梅山秀明
25I10 アンチセンス分子設計のための核酸三重らせんのモデリング法
（東大薬）　○富岡伸夫、板井昭子

16:30～17:20　［座長］富岡伸夫

25I11 ＤＮＡモデリングのエキスパートシステムの進展
（北里大薬）○四宮和子、梅山秀明

25I12 大腸菌とバクテリオファージのゲノムコード領域における　σ^{70}ープロモータ類似配列の抑制性の相違　（山形大工）○金谷重彦、工藤喜弘

第２日　(11月26日(木))

一般講演

9:35～10:50　［座長］松浦育敏

26I13 延伸による結晶性高分子の挙動と弾性率
（呉羽化学）○栗原あづさ、中馬　寛、榎本　聰

26I14 木構造間の距離と化学への応用　（神大工）○田中栄一、増田澄男

26I15 有機構造解析の考え方とその実践　（山形大工）○工藤喜弘

11:00～11:50　［座長］金谷重彦

26I16 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（その２）立体化学の認知と表現　（中外製薬）○松浦育敏

26I17 創薬と安全性研究のための分子計算環境MOSA IIの開発
（国立衛試・群馬大・アドイン研）神沼二真、中野達也、中田琴子、五十嵐貴子、中田吉郎、浜谷和彦

休憩

ポスターセッション　(11月26日(木) 13:30～16:00)

26P01 分子動力学シミュレータのためのワークベンチ：ＭＡＳＰＨＹＣ － 成膜シミュレーションのためのヒューマンインタフェース －　（富士通・西肥情報サービス）
○並木武文、竹内宗孝、大谷正尚、石戸橋眞、三上益弘

26P02 長距離相互作用を考慮した２段階cutoff-MD計算法
（北里大薬）○山乙教之、広野修一、森口郁生

26P03 分子動力学を用いた分子内環化反応の位置選択性に関する検討
（旭化成）○田頭瑞加、戸澗一孔

26P04 ＭＮＤＯ計算によるコラーゲン関連ペプチドの安定構造とそのＸ線構造解析およびＮＭＲ解析　（近大理工）○高橋紘一、山口仁宏、茨木雅人

26P05 ＡＮＡＬＯＧＳのニューラルネットワーク・システムによるレセプター・マッピング（第４報）　（東京農工大工・大正製薬・阪薬大）○山野辺進、安川民男、角谷重幸、北村一泰、石田寿昌

26P06 生体高分子の基準振動解析法と酵素反応系への応用
（北里大薬）○神谷健秀、梅山秀明

26P07 キメラ参照蛋白質を利用した蛋白質モデリング法の開発
（北里大薬）○梶原明朗、菰岡仁志、神谷健秀、梅山秀明

26P08 類縁タンパク質の構造のずれと疎水コア距離の相関
（持田製薬・北里大薬）○鮫嶋理恵、梅山秀明

26P09 フレキシブル分子を含む多分子間の三次元共通部分構造の認識

（豊橋技科大）○ヴォルフ・イーレンフェルト、髙橋由雅、阿部英次、佐々木愼一
26P10 構造－活性相関を意識した合成支援システム　（富士通）　○湯田浩太郎
26P11 合成設計支援システムＳＰＥＫの開発　（神奈川大理）　○中山　堯、伊藤尚樹、川村健史、菅野　崇、北原清隆
26P12 有機化合物のＩＵＰＡＣ命名支援システムの開発名称－構造変換システム　Ⅱ
（豊橋技科大）　○阿部英次、曽田健一、佐々木愼一
26P13 パソコン用分子特性推算システムの開発
（豊橋技科大）　○水元英詔、髙橋由雅、助川正之、佐々木愼一
26P14 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（１６）各種官能基の判定
（化技研・富士通）　○田辺和俊、田村禎夫、上坂博亨
26P15 並列カルマンフィルターによるスペクトルデータ解析
（豊橋技科大）　○吉田浩士、李　志良、宮下芳勝、佐々木愼一
26P16 ＴＵＴＯＲＳ：部分構造情報に基づく候補構造精選知識ベースシステムの開発
（豊橋技科大）　○石山雄一、髙橋由雅、佐々木愼一
26P17 化学構造とＮＭＲスペクトルデータ処理統合システムＣＩＭＳの開発（Ｖ）－ＣＩＭＳのワークステーションへの実装と並列検索機能の実現
（豊橋技科大）　○奥山　徹、五月女優、豊田　学、Joe Lian Min、橋詰裕行、阿部英次、佐々木愼一
26P18 ３次元類似性検索の応用の試み　（石原産業）　○赤木俊夫
26P19 パーソナルコンピュータによる学会講演要旨集のデータベース化とその利用。情報化学討論会および構造活性相関シンポジウム要旨集（続報）
（電通大・DAKO Japan・北里大薬）　山崎　昶、○梶川博司、岡地優司、平賀やよい、木下俊夫

特別講演

16:30～17:30　［座長］大沢映二

「化学反応の一般化」　（基礎化学研究所長）　福井謙一

懇親会　（構造活性相関シンポジウムと合同で開催します。）

18:00～20:00　京大会館

第３日　(11月27日(金))

一般講演

10:00～10:50　［座長］藤原英明

27I18 ９０ＭＨZプロトンＮＭＲフルスペクトルデータベースの構築
（豊橋技科大）　○阿部英次、石井孝幸、佐々木愼一
27I19 電子メールを用いたＮＭＲスペクトルデータ検索システムの開発
（豊橋技科大）　○奥山　徹、阿部英次、佐々木愼一

11:00～11:50　［座長］阿部英次

27I20 研究室所蔵各種文献集のデータベース化とその利用
（電通大・明治大理工）　○山崎　昶、梶川博司、尾崎　剛、渡邊耕司、鈴木康雄
27I21 ＩＡＲＣモノグラフからの発癌物質データベースの作成

（国立衛試）　神沼二真、五十嵐貴子、○中野達也

13:30～14:20　　　［座長］前田浩五郎

27I22 類推による有機合成研究用情報ベースシステムの構築

（筑波大電子）　○王　忠清、鄭　四清、藤原　譲

27I23 シフト検定法の開発と化学、薬学への応用（４）ニューラルネットワークへの応用

（阪大薬）　高木達也、○中井宏紀、和田千佐、野田昭宏、小野澤学寿、松村謙一、藤原英明

14:30～15:20　　　［座長］山崎　昶

27I24 反応データベースの構築とその利用システムの開発

（チッソ石化・情報大・ミドリ十字・三井東圧化・藤沢薬品・大正製薬・出光石油化学・吉富製薬・ＮＴＴ・クラレ・神奈川大・萬有製薬・筑波大・中外製薬・田辺製薬・三共）　潮田　誠、石塚英弘、井上佳久、小田研悟、加藤一孝、川島　豊、○清水恵次郎、白木政巳、菅原駿吾、高島裕幸、中山　堯、西岡　亮、藤原　譲、松浦育敏、宮城島利一、松井孝司

27I25 ＮＩＳＴ－ＭＳＤＳにおけるＣＡＳ化合物の側鎖部分　（その５）該当化合物高速抽出の試み　（筑波研究学園・ＤＢＳ・東京家政学院筑波短大）　○仲久保正人、仲久保公子、和知孝宜、前田浩五郎

日本化学会情報化学部会総会　15:30～16:10

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と合本）１冊を含みます。

予約　（一般）6,000円，（学生）4,000円。

当日　（一般）7,500円，（学生）5,500円。

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うえ、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み下さい。　確認後、確認書をお送りします。

申込先　606 京都市左京区吉田下阿達町　京都大学薬学部　町田勝之輔宛

銀行口座　銀行名　第一勧業銀行百万遍支店

口座名　普通預金　476-1749221

名義　情報化学構造活性実行委員会

問合せ先　京都大学薬学部　町田勝之輔（電話(075)753-4523）　多賀徹　（電話(075)753-4533）　FAX(075)753-4544

関　連　行　事

第２０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、日本薬学会近畿支部、日本農芸化学会、日本農薬学会、
　　　構造活性相関懇話会
日時　平成4年11月25日（水）～27日（金）
会場　京都教育文化センター
　　　〒606 京都市左京区聖護院川原町
　　　交通　京阪電鉄丸太町駅下車徒歩４分
本討論会は第15回情報化学討論会と併催されます。
参加登録・懇親会各予約および要旨集前送申込締切　11月5日（木）
一般講演の講演時間25分　（講演18分、討論7分）

第１日　(11月25日(水))
一般講演
9:35～10:25　［座長］高木達也
25S01 電子的情報を考慮した立体パラメータによる構造－活性相関
（富士通）　○湯田浩太郎
25S02 ニューラルネットワーク法を用いたDescriptor Mapping　-QSARにおける Descriptorの相互依存性をみる　（星薬大・日立）　○市川　紘、青山智夫
10:35～11:50　［座長］中馬　寛
25S03 長鎖脂肪族アミド及びアミン類の殺線虫活性
（金沢大薬・金沢大医）　○木内文之、西澤里美、川西博美、木下さゆり、大島久直、内谷明世、関野典子、石田美樹、津田喜典、近藤力王至
25S04 AK－toxinアナローグの構造と活性（１）
（京大農・ジョージア大化学・長崎大薬）　○上野民夫、宮川　恒、張　勇、入江　寛
25S05 ペプチドロイコトリエンアンタゴニストとアゴニストの構造活性相関と構造因子
（徳島大薬・同工・徳島文理大薬）　○後藤　了、堀　均、平良全栄、寺田　弘
13:30～14:45　［座長］山川眞透
25S06 拡張結合グラフ記述子を用いた有機化合物の生分解性のＱＳＡＲ解析
（ゼリア新薬・北里大薬）　○平野弘之、中込　泉、広野修一、森口郁生
25S07 エリスロマイシンＡ－オキシム誘導体の定量的構造活性相関解析
（大正製薬・北里大薬）　○川島　豊、山田由紀、朝賀俊文、三沢洋子、樫村政人、森本繁夫、小野武夫、長手　尊俊、畑山勝男、広野修一、森口郁生
25S08 アルドース還元酵素阻害作用を示すスピロキナゾリン誘導体の定量的構造活性相関
（田辺製薬）　○清水　良、朝尾正昭、山岸正文、岩崎為雄、宮城島利一、松本和男
14:55～16:10　［座長］宮下芳勝
25S09 分子軌道法計算を用いた1,2,4-チアジアゾリン系殺菌剤のＱＳＡＲ
（日本曹達）　○中山　章、萩原健司、橋本　章、下田　進

25S10 殺菌活性を有するトリアゾリルメチルシクロペンタノール誘導体の定量的構造活性相関（Ｉ）　（呉羽化学）　○伊藤篤史、最勝寺俊英、熊沢　智、中馬　寛

25S11 殺菌活性を有するトリアゾリルメチルシクロペンタノール誘導体の定量的構造活性相関（Ⅱ）　（呉羽化学）　○中馬　寛、伊藤篤史、最勝寺俊英、熊沢　智

16:20～17:10　［座長］広野修一

25S12 ＨＭＧ－ＣｏＡ還元酵素阻害剤の３次元構造－活性相関
（豊橋技科大）　○長谷川清、白石敞悟、宮下芳勝、佐々木慎一

25S13 ステロイド化合物のアンドロジェン及びエストロジェン受容体への結合能のQSAR及びCoMFA解析　（塩野義・京大農）　○山川眞透、藤田稔夫、赤松美紀、江角清志、鈴木哲朗、堀部　功、加藤五郎

17:20～18:10　［座長］赤松美紀

25S14 新規ＴＲＨアナログ－JTP-2942－の活性と動的構造の解析
（ＪＴ・北里大薬）　○岡島伸之、安田明浩、佐久間和彦、春田純一、小林孝次、岩田邦男、内田逸郎、米田茂隆、梅山秀明

25S15 セロトニン（$5HT_3$）拮抗作用を有するベンズイミダゾール誘導体の構造活性相関
（鐘紡）　大高　博、○堀　学、鈴木健司

第２日　(11月26日(木))

一般講演

9:35～10:50　［座長］高山千代蔵

26S16 イオン性アミノ酸を含むアセチルジ-、トリペプチドアミドの疎水性と構造との関係
（京大農）　○赤松美紀、片山　忠、岸本大助、黒川洋一、柴田洋之、藤田稔夫、上野民夫

26S17 液クロ法による疎水性パラメータ推算の問題点（５）　ヘテロ芳香族化合物のcapacity factorと分配係数の相関関係
（神戸女子薬大）　○山上知佐子、高尾楢雄

26S18 エントロピー定数$\sigma_s°$の推算とその各種医薬品への適用
（阪大名誉・阪大薬・近大薬）　佐々木喜男、高木達也、○小野澤学寿、川木秀子

11:00～11:50　［座長］寺田　弘

26S19 アルコール水溶液における溶質の疎水性－構造相関
（京大工）　○広瀬美加、北尾　修、中西浩一郎

26S20 ＮＭＲによるミセル／水系の分配係数の測定～ＮＭＲシフト試薬法の内部基準の検討とフェノール誘導体への応用～　（阪大薬）　○神崎康治、林　一也、藤原英明

特別講演

16:30～17:30　［座長］大沢映二

「化学反応の一般化」　（基礎化学研究所長）　福井謙一

懇親会　（構造活性相関シンポジウムと合同で開催します。）

18:00～20:00　京大会館

第３日　(11月27日(金))

一般講演

9:35～10:50　　　［座長］梅山秀明

27S21 サイトカインの立体構造予測

（味の素・蛋工研）　○福原健一、澄川弘美、渡辺信弘、西川　建

27S22 分子重ね合わせに基づく新規活性構造構築法

（東大薬）　○金沢孝記、井上　篤、板井昭子

27S23 タンパク質－リガンド安定複合体構造の自動探索法

（東大薬）　○山田実穂、富岡伸夫、板井昭子

11:00～11:50　　　［座長］高橋由雅

27S24 ＰＡＦ受容体の立体構造予測とＰＡＦの結合様式の推定

（北里大薬・東大医）　○梶原明朗、菰岡仁志、神谷健秀、米田照代、米田茂隆、南　道子、清水孝雄、梅山秀明

27S25 タンパク質複合体構造のモデリングの進展

（北里大薬）　○北澤聖子、米田茂隆、梅山秀明

13:30～14:20　　　［座長］板井昭子

27S26 生体膜のモデリング　（北里大薬）　○米田照代、梅山秀明

27S27 免疫グロブリンのFvモデリングと抗原結合部位のＭＤシミュレーション

（北里大薬・味の素・東大薬）　○海老沢計慶、神谷健秀、菰岡仁志、米田茂隆、福原健一、中迫雅由、佐藤能雅、嶋田一夫、荒田洋治、梅山秀明

14:30～15:20　　　［座長］広野修一

27S28 α_2 -plasmin inhibitorのモデリングとその活性部位の性質の検討

（北里大薬・東医歯大医）　○中山　勝、梶原　明朗、神谷健秀、米田茂隆、菰岡仁志、三浦　修、青木延雄、梅山秀明

27S29 水溶液中の分子動力学計算：ＨＩＶ－１プロテアーゼの動的構造

（北里大薬）　○米田茂隆、山下憲文、梅山秀明

参加登録費　情報化学討論会と共通、講演要旨集　（情報化学討論会と合本）１冊を含みます。

予約　（一般）6,000円，（学生）4,000円。

当日　（一般）7,500円，（学生）5,500円。

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うえ、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み下さい。　確認後、確認書をお送りします。

申込先　606 京都市左京区吉田下阿達町　京都大学薬学部　町田勝之輔宛

銀行口座　銀行名　第一勧業銀行百万遍支店

口座名　普通預金　476-1749221

名義　　情報化学構造活性実行委員会

問合せ先　京都大学薬学部　町田勝之輔（電話(075)753-4523）　多賀徹　（電話(075)753-4533）　FAX(075)753-4544

〒611　宇治市五ケ庄　京都大学化学研究所植物化学部門　西岡孝明（電話0774-32-3111　内線2167）

化学ソフトウェア学会'９２研究討論会

主　催　化学ソフトウェア学会
共　催　日本化学会・日本化学会情報化学部会・日本分析化学学会　他
（申請予定）
後　援　日本電気・富士通・日本ＩＢＭ・ｱｯﾌﾟﾙｺﾝﾋﾟｭｰﾀｼﾞｬﾊﾟﾝ　他
（申請予定）
開催日時　１９９２年１１月２８日(土)午後、２９日(日)全日
会　場　大阪市立大学　田中記念館
所在地：〒558　大阪市住吉区杉本 3-3-138
交　通：ＪＲ阪和線「杉本町」駅下車　徒歩３分

主　題　化学の研究・教育におけるパーソナル・コンピュータの利用
内　容　記念講演　大沢映二先生（豊橋技術科学大学）
口頭発表・デモンストレーションおよび総会
懇親会　１１月２８日(土) 17:30〜19:00
田中記念館内「めたせこいあ」

参加申込　１０月９日(金) 締切(必着)
郵便またはＦＡＸで氏名、勤務先、勤務先所在地(または住所)、電話番号、ＦＡＸ番号、懇親会出席の有無を記入の上、下記連絡先宛に申し込みください。

参加登録料　本学会会員　３０００円　共催学会会員　４０００円
一　般　５０００円　学生会員　１５００円
懇親会会費　４０００円（予定）
（参加登録料・懇親会会費は当日会場にてお支払いください）

連絡先　〒558　大阪市住吉区杉本 3-3-138
大阪市立大学理学部化学科　福代　誠(ﾌｸﾖ ﾏｺﾄ)
松下叔夫
電話　０６－６０５－２５５７（福代）
２５５６（松下）
ＦＡＸ　０６－６０５－２５２２(福代宛と明記してください)

プログラム

第1日　（１１月２８日（土））　(13:00 - 19:00)

一般発表　５分間概要説明（口頭発表）
デモンストレーション

101　分子動力学計算システム GROMOS の入出力プログラムの開発(2)
（群馬大教養）中田吉郎
102　分子モデリングプログラム MolWorld の言語Ｃへの変換について
（日本アイ・ビー・エム）小出昭夫
103　フレームバッファを用いた分子模型表示
（新薬開発研究所）永井右近
104　MS-Windows の下での分子グラフィックスシステムの開発
（姫路工大工）○中野英彦、松井淳、山名一成、三軒齊
105　パソコンによるフラーレンの立体表示法
（大阪工業試験所）○石川俊英、大槻荘一、阪口享、
106　インターフェイスの異なるプロッターに対応した作画用プログラム
（神戸大医短）○大野隆（阪府大工）宮田壽
107　分子グラフィックスを利用した分子計算システム(SYMMETRY)の開発(2)
（阪市大理）○吉田潤一、福代誠
108　High C386 用グラフィックライブラリー　フラクタルシミュレーションへの応用
（阪府大工）宮田壽
109　グラフの画像から数値を読み取る
（創価大工）○伊藤眞人、守谷崇、藤野晴信、先田和弘、渡部和、井上博愛
110　パソコン図鑑　基本有機化合物
（香川大医）○獅々堀彊、倉橋研吾

記念講演　化学アルゴリズム研究の現状と問題点
（豊橋技科大）大澤映二

懇親会　大阪市立大学田中記念館メタセコイアにて　(17:30 - 19:00)

第２日　［１１月２９日（日）］　(9:30 - 15:30)

一般発表　５分間概要説明（口頭発表）
デモンストレーション

201　紫外　可視スペクトル学習用プログラム
（新潟女子短大）○本間善夫、丸山直子
202　糖質研究用ソフトウェア Glyco-Kit の開発（２）
（国際基督教大学理）吉野輝雄
203　U BASIC の化学計算への応用
（立教大理）○宮前雄一、成澤芳男
204　酸塩基滴定データから酸解離定数を決定するためのコンピュータ
プログラム KCAL92
（電気化学工業）○池田由人（横浜市立大理）望月桂
205　C++ による電子線回折図形のシミュレーション
（埼玉大工）○野口文雄、三田村孝
206　岩石　鉱物のための構造式算出プログラム
（早大教育）木ノ内嗣郎
207　分子表面積及び体積計算プログラムの改良
（函館高専）長野輝夫
208　GC-MS 測定データからの多変量解析法によるニトラパムとジアゼパムの
定量
（愛知県警科捜研）○三井利幸（中部大工）藤村義和
（信州大理）野村俊明
209　マルチ計測システムの開発
（東京高専）○西宮辰明、久保真嗣、（森井電業）飯塚祥太郎
210　電気化学測定におけるデータ取得とその処理
（阪市大理）土江秀数

休憩

一般発表　５分間概要説明（口頭発表）
デモンストレーション

211　化学Ｑ＆Ａシステムの開発と試用
（福井高専）○古屋博隆、南部透、山口浩、伊東芳勝、三好正明、
吉村忠与志
212　ウィンドウ方式の化学ドライラボシステムの開発
（福井高専）○南部透、古屋博隆、笠島徹、吉村忠与志
213　HPLC 総合データベースの構築
（東ソー）○多田芳光、大村則子、椎木浩司、池田知子
214　構造データに基づく分子の群論的分類
（一橋大）○矢野敬幸、吉村康子、尾崎成子
215　データ処理プログラム
（千葉県立衛生短大）林誠人
216　Chem. Abstr. リーダー
（千葉県立衛生短大）林誠人（鈴峯女子短大）○岡本信子
217　PC 画面上への鳥瞰図型表示による各元素の物性値などの表示と比較
（電通大）○山崎昶（青山学院大）古橋昭子、（工学院大）渡部正利
218　「化学と教育」誌の簡易検索システム
（大阪府立西浦高校）紺野昇
219　分光スペクトルオンライン処理用プログラム
（阪市大理）久保茂一

海外動向

米国計算機化学事情見て歩き

㈱旭リサーチセンター　田中一雄

1．はじめに

3 月31日から4 月10日まで、化学工業日報社主催の「米国ＣＣＳ産業視察団」に参加した。視察先は、Cray Research 社、Du Pont 社、North Carolina Supercomputing Center、アメリカ化学会(ACS) および展示会、Sun World Expo '92など。主に計算化学主体の視察となった。

2．クレイ社(4月1 日)

1）概要

ダラスフォートワース空港からミネソタ州ミネアポリスのクレイ社へ。クレイ社の91年の売上は1100億円、収益は150 億円であった。

1992年3 月現在、全世界でクレイ社のスーパーコンピュータは約300 システム導入されている。内訳は、政府139 、企業111 、大学48。地域別では、米国60% 、欧州30% 、日本10% 、分野別では、エネルギー、航空宇宙、環境が多く、化学・医薬は少ない。化学・医薬分野でのクレイ社のスーパーコンピュータの利用は1986年から始まり、現在ユーザー数は15、33CPU にすぎない。同社の最上位機種はY-MP C90、16CPU 構成で、最大24GFLOPS。価格は約40億円。

2）UNICHEM からDYNACHEMへ

クレイ社はハードウェアメーカにもかかわらず、ハードの利用目的を明確にするためにソフトウェアの領域に膨大な投資を行っている。戦略的に組織、機能を明確に分担しており、日本企業も見習う必要があろう。

同社では、これまでの中心的アプリケーションUNICHEM(分子レベル、ミクロ的) からDYNACHEM(動的、マクロ的) へと中心を移そうとしている。経済性、安全性、環境問題、品質向上などの面を考慮したより効率的なプロセスを設計するシステムがDYNACHEMである(図1 参照) 。開発方法はUNICHEM と同じコンソーシアムによる共同開発を目指している。

3）将来の目標

同社は超並列コンピュータ (Massively Parallel Machine) の開発を開始している。1995年までにTeraFLOPS を実現し、1997年には継続的にTeraFLOPS を実現できるスーパーコンピュータを世に出す予定にしている。この計画は、米大統領構想の一つであり、大規模ネットワーク構築とともに、米国の威信をかけたプロジェクトになっている。

このほかダウンサイジングも積極的に進める意向である。データセンターでは、CRAY-1を始めとして新旧14台のスーパーコンピュータが稼働しており、主にソフト開発とユーザサポートを行っている。オペレーションルームは3 交替制で運営されているとのこと。

3．デュポン社(4月2 日)

1）概要

シカゴ経由でフィラデルフィア泊、バスに乗換えデラウェア州ウィルミントンのデュポ

ン社中央研究所へ。まる一日D.A.Dixon 博士の案内で所内を視察した。

1991年度の売上は390 億ドル(約5 兆円)、利益14億ドル、従業員は13万3000人。Fortune誌の売上高ランキングで全米8 位である。事務用や工場用の情報関連投資額は10億ドルで、全研究費は13億ドルに達する。全研究費のうちR&D コンピューティング費用は5%(6500 万ドル)を占める。全研究者数は5000人で、このうち専門家は1700人、残りの3300人はサポートスタッフとのこと。コンピュータ・ケミストリー関係の人員は、Scientific Computing Divisionに100 人、その他各研究所内に100 人程いる。

2)デュポン社のハードウェア構成

クレイ社のスーパーコンピュータY-MP4/332 、4 システム(24CPU) のIBM3090(パラレルプロセッシングのテスト用)、50台のVAX-8800、100 台のマイクロVAX 、数百台のワークステーション(IRIS 等)、2500台のパソコン(Mac,IBM) が主にDECNETで接続されている。世界的規模で24時間監視している。

3)ソフトウェア、データベース開発、

一人の研究者に年間30万ドルの費用がかかる。ソフトウェアの開発に従事させるには費用が高すぎるため、同研究所ではソフトウェアの開発は行っていない。大きなデータベースについては、Corporate Information Science Group が管理している。これには、農薬・医薬品用のDiscovery や特許・研究報告用のデータベースがある。ユーザ数が5 ~50人の小さなデータベースは個々のユーザが管理している。これらを統合する動きはない。

4)研究開発の状況

主な開発状況は図2 の通りである。フロン代替化合物、C_{60}などのフラーレン、触媒などの理論化学計算が盛んに行われている。

この他、単位操作やプロセス開発のシミュレーション、プラントデザインなど各種の規制措置に対する検討にシミュレーションを利用している。大事なのは、数値化ではなく可視化とのこと。

また、フロン代替化合物によるオゾン層破壊など、環境モデルの計算も盛んに行っている。デュポン社の基本方針は、ものを造る前にプロセスデザインや環境への影響を前もって検討することにある。もし芳しくない予想結果がでた場合には、その物質は放棄することも辞さない。日本の化学企業も見習う必要があろう。

デュポン・メルク製薬の研究所も見かけたが、医薬品開発状況の説明は一切なかった。

5)人材の確保

入社10年以上の化学者にコンピュータを教育するのは難しい。また、同社ではPh.Dを5年間訓練して初めて計算化学者として一人前になる。コンピュータと化学の両方を十分に理解できる研究者が望ましいが、現実の人材構成は図3 のようになっており、理想的な人材は10% に過ぎない。

6)今後の方向

以下は、TRIBBLE の開発者D.A.Pensak氏の話である。コンピュータの性能が10倍になる

のに要した期間は、1970年代は10年、1980年代は7 年、最近は3 年である。これに伴い、プログラムの寿命は70年代が20年間、80年代が15年間、最近は5 年間と、ますます短くなっている。一方プログラム開発の生産性は10行/ 日程度で進歩が少ない。通常利用するプログラムは5 ～10万行あり、自前でプログラムを開発するにはコスト負担が大きすぎる。

また、思考をコンピューティングに置き換えることはできない。一言でいえば、必要のない計算をしないことである。現在デュポン社ではオーバーコンピューティングが問題になっている。Macintosh で処理できることもあり、スーパーコンピュータが本当に必要な仕事は何かを見極めることが肝要である。コンピューティング費用の節減が当面の問題。

4．おわりに

先にふれたように、今回は計算化学主体に視察が行われたため、デュポン社でも理論計算など見た目の良い話題が多かった。苦労談など、もっと泥臭い現場の話題が無かったのは残念だった。

しばらく前に、デュポン社では医薬品開発を断念したというニュースが流れた。だが同社では、デュポン・メルク製薬を創設し、着実に医薬品開発を続けている。当然これまでのコンピュータ・ケミストリーの資産を利用しているはずであるが、関連の説明は全くなかった。

計算化学は一見派手でスマートに見えるが、これだけで研究開発に成功するわけではない。蓄積された情報や知識など、情報化学的な手法と併用してこそ道が開けると思う。

この技術を活用するためには、①最終的に結果を判断するのは研究者である②計算化学的手法と情報化学的手法をバランス良く組み合わせて使う③現場の研究者を引き込む④化学者をこの技術の専門家に育てる⑤市販のソフトウェアを社内用にカスタマイズする⑥成果がでるまでには時間がかかる、の６項目に留意する必要がある。

誌面の都合上、North Carolina Supercomputing CenterとACS 203rd Meeting などの視察内容については、また機会があれば報告したい。

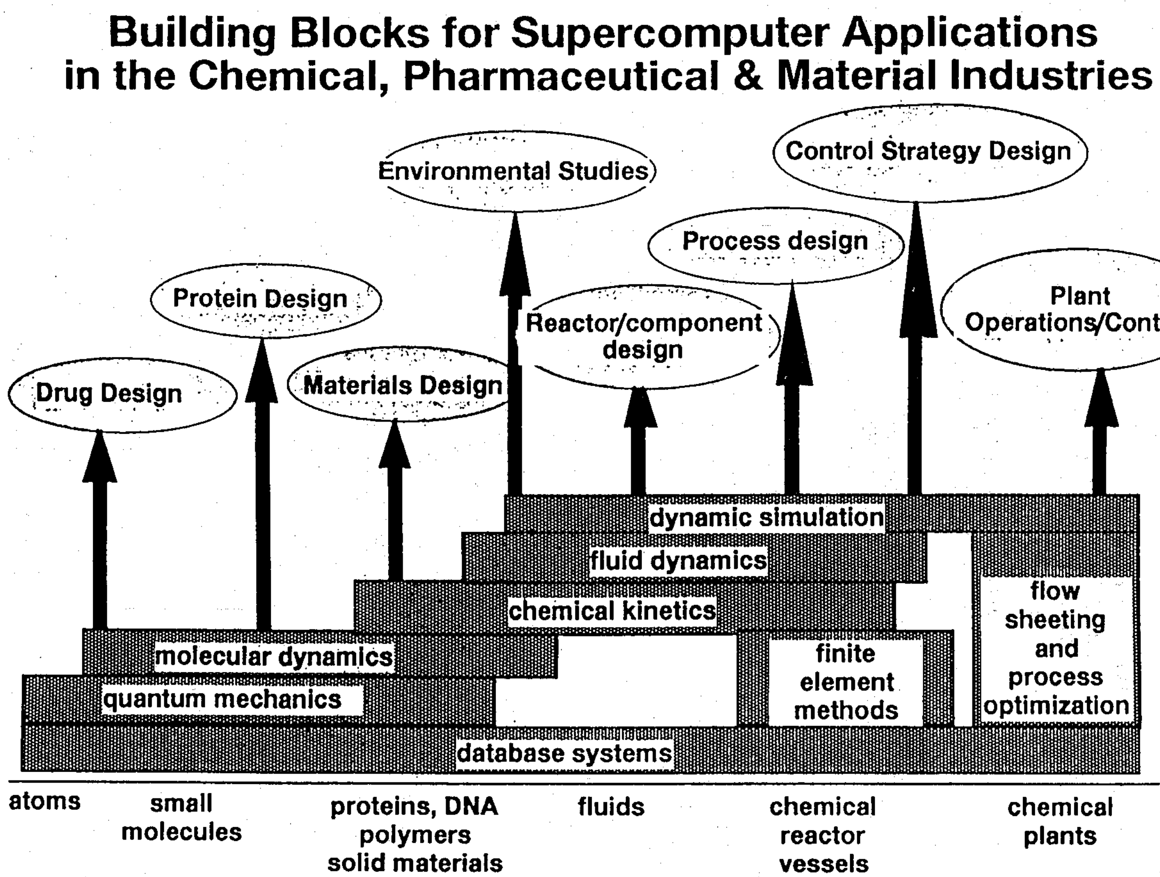


図1　UNICHEM とDYNACHEMの関係

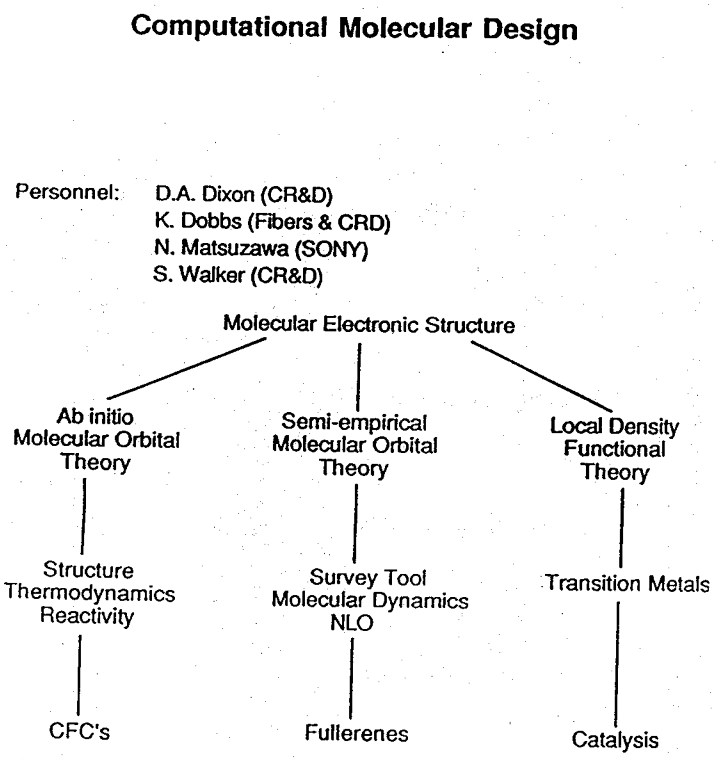


図2　デュポン社中央研究所の分子設計研究の例

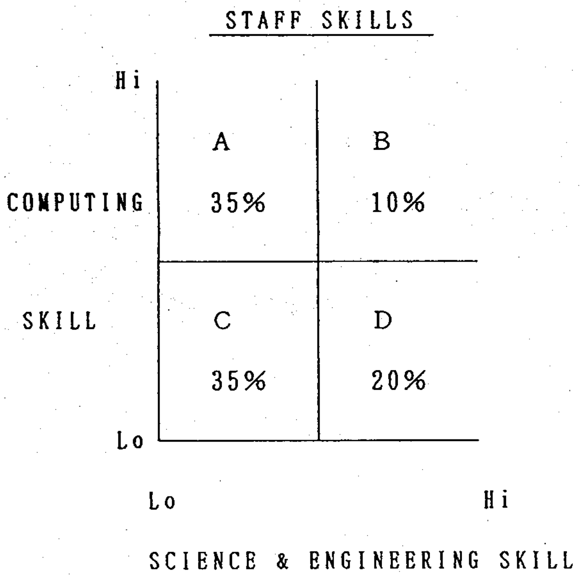


図3　デュポン社中央研究所Scientific Computing Divisionの人員構成

MEETINGS

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).

28 March-2 April 1993.
205th ACS National Meeting.
Denver, CO.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

August, 1993.
Gordon Conference on QSAR.
Tilton, NH.
Contact: Alexander M.Cruikshank, Gordon Research Conferences, Gordon Research Center, University of Rhode Island, Kingston, RI 02881-0801(401-783-4011;FAX:401-783-7644)
22-27 August 1993.
206th ACS National Meeting.
Chicago, IL.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

ＣＣＳ紹介

ＯＭＬ（OXFORD MOLECULAR 社）ソフトウエアの紹介

（株）東レシステムセンター
寺前 正一
桜井 隆史

１． はじめに

本誌９２年３月号に、英国ＯＭＬの生い立ちやＣＣＳへの取り組みについて紹介させていただきました。本号では既にリリースしております分子の類似性を定量化するプログラム「Ａｓｐ」、および配座解析プログラム「Ｃｏｂｒａ」について紹介させていただきます。

２． Ａｓｐの紹介

（１）Ａｓｐの概要

Ａｓｐは、生物学的等価性（Bioisosterism ）に基づいて複数の分子の類似性を定量的に計算するプログラムであり、おもに薬物の研究開発において使用されます。異なる分子の類似性はSimilarity Indexという指標を用いて表します。Similarity Indexは－１から１までの値をとり１に近いほど類似性が高いことを示します。

薬物－薬物受容体相互作用の３大因子は静電的因子、立体的因子、疎水的因子であるといわれています。Ａｓｐは、この中の静電的因子を考慮してSimilarity Indexを求めています。その他に分子の形状を考慮したSimilarity Indexを求めることもできます。

Similarity Indexは、どの化合物を優先的に合成すればよいかの指針として、あるいは定量的構造活性相関（ＱＳＡＲ）のパラメータとして使用されます。

（２）Ａｓｐの機能

①静電的因子を考慮したSimilarity Indexの計算

静電的因子を考慮したSimilarity IndexにはCarboのインデックスとHodgkinのインデックスの２種類があります。Carbo のインデックスは電子密度の形状を考慮したSimilarity Indexであり、Hodgkin のインデックスは電子密度の形状と大きさを考慮したSimilarity Indexで、次式で定義されています。

Carboのインデックス

$$R_{AB}=\int \rho_A\rho_B dv \Big/ \left(\int \rho^2{}_A dv\right)^{1/2}\left(\int \rho^2{}_B dv\right)^{1/2}$$

Hodgkinのインデックス

$$H_{AB}=2\int \rho_A \rho_B dv \Big/ \left(\int \rho^2{}_A dv + \int \rho^2{}_B dv\right)$$

ρ_A, ρ_B：電子密度

Ａｓｐでは、Carbo、Hodgkinのインデックスにおいて、電子密度を静電ポテンシャルまたは静電場に置き換えて計算します。これにより、４種類のSimilarity Index が計算することができます。

なお、計算手法には次の２種類があります。

ア）ＧＲＩＤ計算

ＧＲＩＤ計算は、重ね合わせた分子の周辺空間を格子に区切り、それぞれの分子の格子点上の静電ポテンシャルや静電場を数値的な積分を行ってSimilarity Indexを計算します。

イ）Ｇａｕｓｓｉａｎ関数を用いた計算（静電ポテンシャルのみ）

静電ポテンシャルを２項あるいは３項のガウス関数で展開し、上記の積分を解析的に求めてSimilarity Indexを計算することができます。したがって、分子の周辺空間を格子に区切らないため、ＧＲＩＤ計算より計算時間が短くなります。

②分子の形状を考慮したSimilarity Indexの計算（Ｓｈａｐｅ）

分子の形状を考慮したSimilarity IndexにはCarboのインデックスとHodgkinのインデックスの２種類があります。Ｓｈａｐｅは、重ね合わせた分子を格子に区切り、それぞれの分子のみに含まれる格子点の数と両方の分子に共通に含まれる格子点の数からSimilarity Indexを計算します。

③分子の重ね合わせの最適化（静電的因子を考慮した場合のみ）

Ａｓｐでは、Similarity Indexが最大になるように比較する分子の重ね合わせを自動的に行うことができます。なお、最適化はシンプレックス法を用いています。

ア）回転・平行移動による分子の空間配置の最適化。
イ）分子内の回転可能な２面角を回転させる分子構造の最適化。
ウ）ア）とイ）を組み合せた最適化。
エ）イ）にボルツマン因子を付加してSimilarity Indexに重みづけを行い、分子の構造が不安定の場合は除外する最適化。

３．Ｃｏｂｒａの紹介

（１）Ｃｏｂｒａの概要

Ｃｏｂｒａは、分子のローカルミニマムに対応する配座（以後、単に安定配座と呼びます）を系統的かつ高速に生成するプログラムです。安定配座を得るためには現在、分子動力学法、モンテカルロ法、ドライブサーチ法等、多くの計算時間を必要とする方法が用いられていますが、Ｃｏｂｒａでは知識データベースとＡＩ手法のアルゴリズムを利用して高速に安定配座を生成することができます。

知識データベースには分子を構成する環や官能基など、５７種類の分子部品（以後、ユニットと呼びます）とその部品のとりうる３次元構造（以後、テンプレートと呼びます）が含まれており、Ｃｏｂｒａはテンプレートの可能な組み合せを見つけ出し、配座を生成します。

（２）Ｃｏｂｒａの機能

①２種類の生成手法を用意

ア）ノーマルサーチ

テンプレートの可能な組み合せを全て抽出し、配座を生成することができます。

イ）Ａ＊サーチ

ＡＩ手法のひとつであるＡ＊アルゴリズムを用いてユーザが指定した数の安定配座をエネルギーに低いものから効率的に生成することができます。

②配座生成の制限

テンプレート組み合せ時のＶＤＷエネルギー、原子間距離あるいはテンプレート自身のもつエネルギーを考慮して、生成過程の配座が妥当であるか判断し、もし不適当であれば安定配座の候補から除外します。

③光学異性体、幾何異性体の分類

分子中のキラル中心やシス／トランス二重結合を検出し、光学異性体、または幾何異性体を分類して安定配座を生成することができます。

④Strain Resolution

配座の歪みを取り除き、より安定な配座を生成することができます。

⑤原子間の距離制限

ユーザが指定した原子間距離範囲を満足する配座のみを生成することができます。

⑥知識データベースの拡充

ユーザの作成した分子構造データをテンプレートとして登録することにより、配座生成をより効率的に行うことができます。

4. おわりに

今回はＡｓｐ、Ｃｏｂｒａについて紹介させていただきました。Ａｓｐ、Ｃｏｂｒａは有機低分子の解析のために開発されたプログラムであり、Ａｓｐは新薬開発における有効な指針を得ることができます。また、Ｃｏｂｒａは配座空間を高速に探索する新しい手法を用いており、分子のより詳しい配座解析を効率的に進めることができます。

さらに詳しい内容につきましては下記までお問い合わせください。

[お問い合わせ先]

（株）東レシステムセンター 営業部 電話 ０３－３２４５－５００６

参考文献

ＡＳＰ関連

Carbo R.,Leyda L. and Arnau M.,*Int J. Quant. Chem.*,17,1185-1189(1980).

Hodgkin E.E. and Arnau M.,*Int J. Quant. Chem.*,17,105-110(1987).

Good A.C.,Hodgkin E.E. and Richards W.G.,*J. Chem. Inf. Compt. Sci.*,32,188-191(1992).

Ｃｏｂｒａ関連

Andrew R. Leach and Keith Prout ,*J. Comp. Chem.*,11,10,1193-1205(1990).

Andrew R. Leach, Keith Prout and Daniel P. Dolata *J. Comp. Chem.*,11,6,680-693(1990).

Andrew R. Leach, Keith Prout and Daniel P. Dolata *J. Comput.-Aided Mol. Design.*,4,271-282(1990).

BIOSYM社"Polymer"の紹介

旭化成工業（株）コンピュータサイエンス室
柏原　誠一

【はじめに】

Polymerとは、分子設計ソフトの大手ベンダーであるBIOSYM社（米国）が企画し、コンソウシアム形式で製作されているポリマー分野向けのソフトである。世界各国の化学メーカーを中心に四十数社の企業がこのコンソウシアムに参加しており、日本の企業も十数社がメンバーとして参加している。日本での代理店は（株）菱化システムであり、ソフト、コンソウシアムについて詳しい内容を知りたい方は、そちらへ問い合わせていただきたい。今回は、このPolymerを利用するユーザーという立場で、利用しているモジュールを中心に雑感を交えてソフトの概要と特徴の紹介をしたい。

【Polymerソフト概要】

このソフトはその名が示すとおり、ポリマー分野に関する計算化学支援ツールであり複数のモジュールから構成されている。これらのモジュールは全てInsightIIというworkbenchツール上で起動され、１画面上でメニュー選択により各モジュール間を移動していくことができる。他ベンダーの高分子設計支援ソフトとしてPolygraf, QUANTA/Polymer 等が挙げれるが、これらは下記に示すPolymerizer、Amorphous_Cell、Crystal_Cellと後述するDISCOVERの機能を主力としたソフトのようである。

Polymerは、次の１０モジュールを主構成としている。

Polymerizer

モノマー分子のモデリングを行ない、想定する重合度のポリマーモデルを作成する。高分子化の際は立体規則性などの選択ができ、また、２種以上のモノマーから構成されるポリマーについてはブロック性や反応性比を考慮したモノマー連鎖分布の設定ができるといった付加機能がある。

Amorphous_Cell

Polymerizerで作成したポリマーについてバルク密度を考慮したアモルファス状態のポリマーマトリックスの構築を行なう。このとき使用する周期境界条件は、ポリマー鎖の両末端が連結する無限鎖モデルとは異なり、ユニットセル内の分子のコピーが周期的に存在しているというモデルである。

Crystal_Cell

結晶性ポリマーを想定したポリマーマトリックスの構築を行なう。ポリマーはら旋状分子を想定しモノマー結合間の２面角の設定や充填型式の設定が行なえる。また、周期境界条件はAmorphous _Cellとは異なり、Ｃ軸（ポリマー鎖）方向へ無限鎖モデルとなっている。

Interphases

格子モデルを利用してポリマー界面におけるポリマー鎖の相溶性、熱力学的特性について解析を行なう。

Networks

架橋ポリマー、ゴムに関するポリマーの架橋度、ゲル化点、ゴム弾性等の物性値の予測計算を行なう。分子モデルはグラフ理論を用いたマトリックス表記により行なう。

Phase_Diagram

Flory-Huggins 理論に基づくポリマー溶液の相平衡図を作成する。実験値とのフィッティングによりχ（相溶性）パラメータを算出する。

PRISM（Polymer Reference Interaction Site Model）

格子モデルやFlory-Huggins 理論を原子団レベルにブレイクダウンし、モデルをより精密化したものである。これにより、ポリマー溶融物、ポリマーブレンドの液体状態での混合相図、有効χパラメータ、平衡状態などの解析を行なう。

Visco_elasticity

ポリマー溶液の動的な粘弾性挙動を解析する。複屈折、せん断緩和弾性、連続緩和スペクトル、固有粘度、消光角、複素粘性率の検討を行なう。

RIS（Rotational Isomeric State）

Floryの回転異性体近似による直鎖状ポリマーの糸まり状態を計算する。液晶ポリマー等の剛直性の検討に応用される。Amorphous_Cellモジュール内のポリマー構築の際にも利用されている。

QSPR（Quantitative Structure Property Relationships）

実験値に基づいた構造物性相関により、アモルファスポリマーのガラス転移点、密度、ポアソン比等の物性値の予測を行なう。Dow法、van Krevelen法の2種が用意されている。

この他に、分子力場(MM)、分子動力学(MD)計算の為のアプリケーションとしてDISCOVERがサポートされている。これは、MM2, AMBER, CHARMm等と同様に構築した分子モデルの構造最適化を行なったり、観測条件（温度、圧力、密度、etc.）に対応したポリマーの動的性質の解析に使っている。

以上のモジュールを大きく分類すると、次のように分けられる。

1) 原子単位での分子モデリング（MM, MDへの展開）

Polymerizer、Amorphous_Cell、Crystal_Cell、（DISCOVER）

2) 擬ポリマーモデルによる計算モジュール

Networks、Interphases、（Phase_Diagram）、PRISM、Visco_elasticity

3) データベースに基づく計算モジュール

RIS、QSPR

1)は、原子単位でモデルを構築しているため物理的なイメージを明確に把握することができ、計算結果の解析を実験値との対比だけではなく、計算モデルそのものについてもさまざまな角度から検討が行なえる。

2)は、どちらかというとまず実験事実があり、その物理的現象に影響を与えている因子について吟味してゆくための計算として利用している。つまり、原子単位の分子モデルから擬ポリマーモデルとすることでパラメータを減らし、見るべき現象を

絞り込んでいる。従って、解析したいモデルごとに、実験事実に対応したパラメータの吟味が必要になってくる。

3)は、各種物性値に対するおおよその計算を行なう。特に、QSPRは実験を行なう前の推算値としての利用に有効である。但し、典型的なポリマーをもとにデータベースを構築しているため、新規な主鎖構造を有するポリマーの物性予測には不向きのようである。

【実際の使用例】

現在、我々のところでは上記の1)を中心に利用しており、DISCOVERと組み合わせることでMDを用いたアモルファスポリマーの特性解析を行なっている。具体的な解析例として、a)ガラス転移温度の推測[1)]とb)ポリマー中のガス拡散現象の解析[2)]を紹介する。

a)は、ポリエーテルケトン類やポリカーボネートといった耐熱性を要求されるようなポリマーに対してガラス転移点の予測を検討している。結果として、温度に対する体積変化の勾配の屈曲点としてガラス転移点を定義することができるようになってきたが、実験値との一致はあまりよくない。絶対値の予測と言うよりはむしろ、分子レベルでのガラス転移現象の解析に威力を発揮すると思われる。

b)は、ガスバリアー性の要求されるポリマーを対象にポリマーマトリックス中のガス分子の拡散定数の算出を行なっている。ガス拡散に問われるファクターとしてバルク密度や自由体積のほかに、分子特性としての水素結合の有無やポリマー鎖の運動性などの影響を評価できるようになってきた。

【今後の課題】

ポリマーに関する計算は、最近のコンピュータの進歩により計算可能な問題として取り上げられるようになってきた。しかし、まだまだポリマー分子そのものを取り扱うことは難しく、そのためにモデルの縮小、パラメータの簡略化によって問題を解決しようとしている。また、計算テーマとしての歴史が浅く、制限されたモデルで多様性に富んだポリマーの特性を予測することはこれからの研究であり、まだ実験の再現性を評価している段階であると感じている。

Polymerコンソウシアムも発足から現在に至る3年間でポリマー分野に関する計算全般に亘る汎用的なプログラムを開発し終えた段階であり、個々のモデルに対するリファインメントはこれからである。我々も今後、更に経験を重ねることによって実用的なアプリケーションとして利用していきたい。

References

1) T. Aoyagi, Y. Iwato, S. Kashihara, S. Yamanaka, and T. Komatsu, *Chemistry Express* 7, 533(1992).
2) S. Kashihara, T. Aoyagi, S. Yamanaka, and T. Komatsu, *Chemistry Express* 7, 537(1992).

文献紹介

〔コンテンツリスト〕

JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY

□ March 1992, Vol.13, No.2

☐ April 1992, Vol.13, No.3

☐ May 1992, Vol.13, No.4

□ June 1992, Vol.13, No.5

☐ July/Aug. 1992, Vol.13, No.6

☐ Sep. 1992, Vol.13, No.7

VOL.16, NO.3, 1992

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

☐ JUN. 1992, VOL.69, NO.6

☐ JULY 1992, VOL.69, NO.7

JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS

☐ March 1992, Vol.10, No.1

☐ June 1992, Vol.10, No.2

ISSN 0913-3747

CICSJ Bulletin

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

情報化学のフロンティア　特集号

日本化学会
情報化学部会
Volume 10, Number 6
November 1992

目　　次

特集にあたって

日本化学会第６４秋季年会が１０月２日から４日間、新潟大学五十嵐キャンパスで開催された。期間中、盛り沢山に用意されたシンポジウムの一つとして情報化学の分野でも細矢先生（お茶の水女子大学）、平野先生（同）を中心に「情報化学・計算化学のフロンティア」が企画された。筆者の印象としては内容の充実度に較べて参加者が盛況とは言い難かったことが残念であった。

本誌ではシンポジウムのテーマが部会員にとっても関心の深いテーマであるところからシンポジウムと連動した形での特集を企画し、招待講演、依頼講演の先生方に講演と同じテーマで御寄稿いただきたい旨お願い申しあげたところ、多くの先生方から原稿を頂戴することが出来た。年会に参加出来なかった方をはじめ多くの部会員の方に興味深く読んでいただけるものと思う。

多忙な時間を割いて執筆下さった諸先生並びに細矢先生、平野先生に心からお礼申しあげます。

（編集幹事）

化学ＣＡＩの新しい動き

福井工業高等専門学校　　　吉村　忠与志

1）はじめに

コンピュータ社会である今日、化学教育でもコンピュータ・ソフトウェアの重要性が認識されてきている。月刊誌「化学と教育」においても1992年1月号から「情報コーナー」欄が新設され、毎号多くのソフトウェアが紹介されている。その目的は、化学および化学教育に関連する有用なソフトウェアの開発・配布情報を広く公開しその流通を促進することとなっている。

近年、性能の進歩が著しい機器を使った化学教育が行なわれ、なかでもコンピュータが教育機器として注目され、教育現場に導入されている。そのことが教育現場におけるソフトウェアの必要性を認識させ、それらの配布情報を求める声を大きくさせているようである。

日本化学会第64秋季年会が新潟大学キャンパスで開催され、筆者はそのニーズを受けて、表題で招待講演(1E503)を行なった。本報はその内容をまとめたものである。

2）化学ソフトウェアに関する学術活動

1。「化学とコンピュータ」の近未来予測

柏木浩氏のまとめ[1)]によると、化学とコンピュータに関わる近未来予測では、1995年から2027年までの驚くべき進歩の実現を提示している。その中で、化学教育に関連するものをピックアップすると、

1995年　情報処理実習が化学関連学部・学科で必須科目となる。

1997年　論文、特許などのコンピュータ支援翻訳システムが実用化される。
　　　　コンピュータの過度の使用で実験への理解が観念的になったことへの反省で本当に実験するというカリキュラムに戻る。

1999年　論文誌のオンライン投稿やオンライン出版が普及する。

などがあった。これによると、化学関連学部・学科で情報処理教育が定着するようであるが、化学情報学および化学情報工学といった科目が必須になることが望ましく、専任教師も必要であろう。

次に、心配である「コンピュータの過度の使用で実験への理解が観念的になる」予測は、不必要な分野にまでコンピュータを実験に用い、観念的に使用する教師がいることに問題があり、教師へのコンピュータ・リテラシー（情報活用能力の育成）と専任教師の指導のもとカリキュラムが遂行されていけばそのような心配などなくなるであろう。

今世紀末には、論文誌のオンライン投稿やオンライン出版が普及するそうであるが、日本化学会では欧文誌から全文をコンピュータ検索できる電子出版（全文データベース）の検討を進めている。それは、SGML[2)](Standard Generalized Markup Language)規格を採用して、1993年から電子出版する予定である。また、学会に投稿されてくる論文はほとんどワープロで作成されていることを踏まえて、フロッピーディスクによる電子投稿を検討しており、いよいよすべてに電子化の時代到来といえる。

2。化学とソフトウェアの現状

化学ソフトウェアにおいて、いろいろな学術団体が精力的に学術活動を行なっている。主な団体名を箇条書きすると、

(1)日本化学会　情報化学部会
(2)日本プログラム交換機構(JCPE)
(3)計算機と化学･生物学の会(CBI研究会)
(4)化学ソフトウェア学会

などが上げられる。(1)は本誌の発行機関であり、日本化学会の下で部会活動を推進して、*CICSJ Bulletin*という機関誌を発行している。(2)はQCPEとの国際交流をもつ日本の学術団体であり、分子科学

関連の化学ソフトウェアを精力的に開発・収集し、それらを配布して、*JCPE NEWSLETTER*という機関誌を発行している。それには毎号登録されたソフトウェアの概要がリストアップされている。(3)は化学と生物学の境界領域で計算機を利用している研究者の集まりで、*CBI NEWS*という機関誌を発行し、研究会や講演会を年間数多く開催している。(4)は筆者が10年前に始めた化学PC研究会を母体として学会を組織したもので、上記の3団体同様、化学ソフトウェアの開発・収集・配布に精力的に学術活動を推進して、会誌「化学とソフトウェア」の他、論文誌「*The Journal of Chemical Software*」を発行している他、学術的にオリジナルに開発されているものの概要を掲載した化学ソフトウェアの年鑑として「最新化学ソフトウェア集」を刊行している。また、アメリカ化学会の下のプロジェクトSERAPHIMとの国際交流も実施しており、そのソフトウェアの配布委託も行なっている。

この他、市販されているソフトウェアにおいても、大学・学校等での使用に対してAcademic Discountされるものも多く、安価で化学ソフトウェアが利用できる環境は少なからずあるようである。また、パソコン通信によるソフトウェア・サービスも盛んであり、例えば、PC-VANのOSL(Online Software Library)には有用なユーティリティー・ソフトウェアが数多く登録され、ダウン・ロードされて無償利用されている。化学ソフトウェア学会でSIG「化学とコンピュータ」で登録されてきたものを10点ほど集めて、会誌9月号でお楽しみディスクとして会員に配布した実績もある。

3）化学科だけのコンピュータ・ラボ

1。ＣＡＩとは何か

コンピュータ教育を考えるに、コンピュータについて考えるコンピュータ・リテラシーと、コンピュータの教育への利用とがあると思われる。後者について考えると、教育情報処理(CMI, Computer Managed Instruction)と、ＣＡＩ(Computer Aided Instruction)が位置づけられる。このＣＡＩには、CAL(Computer Assisted Learning)という言葉もあるが、情報機器の発展によるニュー・メディアの利用も含まれる。従来のＣＡＩは、(1)ドリル・演習型、(2)チュートリアル型、(3)問題解決型、(4)シミュレーション型、および(5)情報検索型に分類されている。一口にＣＡＩといっても多岐に渡るが、その作成においては、教材画面の作成、教材の組み立て（学習進行の指定、コースウェアの論理チェック）および教材ソフトの実行とフィードバックが重要である。

2。化学教育での実践例

化学におけるCAIの実践は、事前学習や一斉学習に用いられることが多い。いろいろな教育専門誌でその実践例が発表されている。「学校におけるコンピュータ活用事例集」[3)]を紐どくと、化学ではつぎの2件が事例掲載 されていた。

(1) 小泉真琴，コンピュータを利用した高等学校理科化学の実践

(2) 大竹隆夫，理科教育におけるコンピュータの活用

いずれも高校化学での実践例であるが、(1)では市販ソフト[4)]を利用して化学実験で実践したものであり、(2)では自作ソフト「陽イオン分析実験シミュレーション」を単元「金属イオンの検出と分離」でテキストに添って活用したという報告である。筆者においても、学生実験(物理化学実験)に事前学習用システムを自作して教育効果を上げている。このシステムは後述の無償利用ソフトウェアに登録して配布されているので、広く活用されたい。

3。実験室にコンピュータを導入

前節まで述べてきたことは、CAIにおいてそのほど新しいことではない。新しい動きといえば、各学校にコンピュータが導入され、コンピュータ室なる教室に20台から50台のコンピュータが設置され、それなりの利用が進んでいる[5)]。ところで、化学教育には、化学の実験実習が重要である。CAIによる実験教育(Chemical Dry Lab)だけでは観念的になりがちである。故に、CAIは実験の動機づけ、学習目標と問題の把握、先行学習の呼び起こし等に活用すべきであり、あくまで本実験を補助するものとして位置づけるべきである。

平成5年度から文部省指導要領の改定で、実験室にもコンピュータを導入することになっている[5)]。コン

ピュータ室には化学実験の装置を持ち込むことなど考える余地もないが、実験室に数台のコンピュータを持ち込み、機器と接続して実験道具として使用することは重要である。科学的な探究の方法を身につけるためのコンピュータの活用は、理科教育において検索型、通信型、実験データ処理型、実験計測型などのソフトウェアや周辺機器を駆使することである[5]。即ち、実験室に基礎を置くコンピュータの活用が学校教育の中でどのように実現されていくかである。

筆者が1991年に文部省在外研究でウィスコンシン大学マディソン校(Prof. John W. Moore)とテキサス大学オースチン校(Prof. J. J. Lagowski)に留学して、化学科だけのコンピュータ・ラボを見学することができた。ウィスコンシン大学のコンピュータ・ラボには、ＣＤ（ビデオデスク）を装備したＩＢＭマシンが約50台設置され、その実験室の入口には、利用者のチェックのためのカウンターがあり、管理人が常時いて学生がいつでも利用できるようにすべてのコンピュータが稼働していた。学生には、コンピュータ・ラボでの実験・実習がカリキュラムの中に義務づけられているようで、単位獲得のためか学生は極めて熱心にコンピュータで実習を受けていた。ＣＤから提供される映像は化学実験の実写の様子を画像表示してくれ、リアリティが溢れ、教育的効果のあるものであった。

ところで、調査不足かもしれないが、日本で学科単位でコンピュータ・ラボを所有しているのは、情報・システム系のところ以外は、まだ独自のコンピュータ・ラボを必要と考えているところはまだないようで、化学科だけのコンピュータ・ラボは存在しないと思う。Prof. MooreとProf. Lagowskiの熱意ある説明を受け、コンピュータ・ラボによる教育実践には感心するばかりであり、日本における啓蒙の必要性を痛感した。日本では、文部省の指導[5]で、実験室にコンピュータを導入することができるようになったばかりである。これから準備されるところであり、理科実験室にコンピュータが設置され、実験装置と有機的に接続され、学生・生徒が主体的に実験を探求するツールとして定着する頃には、日本にも化学科だけのというか、学科独自のコンピュータ・ラボが各大学・学校に設備されているであろう。筆者においても、このようなコンピュータ・ラボなる実験室を高専化学科内に作成すべく準備を進めている。

4）国際交流（プロジェクトSERAPHIM）

1。ソフトウェアの交換と配布

プロジェクトSERAPHIMは、化学ＰＣ研究会発足と同じ年の1982年にProf. Mooreが化学教育におけるコンピュータのソフトウェアと教材を研究・開発および収集・配布するための情報センター(Clearing-house)を設立した学術団体であり、NSF科学教育基金に支えられているアメリカ化学会の下部組織である。このプロジェクトの本部は、ウィスコンシン大学にあり、マディソン校を拠点としてアメリカ各地に支部を有し、さらに全世界にも各国の支部がある。この度、化学ソフトウェア学会がSERAPHIMが管理している化学教育に関するソフトウェアの配布委託を受け、日本支部としての役割も受け持つこととなった。

後述するように、化学ソフトウェア学会でも無償利用ソフトウェアを会員対象に配布しているが、同様にSERAPHIMのソフトウェアも無償利用ソフトウェアとしてリストで公開し配布している。

2。共同研究と情報交換

ソフトウェアがグローバルに開発され普及している現在、海外との情報交換を伴う共同研究の必要性を痛感している。筆者は、IUPACの化学教育委員会が主幹するICCE(International Conference on Chemical Education)にはほぼ毎回参加しているものの、化学ソフトウェアの開発に従事する研究者の国際交流および共同研究をもっと推進すべきであると考えている。SERAPHIMとの共同研究討論会を開催すべく準備進めている。

5）無償利用ソフトウェア

1。化学ソフトウェア年鑑「最新化学ソフトウェア集」

学会の事業の一つとして、化学ソフトウェアに関する情報収集を積極的に行なっている。化学ソフトウェアの健全な発展と普及を願い、さらに、その環境向上を目的に1985年からパソコン中心にソフトウェア

の実態調査を毎年実施している。具体的には、有料、無料を問わず、公開、非公開を問わず、化学に関したプログラムをオリジナルに開発・作成している方を対象に調査し、そのソフトウェアを公表（カタログ化）して、この分野のソフトウェア情報の流通と活性化を図っている。

その成果として、ソフトウェア年鑑「最新化学ＰＣ用ソフトウェア集」[6]を発行してきた。学会への改組と共に、ＰＣの枠を外して、「最新化学ソフトウェア集」なる年鑑を編集中である。これには、学会が取り扱うもの以外に、JCPEのプログラム・リスト も掲載し、化学ソフトウェアに関するすべてのカタログ情報を提供するものとして位置づけている。

2。登録されたソフトウェアのリスト

いろいろな発表の場で公表されたソフトウェアに関してまとめられた年鑑とは別に、無償利用ソフトウェアとして登録されたものは随時学会会誌（季刊）で最新情報をリストアップしている。SERAPHIMでも新しいソフトウェアが登録されると、機関誌「Project *SERAPHIM* News」に掲載される。化学ソフトウェア学会(CSSJ)、SERAPHIM、およびJCPEで収録されたものについて、SERAPHIMの分類項目に従いまとめると、Table 1のようになる。

Table 1　A Classified List of Chemical Softwares

Groups	CSSJ[6]	SERAPHIM[7]	JCPE[8]
Special Program/Teaching Support	10	37	-
General Chemistry/Tutorials & Games	-	21	-
Methods of Chemistry	4	169	-
Atom Structure/Periodicity	1	45	-
Bonding/Formular/Stoichiometry	4	67	-
Gasses/Liquids/Solids/Molecular Structure	2	38	-
Solutions Processes/Acid-Base	3	39	-
Chemical Reaction/Equilibrium-Kinetic-Redox/Electrochemistry	1	44	-
Organic/Ploymer Chemistry	3	64	-
Environmental/Industrial Chemistry	2	22	-
Analytical/Qual/Spectroscopy	6	53	2
Nuclear Chemistry	-	4	-
Thermodynamics/Statistical Mechanics	-	11	3
Transition Metal Complexes	-	2	-
Lavoratory Modules/Interfacing	9	8	-
Instrument Simulators	15	6	1
Mainframe Translations/Molecular Science	22	12	58
Programmer's Tools	4	37	4
Total	86	679	68

SERAPHIMの項目分類なので、JCPEのソフトウェアについては適切な分類ではないが、化学教育用ソフトウェアと言うことでご参照ください。SERAPHIMソフトウェアについては、化学の方法論、結合/化学式/化学量論、有機化学/高分子化学が上位を占めている。その中身を見ると、機種的に旧いアップルIIのプログラムが多く、この分野における歴史と継承の偉大さを感じる。

3。ソフトウェアの無償頒布

収録された化学ソフトウェアのうち、作者から無償利用の承諾・登録があったものについて、1988年から無償頒布を実施している。化学ソフトウェア学会では、巷で普及しているPDS(Public Domain Software)と区別するために「無償利用ソフトウェア」を次のように定義して無償頒布を実施している。

無償利用ソフトウェアは、プログラム作成者(著者)が営利目的でなく、一般公開による無償利用を認めた作品をいい、その著作権および知的所有権は著者が所有する。

無償利用であっても、著作権の保護のもとソフトウェアの取り扱いには慎重に対応している。無償頒布は会員対象に実施している。会員から希望するソフトウェアの注文があり、手数料の入金が確認されると、マニュアル付きフロッピーディスクと、ユーザーカードおよび評価シートを郵送している。そして、数ケ月後に、評価シートの提出を求め、ユーザーから返送された評価シートを作者に送る。それをバージョンアップの資料として活用してもらい、ユーザーからの不備を指摘された部分については改訂していただき、収録されたソフトウェアのバージョンアップに努めている。

6) おわりに

学校教育において便利な教育機器が開発され、文部省の指導のもと教育現場にそれらが導入されてきた。コンピュータもその一つであり、化学教育はもとよりあらゆる分野でCAIの活用は発展するものと思われる。従来の教授方法である板書と併行してCAIも教育現場で定着していくものと考えられるが、化学という専門分野に限っていえば、すべてがCAI教授方法になると、教育が観念的になり、前述の心配予測が始まる。いま始まったばかりのCAIの動きに水を差すようではあるが、化学は実験科学に基づく学問であるため、CAIによる化学実験をいくらやっても実験は上手にはならない。素手で五感を体験しながら化学実験を学習するものである。故に、化学CAIの新しい動きとして、化学の教師による自発的なCAI活用を提唱したい。

最後に、CAIの重要性と危険性を指導していただいた豊橋技術科学大学学長佐々木慎一先生と、化学ソフトウェア学会の誕生にご尽力いただいた埼玉大学理学部教授下沢隆先生に心から深謝申し上げる。

引用文献

1) 柏木浩，実験化学講座3－基本操作III－コンピュータ利用，丸善，19(1991); 日本化学会情報化学部会機関誌編集委員会，*CICSJ Bulletin*, 8(1), 46(1990).
2) M. Bryan，山崎俊一監訳，SGML入門，アスキー，378(1991).
3) 鈴木勲，東 洋 監修，学校におけるコンピュータ活用事例集，第一法規 (1992).
4) 下沢隆監修，科学教育シリーズー 化学コース(水素)，メディア(1989).
5) 山極隆，化学教育の発展を目指して，*化学とソフトウェア*，**14**(2),133(1992).
6) 吉村忠与志編，最新化学ＰＣ用ソフトウェア集'91，化学ＰＣ研究会(1991).
7) 日本化学プログラム交換機構，*JCPE Newsletter*, 4(2),(1992).
8) Project SERAPHIM, *SERAPHIM* Catalog(1991).

ケモメトリックス・計測の自動化の進歩

長岡技術科学大学
山　田　明　文

コンピュータ技術の日進月歩振りには眼を見張るものがあり、データ処理、ラボラトリーのオートメーション化にも影響を与えている。　社会、人文科学の分野では、早くから、データ処理に統計学的な種々の手法をとり入れていたが、化学、分析化学の分野でもこの手法に注目し、コンピュータに支えられた化学情報を取得する方法論が生れてきた。

1．計測、解析における質の管理

計測および解析における質の管理という問題は、昔から科学者の頭の中を離れなかった。　今のところ、どこでも使えるような質の普遍的な基準というものはないが、良く使われてきた唯一のパラメータは、正確さ(accuracy)と精度(precision)であった。　古く1908年には W. S. Gosset が平均値の誤差に関する論文を発表している。　彼の導入したパラメータは "Student の　t" として知られている。

1931年には W. A. Shewhart が質の管理のための管理図を作り、1940年代になると、化学の分野にも統計的な手法が応用されるようになった。　1963年には、P. M. E. M. van der Grinten が測定の質の定量的な評価を可能にし、1970年には A. F. Findeis　らによる、”分析化学は消え行く学問か？”("Analytical Chemistry--A Fading Discipline ?")という質の議論が Analytical Chemistry　誌上をにぎわした。

1970年中頃になると、パターン認識、統計学、オペレーションズリサーチの手法が化学の分野に持ち込まれるようになった。　また、計測の自動化も興味あるテーマとなり、電気化学の分野で多くの論文が発表された。　これらの努力は、いずれも計測および解析における質の向上を目指しており、これがケモトリックスという分野を生み出したといえよう。

2．ケモメトリックスの誕生

ケモメトリックスの誕生日は正確にわからないが、1971年に S.Wold が"Chemometrics"という語を造って以来、新しい技術として発展しつつある[1]。1974年には、International Chemometrics Societyが設立され、"Chemometrics" という名前の成書[2]もでている。 新しい国際誌として「Chemometrics and Intelligent Laboratory System(1986)」、「The Journal of Chemometrics (1987)」などの専門誌も発刊されている。 ケモメトリックスの内容については前記 SocietyからIUPAC に次のような定義が出されている[3]：

"Chemometrics is the chemical discipline that uses mathematical and statistical methods (a) to design or select optimal measurement procedures and experiments and (b) to provide maximum chemical information by analysing chemical data. In the field of analytical chemistry, chemometrics is the chemical discipline that uses mathematical and statistical methods to obtain in an optimal way relevant information about material systems".

このようにケモメトリックスは、主に、数学および統計学の成果を、化学の領域に応用し、従来の測定方法や測定機器を改良し、また、そのデータの質を高めることを目的としている。 したがって、ケモメトリックスの進歩は、測定過程においての設計、管理、評価、検証などに対してますます重要になってきている。

分析化学者に必要とされるケモメトリックスは身近な問題で、その内容は、統計、設計と最適化、信号処理およびパターン認識が多いようである。精度、バイアス、キャリブレーション、検出限界、確認、干渉、標準物質などは統計に関係している。

3．ＣＡＳに見る研究動向

ケモメトリックスのカバーする範囲は広く、キーワードとして、統計学、最適化、信号処理、因子分析、デコンボリュージョン、（自己モデル化曲線分解技術、帯域あてはめ、Kalmanフィルター技術）、検量モデル化およびパラメータ推定、構造－特性相関、パターン認識、ライブラリ検索、人工知能などがあげられる。 1976年 1月から1979年10月まで、1988年 1月から1989年11月までおよび1989年12月から1991年11月までに発表されたケモメトリックスに関する論文数の増加状況を表１に示す[4]。 キャリブレーション、スペクトル解析、回帰、統計学などのキーワードに代表される論文が多く、特に、フーリエ変換、信号処理、エキスパートシステム、ニューラルネットワーク関連の研究の増加が著しい。

Table I. Number of CAS Entries Detected in Search

key word	period 1/76–10/79	1/88–11/89	12/89–11/91
calibration	2312	941	1114
chemometrics	8	68	69
sampling theory	2	1	2
multivariate analysis	52	59	69
parameter estimation	68	46	69
time series analysis	20	4	60
spectral analysis	1102	225	198
optimal control	119	39	0
systems analysis	80	22	85
evolutionary operation	1	2	0
operations research	6	0	1
regression	912	379	414
mathematical analysis	116	26	19
statistics	2072	2872	1433
pattern recognition	232	46	148
data reduction	70	27	12
experimental design	266	56	68
curve fitting	120	42	46
spectral resolution	27	14	22
deconvolution	133	142	143
factor analysis	175	84	125
principal components	46	94	160
feature selection	8	2	2
Fourier transform	34	1359	1588
information theory	227	35	74
signal processing	44	76	62
peak fitting	6	3	5
digital filtering	4	11	9
least squares	315	143	176
nonlinear regression	30	24	23
nonparametric statistics	1	10	2
simplex	27	984	1078
nonlinear calibration	7	3	10
multiple regression	61	16	14
multivariate calibration		21	39
multivariate prediction		1	1
artificial intelligence		83	59
partial least squares		29	45
image analysis		3	191
expert systems		119	338
neural networks		2	117

4. 応用例と参考文献

科学者の見解によれば、自然科学は、あるクラスの物、対象、現象についての知識の体系化を意味する。このように考えると、ケモメトリックスの貢献できる領域は広い。データ処理への情報理論の適用[5]、パターン認識の利用[6]、実験および最適条件の設定、化学分析の質の管理等幅広い内容を含んでおり、その応用例もさまざまである[7]。以下に主要な参考文献（レビュー）をあげる[4),8)-15)]。

1) G. Kateman, Analyst, 115, 487 (1990).
2) M. A. Sharaf, D. L. Illman, B. R. Kowalski, "Chemometrics", John Willey (1986).
3) B. R. Kowalski, Chem. Ind. (London), 22, 882 (1978).
4) S. D. Brown, R. S. Bear, Jr., T. B. Blank, Anal. Chem., 64, 22R (1992).
5) K. Eckschlager, V. Stepanek, K. Danzer, J. Chemometr. 4, 195 (1990).
6) R. R. Meglen, Chemometr. Intell. Lab. Syst., 3, 17 (1988).
7) R. G. Brereton, Analyst, 112, 1635 (1987).
8) L. A. Currie, J. J. Filliben, J. R. DeVoe, Anal. Chem., 44, 497R (1972).
9) P. S. Shoenfeld, J. R. DeVoe, Anal. Chem., 48, 403R (1976).
10) B. R. Kowalski, Anal. Chem., 52, 112R (1980).
11) I. E. Frank, B. R. Kowalski, 54, 232R (1982).
12) M. F. Delaney, Anal. Chem., 56, 261R (1984).
13) L. S. Ramos, K. R. Beebe, W. P. Carey, E. Sanchez M., B. C. Erickson, B. E. Wilson, L. E. Wangen, B. R. Kowalski, Anal. Chem., 58, 294R (1986).
14) S. D. Brown, T. Q. Barker, R. J. Larivee, S. L. Monfre, H. R. Wilk, Anal. Chem., 60, 252R (1988).
15) S. D. Brown, Anal. Chem., 62, 84R (1990).

情報のセキュリティ

名和小太郎
（新潟大・法）

1　情報の物理的性格

情報は、それ自体、物理的には公共財的な性格をもっている。ちなみに公共財とは、つぎのような条件をもつものを指す。

(1)　ユーザーを１人増加させるために社会全体として必要な限界費用がゼロ、したがって、その財をだれが利用しても他人の利用を妨げない

(2)　財の生産者が利用者を特定人に限定できない、つまり、その財を利用者に割り当てる方法をもつことができない

情報は、コピーをほぼ限界費用ゼロでできる。また、コピーによって増殖するので、モノのように個人によって占有できない。つまり、上の２条件を充たす。しかし、オリジナルな情報についてみれば、それに経済的価値のあるものがあり、しかもその生産にコストのかかるものもある。したがって、その生産者は、その私有化を望む。とくにコンピュータ化情報については、この要求が高い。

したがって、情報の私有化については、制度的にそれを保証しなければならない。このためには、①情報への不正行為を禁止する、②情報の私有化を保証する、の２点が必要となる。

前者は刑法（コンピュータ・セキュリティの確保）によって、後者は知的所有権法（著作権の確立）によって、それぞれ実現される。以下、これをコンピュータ情報に限定して紹介する。

ただし、現行の法律は、すべての分野にわたり「モノ主体」に組み立てられている。したがって、情報を対象にする場合には、さまざまな不具合が残っている。

なお本論は、問題を技術的な用語を使い、第１近似的な表現で記述をおこなう。したがって、法律的に正確な用語／論理を用いての説明ではない。

2　情報のセキュリティ

2．1　コンピュータ犯罪の種類

コンピュータ・セキュリティとは、「ハードウェア／ソフトウェア／データの、故意／過失による、変更／破壊／漏洩からの保護」と定義することができる。本論では、コンピュータ情報を対象にして、セキュリティの意味を制度的な側面から考察する。

情報のセキュリティについては、法制度的には刑法が支えている。日本の刑法は、1987年に改正され、コンピュータ犯罪に対する条項が付加された。

ここで新しく規定された犯罪は、(1)データに対するもの、(2)コンピュータを利用するものとに分類している。前者は、①電磁的公正証書原本不実記録・不実記録電磁的公正証書原本供用罪、②電磁的記録不正作出・同供用罪、③電磁的記録毀棄罪であり、後者は、④電子計算機等業務妨害罪、⑤電子計算機使用詐欺罪である。

2．2　データへの犯罪

(1) 電磁的記録の定義

この法律は電磁的記録を「①人の知覚をもって認識できない方式、②電子計算機による情報処理の用に供するもの」の2条件を充たすものと定義している。

ただし、法律をよくみると、すべての電磁的記録が対象になるのではなく、犯罪の対象とされるのは、①公的文書（ただしくは公正証書原本―例、特許原簿）で権利または義務に関するもの、②私的文書で権利または義務に関するもの、に限られている。したがって、研究者／技術者の扱う観測データ／実験データなどは対象にならない。

なお、電子計算機については定義がないが、情報処理用のものは対象になるが、装置組みこみのマイクロコンピュータは対象から外れる、という解釈である。

(2) 犯罪の定義

犯罪とされるものは、上記条件をみたす電磁的記録に対する、①不実記載とその利用（公的文書）、②不正作成とその利用（私的文書）、③廃棄（公的文書または私的文書）、である。

2．3　コンピュータによる犯罪

(1) 電子計算機による業務等妨害

ここでは、コンピュータのサービスを中断させてその業務を妨害する場合が対象となり、したがって、ハッカーによる単なる不正アクセス、不正入力、不正コピーなどは対象外となる。もちろん、ハッカーがコンピュータのサービスを中断したり、データベースを破壊したりしたばあいには、対象になる。

プログラムのバグについては、過失のばあいには対象外となる。

(2) 電子計算機による詐欺

ここでは、財産権に入出／変更があったばあいのみが対象になる。したがって、無権限者（パス・ワードをもたないもの）によるコンピュータ資源の単なる不正使用（例、データベースへの不正検索）は対象外となる。

3　情報の権利

3．1　著作権制度の意味

情報を私有財として保護するために著作権制度がある。

情報はコピーされやすいものである。いったん不法にコピーされてしまえば、その情報を回収することは不可能になる。（モノのばあいには回収によって原状を回復できる。）したがって、情報を取引するばあい、直接の相手を拘束することは契約でなしうるが、契約関係のない第三者に対しては、事前にコピーを防止する手段がない。（可能なのは事後に、それを不法行為として損害賠償請求することである。）だが著作権制度は、このような第三者に対しても、不法コピーを事前に差止め請求できる仕組みである。

3．2　著作物の定義

著作権は、著作物に対して存在する。著作物とは、「思想・感情の創作的な表現で、

文芸・学術・美術・音楽の範囲に属するものをいう」と定義される。この定義をパラフレーズすると、つぎのようになる。

①「思想・感情」⇨データは不可。

②「創作的」⇨特許のばあいには「創作のうち高度（＝新規性／進歩性）のもの」という条件があるが、ここには「高度」という条件はない。

③「表現」⇨「アイデア」「規約」「アルゴリズム」は不可。

④「文芸・学術・美術・音楽の範囲」⇨産業上の応用は不可。

ただし、現実には、③、④の条件は曖昧になりつつある。

3．3　著作権の種類

著作権は、①著作者人格権と②著作権（狭義）とからなる。①は著作者と分離できない権利であり、したがって取引の対象になる権利は②のみである。

①には、ｉ公表権、ⅱ氏名表示権、ⅲ同一性保持権がある。厳密にⅲの原則を適用すると、プログラム、データベースの扱いについて問題が生じるが、この点については、現実の扱いに即した特例（または解釈）がある。

②については、

ｉ	原著作物に加工という付加価値をつける著作権			⇨二次著作権
ⅱ	〃	編集	〃	⇨編集著作権／データベースの著作権
ⅲ	〃	応用	〃	⇨著作隣接権

が存在する。

ⅱについて、技術的には「編集」は「データベース」の上位概念であるが、現行制度上は、編集著作権とデータベース著作権とは同一レベルの、たがいに排他的な権利とされている。またⅲについては、有線送信権というものがあり、その部分集合として有線放送権が存在する。

3．4　不法コピーの意味

(1)　コピーの種類

著作権の侵害には、２つのカテゴリーがある。①物理的コピーと②論理的コピー、である。

①は、物理的にまったく同一のコピーであり、複写装置、録音装置、録画装置などによるデッド・コピーを指す。②は、論理的に同等のコピーであり、翻案（シナリオ化、編曲、翻訳など）を指す。これはプログラムなどにおいて、とくに問題となりうる。

(2)　著作権の侵害

著作権の侵害は、つぎのような条件があって確認される。

①　侵害者の著作物が原著作権の著作物と、表現上同等である。表現上の同等性は、論理的コピーの場合、判定が困難である。

②　侵害者が原著作者の著作物にアクセスした証拠がある。

3．4　データベースの著作権

(1)　定義

データベースは「情報の選択／体系的な構成によって創作性をもつならば」著作権をもつ。したがって、著作権のないデータベースもありうる。

データベースの著作権は、データの著作権とは独立した権利である。したがって、データベースのユーザーは、データの著作権（テキスト・データ／画像データであれば著作権がある）とデータベースの著作権について、利用の契約をしなければならない。

(2)　ディストリビュータの権利

データベース・ディストリビュータの権利を保護するものは有線送信権と想定されているが、現実には、ディストリビュタの権利は、二次著作権によって保護されることとなっている。

(3)　ダウンローディング

現在、データベースの著作権において問題となっているものは、ダウン・ローディングによるデータベースのコピーである。この許容は事業者の利益を侵害するが、その禁止はユーザーをひじょうに不自然な利用環境のなかにおくこととなる。

(4)　著作権のないデータベースの扱い

米国においては、著作権の世界に、権利保護というよりも、不正競争防止という発想が強く、創作性のないデータベースであっても、その開発にコストをかけたという理由で、そのデータベースに著作権ありという下級裁判所の判例が多く出現した。これを「額の汗理論」という。ただし、この理論は、1991年の最高裁の判決（ファイスト対ルーラル事件）によって否定された。

ＥＣは1992年、「データベースの法的保護に対する指令（案）」を発表した。ここでは、著作権のないデータベースに対して、データ不正抽出利用防止権を創設しようという提案が含まれている。

日本では、同様の考え方（デッド・コピーの禁止）を、不正競争防止法にとりこもうという案が現在、検討されている。不正競争防止法は競業者のみ（ユーザーにはおよばない）を規制するのである。

(5)　現行制度を越える問題

現行制度を越える問題として、データベースの著作権については、つぎのようなテーマがある。

①　ＣＤ－ＲＯＭの扱い（出版業者と印刷業者間の権利の配分について）

②　マルチメディアの扱い（既存データの再利用について）

③　自動生成されたデータベースの扱い（コンピュータ著作物として）

いずれも、さまざまな機関で検討されている。

生体関連物質に関する情報化学の諸問題

—タンパク質・核酸研究とニューラルネットワーク—

（図書館情報大学）中山伸一

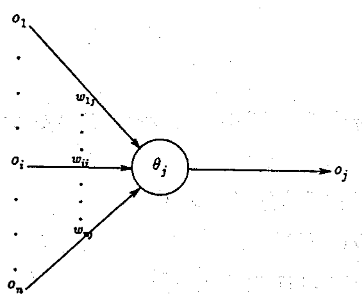
情報科学において注目されている方法論の一つに、ニューラルネットワークがあります。この方法は人間の脳の神経回路をモデル化したもので、パタン認識や最適化問題などの複雑な問題の一つの解法として利用できます。

タンパク質や核酸の構造情報をもとにした情報化学的研究には、タンパク質工学、分子進化などがあり、それらを支援する方法として配列マッチングや配列検索、分類、機能部位の予測、さらに高次構造予測や構造比較などがあります。

ここでは、まずニューラルネットワークについて簡単に説明し、その後タンパク質や核酸の研究におけるニューラルネットワークの応用について述べましょう。

1　ニューラルネットワークとは

ニューラルネットワークは、神経細胞（ニューロン）をモデル化したユニットにより構成されます。一つのユニットは、他のユニットの状態（出力値）とそのユニットとの結合強度（重み）の積を入力値として取り込み、それらの総和にしきい値を加えた値をもとに自分自身の状態（出力値）を決定します。



$$o_j = f(\sum_{i=0}^{n} o_i w_{ij} + \theta_j)$$

図１　ニューロンモデル

そのようなユニットが複数組み合わされてできるニューラルネットワークは、大きく階層型モデルと相互結合型モデルに分けられます。

階層型モデルは、外部からの刺激を受け取る入力層とその処理結果を出力する出力層、さらにその間に入るいくつかの中間層からなり、それぞれの層は一個以上のユニットで構成されます。ユニット間の結合は入力層側から出力層側に向かって層間でのみ行われ、逆方向の結合や層内の結合はありません。したがって信号は、入力層のユニットから出力層側のユニットに向かって一方向にのみ伝えられます。

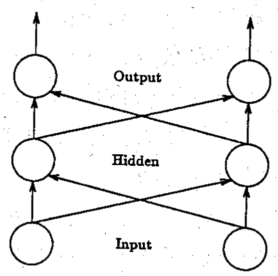


図２　階層型モデル

ある入力パタンに対する出力パタンのペア（パタン認識の対象）があると、ニューラルネットワークはユニット間の結合強度を変えることによりそれを憶えます。結合強度は、入力パタンに対する出力層の出力状態と出力パタン（希望する出力）の差異と、入力側の層の各ユニットの出力状態をもとに変えます。[1)]

幾つものパタンを繰り返し学習すると、それらのパタンを記憶でき、パタン認識が行えます。さらに、多くのパタンを記憶したネットワークは、未知のパタンを入力すると対応するパタンを予測できると考えられます。

一方、相互結合型モデルでは、全てのユニットが同一階層にあり、それぞれのユニット間は両方向に結合されます。

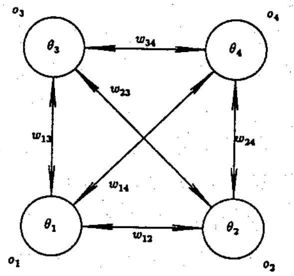


図3　相互結合型モデル

このようなネットワークは、適当なユニットの初期状態（出力値）を与えておき、ランダムに一つのユニットを取り出しては結合する他の全てのユニットの出力値をもとに自身の出力値を変えてゆくという操作を繰り返すと、ユニット間の結合の重みとそれぞれのユニットのしきい値からなる以下のような式の極小解に状態が収束するという性質を持ちます。

$$E = -\frac{1}{2}\sum_i \sum_j w_{ij} o_i o_j - \sum_j \theta_j o_j$$

この原理を使うと、ある系の安定なエネルギー状態の一つを高速にさがし出すことができます。[2]

2　機能部位の予測

ニューラルネットワークがタンパク質や核酸の研究に応用されている例の一つに、機能部位の予測があります。そこでは階層型モデルが使われています。すなわち、配列パタンを入力するとそれが活性部位であるかどうかを出力するようにあらかじめネットワークを学習しておき、別の配列を入力としたときの出力の状態からそのような機能を持つかどうかを予測しようというものです。

具体的には、入力層にヌクレオチドやアミノ酸の配列を表現するユニットを、出力層には機能を表現するユニットをそれぞれ配置します。一つのヌクレオチドやアミノ酸を表現するには全てのもののユニットを用意しておき、表現したいものに対応するユニットだけが１、他は０を出力するようにします。複数のヌクレオチドやアミノ酸からなる配列を表現するにはこのようなユニットの組を配列の長さ分だけ用意します。

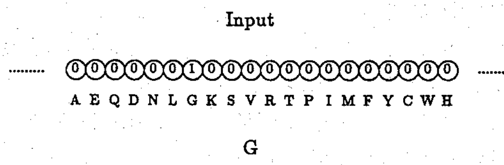


図4　アミノ酸の表現法

一方、機能を表現するユニットは１になればその機能を持つ、０であればその機能を持たないというようにしておきます。

表１　機能予測の論文[3-8]

Object	Sites of prediction	Accuracy of prediction
DNA	mRNA splice site	(79%)
DNA	DNA-binding site	80%
DNA	E. coli RNA polymerase promoter	98.4%
Protein	Immunoglobulin domains	{98.2%}
Protein	Signal pepties from cytosolic proteins	80%
Protein	ATP-binding motif	78%

この方法は、配列パタンの特徴を自動的に抽出できる点ですぐれていますが、統計的手法を使ったものと余り差が認められないという報告もあります。

しかし、予測精度は８０％以上と高く、データベースに適用すれば特定機能を持つ部位を検索することができますし、また学習過程で学習できないデータは機能部分の同定自体が間違っている可能性を示唆するとしてデータベースのチェックにも利用できたという報告もあり、その利用範囲は広いと考えられます。

3　高次構造予測

ニューラルネットワークのタンパク質・核酸研究に対するもう一つの大きな応用領域として、高次構造予測があります。ここでもやはり階層型モデルが多く使われていますが、一部で相互結合型モデルの検討も行われています。

3．1　階層型モデルによる予測

階層型モデルで高次構造予測を行うには、入力に前述のようにして配列を、出力に構造を割り当て、構造既知のものの配列ー構造パタンをネットワークに学習させます。これまでのところタンパク質を対象にしてしか検討されていませんが、構造に何を用いるかにより二次構造予測や内外予測、二面角構造予測、ＳＳ結合生成予測、アミノ酸間距離予測など、その研究は多岐に渡っています。また、アミノ酸をその種類でなく物理特性で表現するという方法もあります。

表２　階層型モデルによる高次構造予測の論文[9-18]

Stuructures of prediction	Accuracy of prediction
α Helix / β Sheet / Coil	64.3%
α Helix / β Sheet / Coil	63 %
α Helix / β Sheet / Coil	64%
α Helix / Not helix	73%
Type I tern / Type II tern / Non-spec turn / Non tern	26%
Buried / Exposed	72%
α / α* / ε / ε* Structure	57%
S-S / S-H	80%
Binary Distance	
Distance Matrix	

予測する構造の種類にもよりますが、予測精度は統計的な方法に比べていく分良くなります。しかし、まだそれほど高い精度とはいえません。その原因には、現在の配列の入力方法が考えられます。すなわち配列情報は予測対象の近傍しか取り入れることができず、長距離相互作用を無視してしまっているということです。

3．2　相互結合型モデルによる予測

相互結合型モデルを使った高次構造予測には、核酸の二次構造予測やタンパク質のアミノ酸間距離の予測があります。

前者では全てのスタック領域の候補の数だけユニットを用意し、①候補の安定度と、②候補間の矛盾をエネルギー式として表現し、それをもとにユニット間の結合の重みとユニットのしきい値を与えます。そうしてできたネットワークをランダムな初期状態から動かすと、スタック領域として予測されるユニットが大きな出力値を出すようになります。[19]

後者では、全てのアミノ酸間の近さを表現するユニットを用意します。ユニット間の結合の重みとしきい値は、①対となるアミノ酸間が近い場合のエネルギー安定性、②一つのアミノ酸から近い位置に存在できるアミノ酸の数、③隣合うアミノ酸が近い位置にいる場合はその近傍のアミノ酸同士も近い位置になる、などをもとにしたエネルギー式から決めます。そうしてできたネットワークを動かしますと、一部で実際のタンパク質に類似した距離行列が得られます。この方法は、まだエネルギーが近似的であるため完全に一致した距離行列を得ることができていませんが、幾つもの初期状態から出発してもほぼ同様の結果が得られることから、収束性は良いようです。

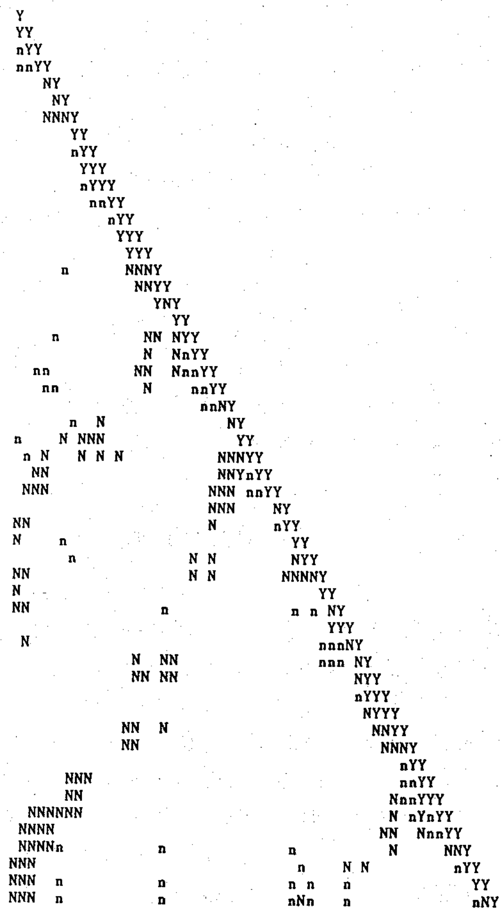


図５　距離行列（Y:近接予測成功,N:近接予測失敗,n:過剰予測）

相互結合型モデルを用いる方法は、系のエ

ネルギーを表現する式と、その際のパラメータが決まれば高速な問題の解法として有用であると考えられます。

4 類似度測定

階層型モデルを使ったタンパク質高次構造予測の問題点として、長距離相互作用が取り込まれないということがありました。しかし、これを逆に利用すれば、タンパク質間の長距離相互作用の類似性を含む類似度を測定できます。

すなわち、まず個々のタンパク質の配列―構造パタンを個別のニューラルネットワークに学習させます。そして、それらのネットワークを使って、他のタンパク質の配列―構造パタンの予測を行います。

長距離相互作用が類似しているタンパク質はその差異が無いため、より高い予測精度が得られ、したがってその精度は長距離相互作用の類似性を含むタンパク質間の類似度を表すと考えられます。

実際にヒト由来のいくつかのタンパク質に対してアミノ酸配列―二面角構造パタンを使って、上記の方法で類似度を求めますと、いわゆるαタンパク質とβタンパク質はそれぞれ他の構造のタンパク質より、より高い類似度を示します。

	5api	1ig2	1fb4	3fab	1fc1	2pab	2cab	2cac	2grs	2hhb	1hbs	1lz1	3gpd
5api	99	56	55	51	56	50	52	50	51	48	47	45	46
1ig2	56	97	91	72	71	59	55	56	52	37	38	41	49
1fb4	55	91	97	73	71	59	55	56	52	36	37	42	49
3fab	51	72	73	99	64	55	50	56	48	35	36	40	45
1fc1	56	71	71	64	98	61	60	52	50	39	39	43	46
2pab	50	59	59	55	61	99	58	52	48	40	41	40	45
2cab	52	55	55	50	60	58	99	62	51	47	47	49	47
2cac	50	56	56	56	52	52	62	99	46	43	44	42	45
2grs	51	52	52	48	50	48	51	46	99	55	54	51	49
2hhb	48	37	36	35	39	40	47	43	55	100	97	70	49
1hbs	47	38	37	36	39	41	47	44	54	97	98	69	50
1lz1	45	41	42	40	43	40	49	42	51	70	69	100	47
3gpd	46	49	49	45	46	45	47	45	49	49	50	47	97

5api	Modified alpha-antitrypsin	α/β
1ig2	Immunoglobulin G1	all β
1fb4	Immunoglobulin Fab	
3fab	Lambda immunoglobulin Fab	
1fc1	Immunoglobulin(Fc fragment)	
2pab	Prealbumin	all β
2cab	Carbonic anhydrase form B	
2cac	Carbonic anhydrase form C	
2grs	Glutathione reductase	
2hhb	Hemoglobin(deoxy)	all α
1hbs	Hemoglobin S(deoxy)	all α
1lz1	Lysozyme	all α
3gpd	D-Glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase	α/β

図6 類似度行列

5 おわりに

階層型ネットワークを使ったタンパク質・核酸研究は、かなり検討され、それなりの成果をあげています。

しかし、階層型ネットワークを使った予測はあくまでも経験的な方法論であり、なぜそう予測されるのかという点が明らかでありません。ネットワークの解析をどのようにするかが、今後の課題です。

一方、相互結合型ネットワークを使った予測は、まだ検討が始められたばかりです。今後の進展が期待されます。

文献

1) Rumelhart,D.E. & McClelland,J.L. Parallel distributed processing. Cambridge, MIT Press, 1986.
2) Hopfield,J. & Tank,D. Biol.Cybern. 52, 141-152 (1985).
3) Brunak,S. et al. Nucl.Acids Res. 18, 4797-4801 (1990).
4) O'Neill,M.C. Nucl.Acids Res. 19, 313-318 (1991).
5) Demeler,B. & Zhou,G. Nucl.Acids Res. 19, 1593-1599 (1991).
6) Bengio,Y. & Pouliot,Y. CABIOS. 6, 319-324 (1990).
7) Ladunga,L. et al. CABIOS. 7, 485-487 (1991).
8) Hirst,J.D. & Sternberg,M.J.E. Protein Engng. 4, 615-623 (1991).
9) Qian,N. & Sejnowski,T.J. J.Mol.Biol. 202, 865-884 (1988).
10) Holley,L.H. & Karplus,M. Proc.Natl. Acad.Sci.USA. 86, 152-156 (1989).
11) Kneller,D.G. et al. J.Mol.Biol. 214, 171-182 (1990).
12) Bohr,H. et al. FEBS Lett. 241, 223-228 (1988).
13) McGregor,M.J. et al. Protein Engng. 2, 521-526 (1989).
14) Holbrook,S.R. et al. Protein Engng. 3, 659-665 (1990).
15) 中山,吉田. 1992情報学シンポジウム講演論文集. 115-123 (1992).
16) Muskal,S.M. et al. Protein Engng. 3, 667-672 (1990).
17) Bohr,H. et al. FEBS Lett. 261, 43-46 (1990).
18) Wilcox,G.L. et al. Tetrahedron Comp. Method. 3, 191-211 (1990).
19) 秋山,古谷. 1992情報学シンポジウム講演論文集. 125-134 (1992).

バッキーチューブにおける金属的物性発現と電子状態

京大・工・分子工学
田中　一義

1．序

バッキーチューブというのは、よく知られているフラーレン系物質を調製するのと同様なアーク放電蒸着法において、陰極にミクロな針状に成長する炭素物質のことである。このバッキーチューブは、グラファイトシートでできた円筒が２個から５０個程度同心状になっていることが分かっている[1)]。このチューブの直径は２～３０ｎｍ、長さは１μｍ程度である。さらに興味深いのは、このバッキーチューブの単位セルには、ちょうど散髪屋の目印のように、螺旋状に巻上がって行く構造をとるものが存在するということである（図１）。我々はこのヘリカルな１本のバッキーチューブについて、グラヘリックスという

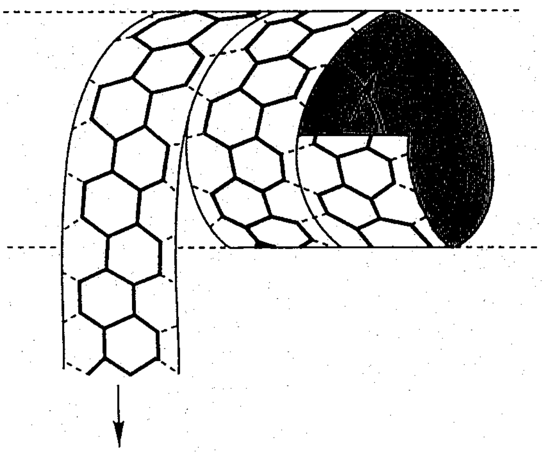


図１．螺旋対称性を持つ（ヘリカル）バッキーチューブの例.

名前をつけ、その電子状態を解析している[2)]。ここでは、その解析法の簡単な紹介とその解析結果について紹介する。

2．１次元結晶軌道解析法

この解析では、バッキーチューブを無限の長さを持つものとして扱っており、その方法としては１次元結晶軌道法というものを使用した。これはもともと無限長の高分子鎖の電子状態を取り扱う方法に螺旋並進対称性を取り込んだ方式のものである。高分子が図２のような単位部分の完全に規則的な繰り返しでできあがっている、すなわち無限周期系であると考えられるときには、その電子状態は比較的簡単に求められる。ただしこれは理論的に単純になるという意味であり、必ずしも計算が簡単になるという意味ではない。

さて、この繰り返しは単位セルと呼ばれる基本単位が高分子鎖方向にスライドしてでき

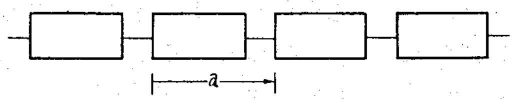


図２．理想的な高分子１次構造．ａは単位セルの並進長さ．

あがっていてもよい（群論的には並進対称性という）し、朝顔の蔓や螺旋階段のように、一定の角度（ピッチ角）だけ回転しながら高分子鎖方向に進んでいるものでもよい（螺旋対称という）。単位セルの中身は原子１個のこともあるし、分子程度の大きさになることもある。この並進や螺旋がずっと繰り返すことによって、規則的な１次構造ができあがっているものを１次元的高分子結晶と呼ぶことがある。

１次元的高分子結晶の電子状態を取り扱う方法としてよく用いられるものに、タイト・バインディング法（強結合法あるいは束縛電子法などとも呼ばれる）に基づく結晶軌道理論がある。これは分子軌道理論においてひろく用いられる原子軌道を分子軌道の基底として採用するＬＣＡＯ法と同様に、高分子結晶の構成原子の原子軌道を基底関数として採るもので、化学者の直観に訴えやすいという利点を持っている。この方法では高分子全体に広がった波動関数、すなわち結晶軌道は（１）式のように原子軌道の線形結合として構成される。

$$\phi_{k,s}(r) = (1/\sqrt{N}) \sum_{j}^{N} \sum_{\mu}^{n} \exp(ikja) C_{\mu,s}(k) \chi_{\mu}(r-ja) \quad (1)$$

ここでNは全セル数（すなわち無限大）、jはセルの番号、$\chi_{\mu}(r-ja)$はj番目のセル中のμ番目の原子軌道で、一つのセル中にはn個の原子軌道があるとする。またkは波動ベクトル（今のように系が１次元の場合にはスカラー量）、sはバンド準位を表す。（１）式のかたちをブロッホ型関数という。このような複素波動関数をとれば、解くべき永年方程式は単位セル内の原子軌道の数であるnと同じ次数になって、計算は簡単になる。

さて、この結晶軌道$\phi_{k,s}$は、軌道エネルギー$\varepsilon_{k,s}$を伴っている。これをk軸に対してプロットした曲線をエネルギーバンドと呼ぶ。単位セル中の電子の数を2m(m<n)とすれば、n本のバンドのうちm本は電子のつまった結晶軌道に対応するエネルギー準位となる。このm本のバンドを価電子帯(Valence band)と呼び、残りの(n-m)本のバンドを伝導帯(Conduction band)と呼ぶ。価電子帯と伝導帯とのエネルギー間隙をバンドギャップあるいは禁止帯と呼び、これがゼロになる場合が金属的であり、またゼロでない値を持つときにはその値に応じて半導体的あるいは絶縁体的となる。

３．バッキーチューブの電子状態

我々はヒュッケル近似に基づく１次元結晶軌道法解析によって、種々の直径およびへり

ばどうなるか、また同心状のバッキーチューブを重ねればどうなるのかなど、残された問題はまだ多い。しかしバッキーチューブはこのように特異な電子物性を示す可能性が強く、今後の実験的ならびに理論的研究の発展が楽しみな材料の一つである。

本小文の骨子は岡原賢二氏、罡田真由美氏、山邊時雄氏との共同研究から成っている。ここに記して感謝致します。

文献

1)S.Iijima, Nature, 56, 354(1991).
2)K.Tanaka, K.Okahara, M.Okada & T.Yamabe, Chem.Phys.Lett., 191, 469(1992).
3)N.Hamada, S.Sawada & A.Oshiyama, Phys.Rev.Lett., 68, 631(1992).
4)R.Saito, M.Fujita, G.Dresselhaus & M.S.Dresselhaus, Phys.Rev., B46, 1804(1992)
5)T.Yamabe, K.Okahara, M.Okada & K.Tanaka, Synth. Met., 印刷中.

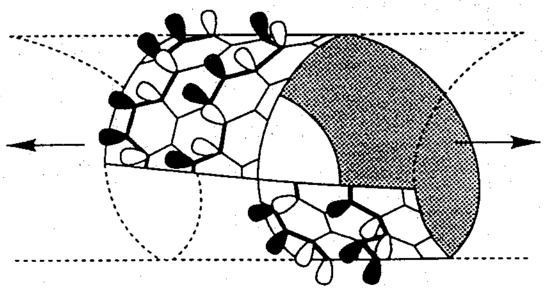


図4．nが偶数、m＝3の場合のチューブの最高被占結晶軌道の軌道相．孤立したシス型ポリアセチレン2本の軌道相と同様になっている．

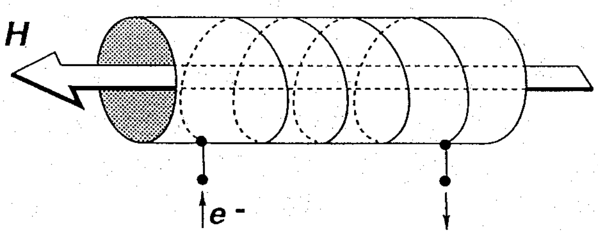


図5．分子ソレノイドの分子電磁石への応用．適当な分子結線によって導電キャリヤを注入すると分子電磁石となる．

カルピッチを持つバッキーチューブの電子状態を調べた[2]。一般にバッキーチューブは２つのインデックスm,nによってその形が指定される。nはバッキーチューブを作るときに巻くグラファイトシートの幅を示すものでチューブ円筒周囲の大きさを表し、またmはピッチを示す。例えばm=0はヘリカル状でないバッキーチューブを意味する。

バンドギャップの解析の結果、ヘリカルピッチの値によって周期的に金属的性質を持つものが現れることが分かった。すなわち、金属的性質は

$$m = 3k \quad (k = 0,\ 1,\ 2,\cdots) \qquad \text{（偶数のnに対して）}$$

$$m = 1.5 + 3k \quad (k = 0,\ 1,\ 2,\cdots) \qquad \text{（奇数のnに対して）} \tag{2}$$

の関係を満たすものについてのみ現れる（図３参照）。これと同等の結果は他の研究グループによっても、ほぼ同時期に発表されている[3,4]。

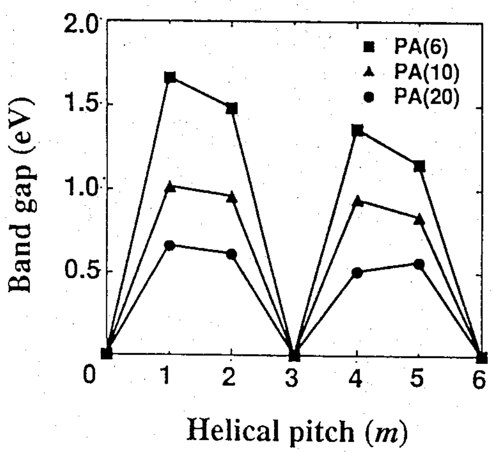


図３．ヘリカルピッチｍに対するバッキーチューブのバンドギャップ値変化．

我々はさらに、なぜ（２）式のような場合において金属的性質が現れるのかということについて、軌道相解析によって調べた。詳細は略するが、それによると（２）式を満たすようなバッキーチューブの結晶軌道は、図４のように孤立したシス型ポリアセチレンの結晶軌道と同等であることが分かった[5]。すなわち、結合交替の起こっていないポリアセチレンでは金属的状態が現れるが、これと同質のことがバッキーチューブでも起こっていることになる。これをさらに延長して考えると、金属的なバッキーチューブでは図５のように分子状のソレノイドができることになる。そうすれば分子サイズのコイルも作製可能になるかも知れず、その応用的発展にも興味が持たれる。

４．終わりに

以上、バッキーチューブの簡単な電子状態解析について紹介したが、σ系電子を含めれ

プラズマCVDにおける分子設計

千葉大・自然科学　佐藤浩太

プラズマCVDは、種々の過程が組合わさった複合プロセスであり、実験のみによる素過程レベルでの解析は、容易でない。我々の量子化学に基づくプラズマ反応素過程の研究を基礎に、分子設計と解析の試みを気相過程、表面過程の両面から述べて行きたい。

1.　気相過程

プラズマCVDの大きな特長の一つは、反応条件の自由度が大きく、その反応条件によって反応素過程が大きく変化し、一つの原料ガスから出発しても、多様な膜構造を形成できることである。よって、その素過程が明らかになれば、分子設計が可能である。プラズマ反応は、まず、系中の電子と原料ガス分子の衝突によって開始されるので、電子温度分布を変化させることは、直接プラズマ反応を制御することにつながる。電子の平均自由行程は、圧力に反比例するので、プラズマ反応は、圧力に依存すると考えられる。図1に非経験的分子軌道法[1]を用い、て求めたビニルシランの励起状態のエネルギーダイアグラムを示す。[2] 1重項および3重項の最低励起状態（S_1、T_1）に励起されると、Si－C結合を保持したままビニルπ結合が開裂して反応が進行し、T_2に励起されるとSi－C結合が開裂する事が計算により予測される。Si－H結合の開裂が起こるためには、さらに上の励起状態への励起が必要と考えられる。圧力が高くなると電子温度が低下し、S_1、T_1へ

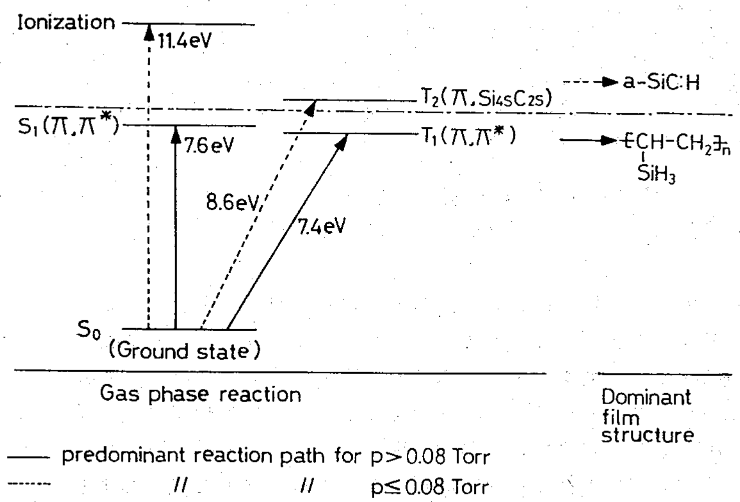


FIG.1. The energy diagram of vinylsilane by MP3/3-21+G*//HF/3-21+G* calculations (energies in eV), S_0:$H_3SiCH{=}CH_2$, S_1:$H_3SiCH{-}CH_2$, T_1:$H_3SiCH{-}CH_2$, T_2:$H_3Si{-}CH{=}CH_2$, ionization: $H_3SiCH{=}CH_2^+ + e$.

の励起の寄与が高まると考えられる。図2にビニルシランの高周波プラズマCVD（5W，基板温度室温）による生成薄膜の種々の圧力におけるIRスペクトルを示す。上記の予測に対応して、圧力が上がるにつれて、Si－H伸縮振動が、2100cm^{-1}から2140cm^{-1}にシフトし、SiHが支配的な構造から，SiH_2、SiH_3が多く存在する構造へ変化していることを示す。全体の水素量の変化もこれに対応する。分子のイオン化や励起には、しきい値があるので、圧力に対する電子温度の変化は線形でなく、$\alpha-\gamma$遷移[3]により、大きな電子温度の変化が起こる領域が存在する。

通常のシランと炭化水素の混合ガスのプラズマCVDでは、ケイ素種と炭素種の反応性の違いにより、均一な膜が得られ難く、炭素比を増していくとグラファイト化によりバンドギャップが逆に狭くなる傾向があるが、ビニルシランの場合、図3にみられるように、圧力を上げて電子温度を下げることにより、バンドギャップは増加し、S_1、T_1の寄与が高まって骨格が変化する事に対応している。[2] 反応設計がワイドバンドギャップの半導体を得たいという物性の要求を満たしたと言える。

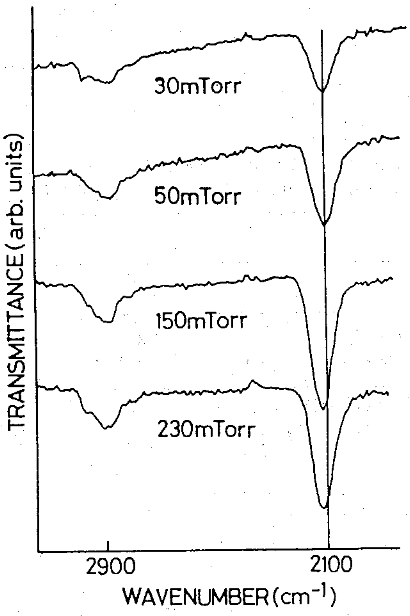


FIG. 2. The pressure dependence of the infrared spectrum of the plasma CVD film produced from vinylsilane.

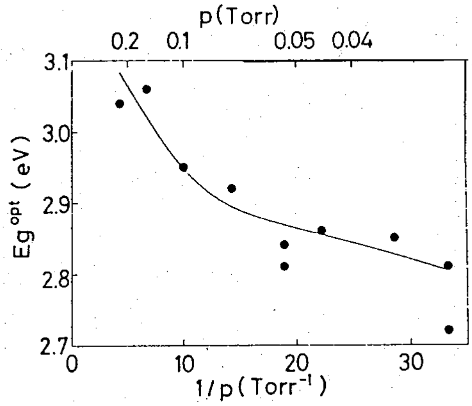


FIG. 3. The optical band gap of the plasma CVD film produced from vinylsilane vs $1/P$.

プラズマ重合によく用いられるテトラフルオロエチレンのプラズマ反応についても非経験的分子軌道法を用いて解析を行い、解離型電子付着過程の重要性を指摘した。[4] この結果は、探針法によりテトラフルオロエチレンプラズマにおいて測定されていた特異な電流電圧特性[5] を説明する。パルスプラズマと光の複合系[6] 中の2次反応についても検討し、反応設計に利用できることを示した。[7] 非経験的分子軌道法によって求めた励起状態のエネルギー曲面は、プラズマのOESスペクトルともよく対応する。[8]

プラズマCVDは、原料分子の選択の自由度が大きいのも特長の一つである。非経験的分子軌道法によるSiH_3Fの最低3重項励起状態（T_1）のエネルギー曲面を図4に示す。一般にSi－F結合はSi－H結合よりはるかに強いことが多く、他のフッ化シランでは、T_1において、Si－H結合が解裂するが、SiH_3Fのみ、Si－F結合がT_1において、優先的に解裂する特異な挙動を示す。[9] 前述のビニルシランの励起エネルギーにおけるシリル水素のフッ素置換効果を表1に示す。ここでも、モノフッ化物のみが、T_1への励起エネルギーが非常に低いという特異な挙動を示す。[10] 求められた$SiH_2FCH=CH_2$のフロンティア軌道の形から、電気陰性度の高いFの非対称な置換による対称性の低下により、π軌道とσ軌道の混合が起こったことが特異な挙動の原因であることがわかる。このような原料分子

の修飾も、プラズマ反応設計の有力な方向の一つである。これらの結果は、ケイ素とフッ素の組み合わせは、対称性を考慮せずに、原系の基底状態のフロンティア軌道理論から予測できる枠からはみでた振る舞いを見せることがあることを示しており、物質科学的にも注目される。

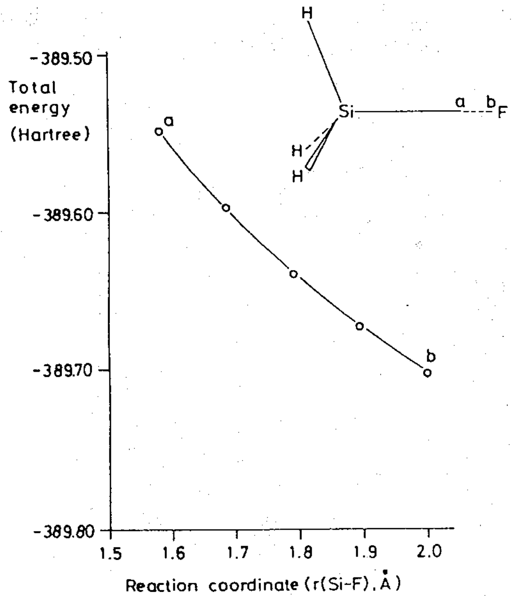


FIG. 4 Intrinsic reaction coordinate for triplet SiH_3F. UHF/6-21G**

Table 1
Excitation energies (in eV) from the ground state to the lowest excited triplet state of vinylfluorosilanes ($SiH_{3-n}F_nCH{=}CH_2$)

	n			
	0	1	2	3
ΔE_{HF}	6.8	3.5	6.8	7.5
ΔE_{MP}	7.4 [a]	4.6 [a]	7.3 [a]	7.8 [b]

[a] By MP3/3-21+G*//HF/3-21+G*.
[b] By MP2/3-21+G//HF/3-21+G.

2.　表面過程

シリコン系のプロセスでは、基板を加熱することが多く、この場合、表面過程の重要性が高くなる。プラズマＣＶＤによるアモルファスシリコン製造プロセスでは、成長表面下において活性化エネルギーの低い水素脱離過程が存在することが、実験的に指摘されていた[11]が、分子的な、シリコン化合物からの水素脱離は、いずれも活性化エネルギーが55kcal/mol以上と高く、その過程は明かでなかった。我々は、式（１）、（２）を繰り返す水素脱離過程を提案した。[12] すなわち、ダングリングボンドが、隣接する４配位のシリコンとカップリングしながら水素を脱離し、脱離した水素が隣接する４配位のシリコンを攻撃して再びダングリングボンドを復活させるという過程を繰り返し水素を脱離しながらネットワークを形成するという機構である。非経験的分子軌道法により求めた（１）、（２）の各過程における全エ

$$SiHR_3 + \cdot SiR'_3 \rightarrow R_3SiSiR'_3 + H \quad (1)$$
$$SiR''_3H + H \rightarrow \cdot SiR''_3 + H_2 \quad (2)$$
$$(R,\ R',\ R'' = H \text{ or } SiR_3)$$

ネルギーおよびエントロピー変化を表２に示す。過程（１）の活性化エネルギーは分子的な過程の半分以下で、全体として、熱力学的にも有利な反応である。この機構によると触媒的にダングリングボンドの周りの水素は、除去されることになる。最近のパルスＥＳＲによる測定によると、生成アモルファスシリコン中のダングリングボンドと最近接水素は、４Å以上離れており、[13] 上記の機構と対応している。

TABLE 2 Activation energies (E_a), activation entropies (ΔS^T), heats of reactions (ΔH), and entropy changes (ΔS).

	T (K)	$\equiv SiH + \cdot Si\equiv$ [a] $\rightarrow \equiv Si-Si\equiv + H$	$SiH_4 + H$ [b] $\rightarrow \cdot SiH_3 + H_2$	$-SiH_3 + H$ [b] $\rightarrow -\dot{S}iH_2 + H_2$	$=SiH_2 + H$ [b] $\rightarrow =\dot{S}iH + H_2$	$\equiv SiH + H$ [b] $\rightarrow \equiv Si\cdot + H_2$
E_a [c]	0	25.2	9.9	8.8	7.9	7.2
	600	28.1	10.9	9.9	9.1	8.4
ΔS^T [d]	600	−30.8	−20.7	−19.2	−21.2	−22.2
ΔH [c]	0	8.1	−15.2	−16.7	−17.6	−18.0
	600	10.2	−14.4	−16.1	−17.4	−17.6
ΔS [d]	600	−6.8	6.6	8.4	5.1	6.8

[a] By $MP2/3-21G^*$.
[b] By $MP2/3-21G$.
[c] In kcal mol^{-1}.
[d] In cal $mol^{-1}K^{-1}$.

以上述べてきたように、量子化学に基づく手法は、プラズマCVDの設計と解析に大変有効である。

参考文献

1)新しい量子化学, A. Szabo, N. S. Ostlund 著, 大野公男, 阪井健男, 望月祐志訳, 東大出版会(1987).

2)K. Sato, A. Uchiyama, S. Iwabuchi, T. Hirano, H. Koinuma, J. Appl. Phys., 71, 4572 (1992).

3)V. A. Godyak, A. S. Khanneh, IEEE Trans. Plasma Sci. PS-14, 112 (1986).

4)K. Sato, T. Komatsu, S. Iwabuchi, Proc. of the International Seminar on Reactive Plasmas, p289 (1991).

5)K. Yanagihara, H. Yasuda, J. Polym. Sci. Polym. Chem. Ed., 20, 1833 (1982).

6)M.Kawasaki, Y.Matsuzaki, K. Fueki, K. Nakajima, Y. Yoshida, H. Koinuma, Nature, 331, 153 (1988).

7)K. Sato, K. Kojima, M. Kawasaki, Y. Matsuzaki, T. Hirano, M. Nakano, H. Koinuma, J. Appl. Phys., 65, 2145 (1989).

8)矢野大輔、佐藤浩太、岩淵晋、平野恒夫、羽音大作、川崎雅司、鯉沼秀臣、第39回春季応用物理学会p769(1992).

9)K. Sato, T. Hirano, H. Natsuaki, K. Fueki, H. Koinuma, Appl. Phys. Lett., 45, 1324 (1984).

10)K. Sato, A. Uchiyama, S. Iwabuchi, T. Hirano, H. Koinuma, Chem. Phys. Lett., 192, 395 (1992).

11)A. Matsuda, K. Tanaka, J. Appl. Phys., 60, 2351 (1986).

12)K. Sato, Y. Sugiyama, A. Uchiyama, S. Iwabuchi, T. Hirano, H. Koinuma, Phys. Rev. B, 46, 1913 (1992).

13)山崎聡、磯谷順一、松田彰久、第52回秋季応用物理学会p778(1991).

昆虫フェロモンの分子設計

日本たばこ（株）生命科学研究所　島崎和子

はじめに

数年前まで、コンピューターには精密で膨大な理論計算を行う非常に高価な装置というイメージがあった。今日ではハード面やプログラムソフトの急速な進歩により一企業の研究所でも研究開発のひとつの手段としてコンピューターを簡単に使用することができるようになっている。

私達は現在害虫の駆除剤として有効な新しいフェロモンアナログの創製を目指して、計算化学的手法を用いた構造活性相関の検討を行なっている。昆虫フェロモンはそのほとんどが炭素、酸素、水素の３種の原子から構成されていて、分子量も３００程度と計算化学のターゲットとしては適当であると考える。また当研究所では葉たばこの貯蔵害虫であるタバコシバンムシの性フェロモン、セリコルニンについての古くからの研究があり、新しいアナログの創製で重要となるフェロモンアナログの合成や生理活性の評価システムがすでに構築されていた。このような背景から計算化学の昆虫フェロモンへの適用を企画し、研究を開始した。現在のターゲットは世界的な害虫であるワモンゴキブリの性フェロモン、ペリプラノンＢ（1）[1] およびそのアナログ（2－5）である（図１）。　天然物であるペリプラノンＢ（1）は炭素１０員環骨格に２つのエポキシ環などの特徴的な官能基を有する複雑な構造である。そのために合成が困難で、これ自身は駆除剤として実用化されておらず、実用的なアナログの創製が求められていた。1と同様な生理活性を示す2－5は１０員環骨格を有することは共通であるがそれぞれの官能基の種類や結合する部位は異なっている。このため同じ生理活性を示すのはそれらの立体構造に依存していると考えられる。しかし各化合物に関するNMR、X線結晶解析から得られる情報は限られたものであり、それらを比較、検討するのは困難であった[2]。そこでこれらの化合物の系統的な解析を計算化学的手法で行ない、構造活性相関の検討から新規なアナログの分子設計に役立つ知見を求めた。

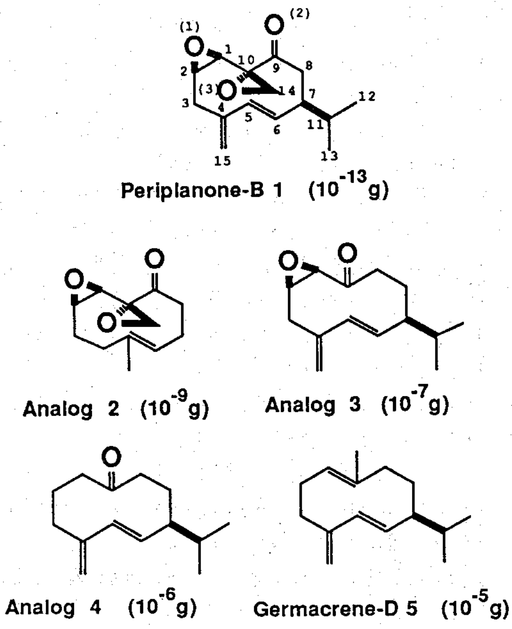


図1　ペリプラノンBとアナログ　(活性いき値)

方法

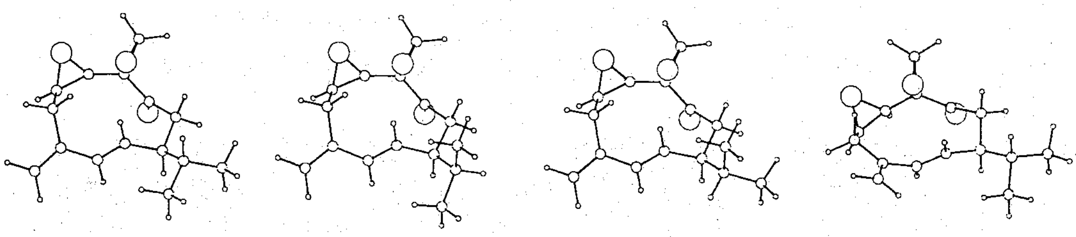
計算化学的手法のなかで馴染みやすく使いやすいのは分子力場法である。理論もわかりやすいし、扱える分子が比較的大きくしかも計算時間が他の手法に比べて短い。そこでまず第一にこの分子力場法（MM2-'87）を用いて、各化合物の立体配座の特徴

を比較する。次に得られた各配座の電子状態を半経験的分子軌道法（AM1）により検討する。最後に得られた配座の特徴や電子状態に関する情報を組み合わせて構造活性相関を検討する。この順序で進めることにした。

第一段階に取り掛かる前に２つの問題が生じた。一つはペリプラノンＢを特徴付けているエポキシ環に関する分子力場計算用パラメーターが不足していること、もう一つは１０員環のように配座が変化しやすい化合物に於いて安定な配座を探し出すプログラムがないことである。力場パラメーターについてはモデル化合物の非経験的分子軌道法計算結果を基礎として不足する分を作成した[3]。 また配座発生の問題については豊橋技術科学大学の大澤映二先生の研究室で開発された配座探索プログラムＣＯＮＦＬＥＸ２を使わせていただくことで解決した[4]。

結果及び考察

１）分子力場法による配座解析により、各化合物の安定配座は10員環の形の点ではよく似ており、かつそれらは25°Cにおいて比較的高い確率で存在することがわかった。図２はペリプラノンＢの主要安定配座である。１番から３番までは、環配座は同じでイソプロピル基の回転異性体である。この環配座はアナログ2、3、4の最安定配座の環配座と良く重なり（図３、４）、アナログ5についてもその３位の安定配座と良く似ている。しかも活性の高い化合物ほどこの環配座を持つ安定配座の存在確率が高くなっている。このことからこの環配座が生理活性発現に重要な配座ではないかという仮定を立てた[5,6]。



No. 1 (67.9%)　No. 2 (12.8%)　No. 3 (7.0%)　No. 4 (4.0%)

図２　ペリプラノンＢ１の主要配座（25°Cにおける存在確率）

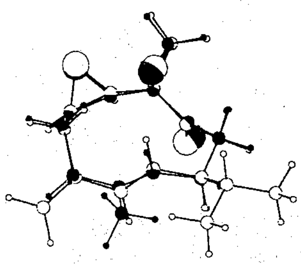


図３　1(白)と2(黒)の最安定配座の重ね合わせ

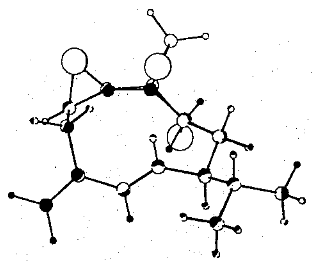


図４　1(白)と3(黒)の最安定配座の重ね合わせ

２）１）で得られた安定配座の電子状態を分子軌道法より比較した結果、フロンティア軌道が局在する部位が特徴的であることがわかった。HOMOはどの化合物でもジエン部分（アナログ２では２重結合）に存在していた。LUMO、next-LUMO軌道は次の

2箇所のどちらかに存在していた。その一つはペリプラノンBにおいてはカルボニル基やスピロエポキシ基の炭素原子あたり、平面構造式で示すと10員環の上半分、もう一つはジエン部分（アナログ２では２重結合）平面構造式では下半分である（図５）。そこでこれらをまとめて10員環の上半分に存在する空軌道を$FUMO_{upper}$ (Frontier Unoccupied Molecular Orbital at the upper part of ten membered ring)、同様に下半分に存在する空軌道を$FUMO_{lower}$ (Frontier Unoccupied Molecular Orbital at the lower part of ten membered ring)と定義した。次に各安定配座の存在確率で重み付けした平均フロンティア軌道エネルギーを求め、生理活性との相関を検討した。このうち$FUMO_{upper}$だけが軌道エネルギーが小さくなるほど活性が高くなる相関が見られた(R=0.849)。この軌道が生理活性発現に関与していると考えられる。$FUMO_{upper}$は10員環の上半分に存在する空軌道であるが、このあたりに存在する官能基は化合物によってその種類も位置も異なっている。にもかかわらずこの軌道が活性発現に関与するという理由を検討するために、先に分子力場法による解析から活性発現に重要と考えられる環配座におけるアナログの$FUMO_{upper}$の軌 道の形とペリプラノンBのそれとを比較してみることにした。10員環の上半分に存在する官能基が全く同じ１と２では$FUMO_{upper}$はその向き、形とも良く重なっている。官能基の種類や位置の違う３、４、５では$FUMO_{upper}$はその一部が重なっているだけだが、軌道の広がる向きは同じである。これらのことから$FUMO_{upper}$は各化合物の活性発現に重要と考えられる環配座においてはその形や向きが良く似ていることがわかった。

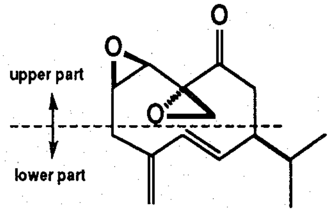


図５　空軌道の局在する部位

３）１）からは活性発現に重要な環配座が、２）からは活性発現に関与する軌道が求められた。今度はこれらの要素を組み合わせて生理活性とより良い相関を持つ指標（パラメーター）を考案し、これからのフェロモンアナログの設計に役立てたいと考えた。このパラメーターをEffective Frontier Parameter ($EF^{(N)}_{(s)}$)と名付け、下式より求めた。

$fr^{(N)}=2C^2r_{(FUMOupper)}$ （式１）

$Efr^{(N)}_{(s)}=\Sigma\{fr^{(N)}_{\mu}/E_{(FUMOupper)\mu} \times Pop_{\mu} \times A\}$　$\mu=1\sim M$ （式２）

$EF^{(N)}_{(s)}=\Sigma\{Efr^{(N)}_{(s)}\}$　$r=1\sim R$ （式３）

$fr^{(N)}$	軌道電子密度	
μ	安定配座の番号	(M: 安定配座の総数)
r	計算した原子の番号	(R:計算した原子の総数)
$E_{(FUMOupper)}$	$FUMO_{upper}$の軌道エネルギー	(eV)
Pop	25°Cにおける存在確率	
A	structure factor	

まず各化合物の安定配座の$FUMO_{upper}$に於いて、一つの原子の軌道電子密度($fr^{(N)}$)を求

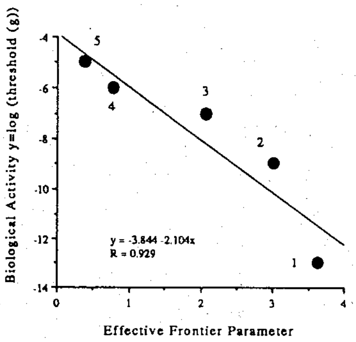
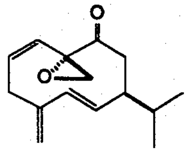


図6　生理活性とEffective Frontier Parameter

める（式1）。次にこの軌道電子密度を$FUMO_{upper}$のエネルギーで除し、さらにその配座の存在確率で重み付けする。このとき式2のAで表されるstructure factorを乗ずる。このAにはその環配座が活性に重要と考えられる安定配座と重なる場合には1を、重ならない場合には0を与える。このような計算を環、及びイソプロピル基を除く官能基を構成する炭素および酸素原子についてそれぞれ行い、その総和をとる（式3）。この値をEffective Frontier Parameter ($EF^{(N)}_{(s)}$)として生理活性との相関を求めたところ、平均$FUMO_{upper}$エネルギーよりも良い相関が得られた(図6, R=0.929)。現在では各化合物の安定配座を再度比較してさらに良い相関を得ている。またすでに生理活性(10^{-11}g)のわかっているペリプラノンA（6）についてこの$EF^{(N)}_{(s)}$を求め、関係式から得られる活性の予測値と実測値を比較したところ、両者はよく一致した。このことはデザインした化合物を実際に合成しなくても、予め$EF^{(N)}_{(s)}$を求めることによって活性が予測できることを示しており、今後の分子設計におおいに役立つものであると考える。この相関の示す生理学的意味として、議論が多いところではあるが、私達は昆虫フェロモンの認識は安定配座の関与する機構であると考える。この場合、特定の官能基での電子のやり取りでおこる認識ではなく、ある程度の広がりを持った軌道における3次元的な認識である。現在ではEffective Frontier Parameterを用いて新しいフェロモンアナログの分子設計を行っている。このように計算化学は私達に生理活性物質の設計に関する重要な情報のみならず、活性発現機構に関しても貴重な示唆を与えてくれる。今後も計算化学の適用範囲をさらに広げて行きたいと考える。


Periplanone-A 6

本研究にあたりプログラムの導入や力場パラメーターの作成、計算化学に関する貴重なアドバイスを豊橋技術科学大学の大澤映二教授、後藤仁志氏、横浜国立大学工学部の廣田穣教授、榊原和久助手から頂きました。ここに改めて感謝の意を表します。

参考文献
1) W. C. Still, *J. Am. Chem. Soc.*, 1979, １０１, 2493.
2) M. Mori, K. Okada, K. Shimazaki, T. Chuman, S. Kuwahara, T. Kitahara and K. Mori, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1*, 1990, 1769.
3) K. Sakakibara, M. Hirota, K. Shimazaki and T. Chuman, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, submitted.
4) H. Gotō and E. Ōsawa, *J. Am. Chem. Soc.*, 1989, １１１, 8950; H. Gotō and E. Ōsawa, *Tetrahedron Lett.*, 1992, ３３, 1343.
5) K. Shimazaki, M. Mori, K. Okada, T. Chuman, H. Gotō, E. Ōsawa, K. Sakakibara and M. Hirota, *J. Chem. Ecol.*, 1991, １７, 779.
6) K. Shimazaki, M. Mori, K. Okada, T. Chuman, H. Gotō, E. Ōsawa, K. Sakakibara and M. Hirota, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, 1992, 811.

分子動力学法の基礎と最近の話題

富士通株式会社
三上　益弘

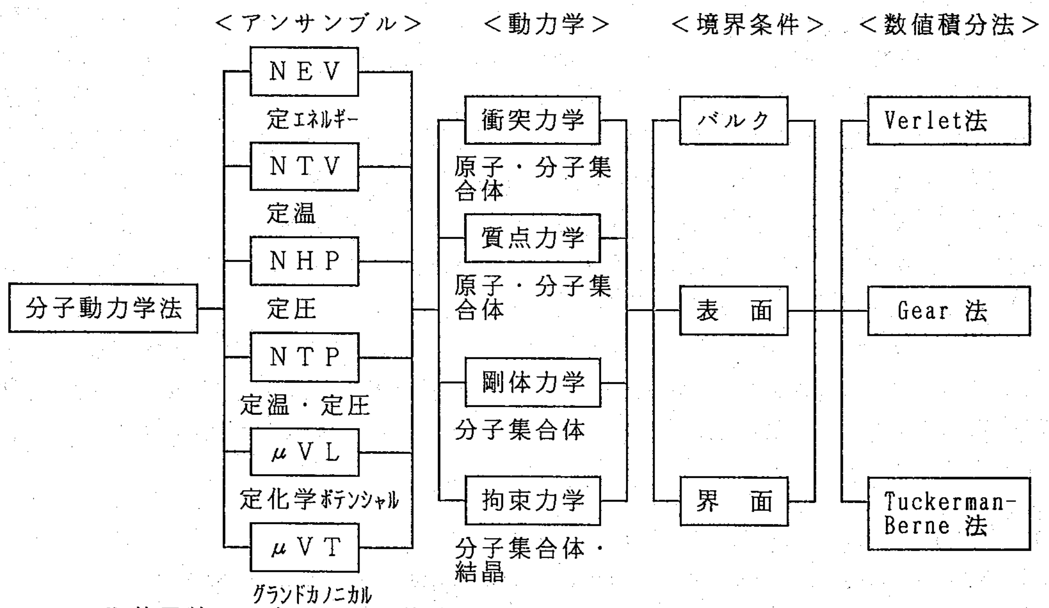
1．はじめに

1957年に AlderとWainwrightにより創始された分子動力学法[(1)][(2)]は，1980年代におけるAndersen，RahmanとParrinelloに始まる定圧法，そしてNoseに始まる定温法の分子動力学法の一応の完成を見て，材料科学に本格的に応用されるようになってきた。さらに，1985年には，電子論と分子動力学法を統合した量子分子動力学法が,CarとParrinelloにより提案され，古典的方法では取扱が難しかった化学反応系にも分子動力学法の適用が拡大した。少し前までは，分子動力学法は，計算の専門家が使うツールであったが，その枠組みの完成により，物質・材料の研究をおこなっている実験家のツールとしてもその重要性を高めてきている。

本稿では，こうした分子動力学法の最近の技術進歩[(3)]をレビューし，今後の発展を展望する。また，最近の話題として，新しい型の多体力ポテンシャル関数（クラスター汎関数）を適用することにより著しい成果が上げられた炭素同素体の化学への分子動力学法の適用を取り上げて，分子動力学法による材料設計の可能性と課題について言及する。

2．分子動力学法の最近の進歩

現在の分子動力学法は，材料科学に応用する上で十分な機能・能力を持っている。図1には，現在までに確立されている分子動力学法の要素技術の体系図を示した。



N:粒子数，E:全ｴﾈﾙｷﾞｰ,V:体積,H:ｴﾝﾀﾙﾋﾟｰ,P:圧力，μ：化学ﾎﾟﾃﾝｼｬﾙ，L:Hillｴﾈﾙｷﾞｰ

図1．分子動力学法の体系

(a)アンサンブル：NEV(N,E,V が一定となるアンサンブルである)，NTV，NHP，NTP，μVL，μVTの6つのアンサンブルの分子動力学法の基礎方程式が提案されている。現在では，孤立したマイクロクラスターのシミュレーション(NEVアンサンブルを用いる）や固体の構造相転移やガラス転移，結晶化過程，融解過程などのシミュレーション(NTPアンサンブルを用いる）やゼオライトの空孔やグラファイト上での吸着のシミュレーション（μVTアンサ

ンブルを用いる）などが可能であり，本格的に材料科学の問題に使える状況にある。
(b)動力学：衝突力学，質点力学，剛体力学，拘束力学の4つが完成されている。衝突力学は原子又は分子を剛体球又は剛体楕円体として扱い完全弾性衝突の方程式で原子分子の運動を求めるもので，主に液晶のシミュレーションで使われている。質点力学は，原子を質点として扱い，原子間に働く相互作用力として座標の連続関数を用いる。この力学の対象は多く，セラミックス，金属，半導体などの無機化合物及び高分子，生体高分子などの有機化合物などあらゆるものが扱える。剛体力学は，分子を剛体として扱い，ニュートン・オイラー方程式を用いて運動を決定する方法である。これまで，主に水や四塩化炭素のような低分子の集合体で利用されてきたが，最近では，C_{60}の結晶の相転移を調べるのにも利用されている。拘束力学は，原子系の自由度の一部を凍結し，それによって生じる拘束条件を持った質点力学を解くことにより運動を求める方法である。有機分子の集合体では結合長，結合角の振動が集合体としての構造にあまり影響を与えないので，それらの自由度を凍結して計算する拘束力学がよく用いられている。
(c)境界条件：物質のバルク状態の周期境界条件はもちろんのこと，表面の再構成や表面上での吸着，単層膜の相転移を扱うための境界条件，そして異種結晶の界面や液体と固体の界面などを扱う境界条件が提案され，応用されている。また，非平衡系であるMBE やCVDのシミュレーション用の境界条件と方法が開発され，多くの研究が行われている。
(d)数値積分法：分子動力学法の基礎方程式は，二階常微分方程式（線形，非線形）であり主にVerlet法とGear法が用いられてきた。最近，Tuckerman とBerne [4] は，多重時間刻み幅のアルゴリズムを提案した。このアルゴリズムは，質量が大きく異なる複数の原子を含む系，短距離力と長距離力を同時に含む系，力の定数が大きく異なる系などの計算時間を短縮することができ，分子動力学法の有望な新しい数値積分法として期待されている。

3．原子・分子間相互作用の最近の進歩

枠組みとしての分子動力学法は完成していると言ってもよいが，材料科学に役立つためには，精密な相互作用力が不可欠である。これまでに，多くのポテンシャル関数が提案され，実際に使われてきた。アルカリ金属塩，アルカリ土類金属塩，珪素酸化物，炭化水素系分子，タンパク質，核酸，半導体，金属，ゼオライトなど枚挙にいとまがない程多くの相互作用ポテンシャルがある。そして，それらは現在，さらに急速に増えつづけている。相互作用は，図2に示したように古典的と電子論的ものに分類できる。古典的相互作用は原子間で作用するものと分子間で作用するようにモデル化されたものに分類できる。
(a)原子間相互作用：4つのタイプ（ペアポテンシャル，ペア汎関数クラスターポテンシャル，クラスター汎関数）に分類することができる。
・ペアポテンシャル：二つの原子の座標だけから決まる相互作用である。このポテンシャルは，半導体，金属を除く無機化合物のほとんどの相互作用を十分に記述できる。ペアポテンシャルの代表的なものとしてLJポテンシャル，BMH ポテンシャルがあり，原子クラスターのAb initio 計算により，ポテンシャル・パラメータを決定する方法が1980年代の末に確立された。Ab initio 計算をしっかりやってパラメータを決めれば，驚くほど良く構造・物性の実験値を再現できることが分かっている。また，孤立原子・イオンの電子密度を用い，ポテンシャル関数式の中からパラメータを排除したポテンシャルに，Gordon-Kimポテンシャルがある。
・ペア汎関数ポテンシャル：二体力の項と自由電子の密度に依存するペア汎関数の項からなるもので，代表的なものとして EAM(Embedded Atomic Method)がある。 EAMは，ペアポテンシャルが抱えていた問題点を解決し，実験結果と良く一致する結果を与えている。約30種類の金属のポテンシャルパラメータが決められ，合金への拡張も最近なされた。

・クラスターポテンシャル：二体力項，三体力項四体力項といった各多体力の和からなるもので，共有結合を記述するのに適したポテンシャル関数である。有機分子の力場のように結合長（二体），結合角（三体），二面角（四体）エネルギー項及び非結合力項（二体）の和からなるポテンシャルはこのタイプに属する。有機化合物の力場は，MM3,AMBER,CHARMm，Dreiding，TRIPOS力場など多くの力場が提案され，ほとんどの有機化合物に適用できる状況にある。
・クラスター汎関数：二体力項と多体関数の汎関数からなるもので，クラスターポテンシャルで出来なかった化学反応を含む系にも適用できるポテンシャル関数である。例えば代表的なクラスターポテンシャルであるTersoff ポテンシャルは，炭素のSP^2 とSP^3 の両方の結合に対応できるポテンシャルで，ダイヤモンドとグラファイトの相転移を再現するのに使われている。さらに，共有結合と金属結合の両方を記述できるCGP ポテンシャルのような量子力学的効果を入れたものも提案され，SiやC のMBE やマイクロクラスターのシミュレーションに適用されている。パラメータが決められている原子(Si,C,As,Ge,Gaなど)はまだ少ないが，構造・物性とも実験値を良く再現すること，また方法論が確立されていることから，今後，他の原子についてもパラメータが急速に決められるであろう。
(b)分子間相互作用：液晶のシミュレーションのように，数十から百個の原子からなる分子を数百個必要とする計算の場合に，計算時間を節約するために用られている。分子内の原子数がM個の場合には，分子間ポテンシャルを用いることにより，約M^2倍高速に実行できる（M=100 ならば,1万倍分の１の時間で計算できる)。代表的なポテンシャルとして，Gay-Berne ポテンシャルがある（以下,GB ポテンシャル）。GBポテンシャルでは，分子は回転楕円体で表される。その関数形は，LJ型であり，そのパラメータは異方性を持っている。

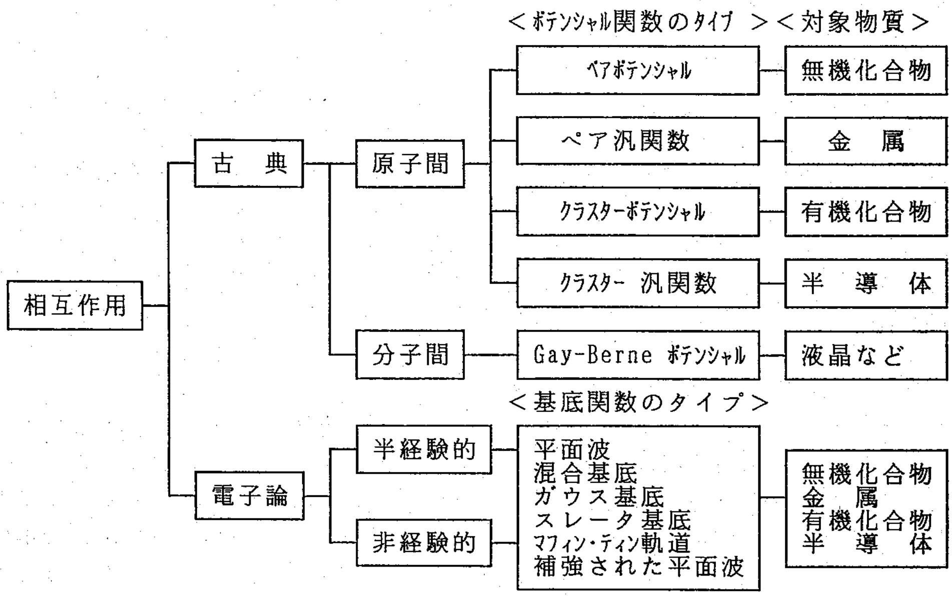


図２．相互作用の種類

(c)電子論的力：多体系のシュレディンガー方程式の近似式であるHartree-Fock方程式又はKohn-Sham 方程式を解いて得られた電子密度を用いHellmann-Feynmanの定理から求められる。この力は，Car-Parrinello法（量子分子動力学法）の出現により，始めて実用的に使えるようになった。現在までに，基底関数に平面波を用いて，Si,C,Ga,As,Na,S,SiO_2などの固体や液体に応用されている。最近，混合基底を用いてd 電子を含む原子への適用や非

経的方法に比べて数十倍高速である半経験的方法(MNDO,CNDOなど)を用いた量子分子動力学法による有機化合物への適用も始まっている。

4．炭素同素体への応用

Chelikowsky は分子動力学法を用いて，核形成の種を入れないで，プラズマ状態のＣクラスタから直接，C_{60}の核形成ができることを示した[5]。Ｃは一重，二重，三重といった多重結合性を持つ。従ってＣの相互作用を表すポテンシャルは，周りの環境を考慮し，さらに表面力など量子力学的な効果を入れた多体力でなければならない。Chelikowsky はそのようなクラスター汎関数ポテンシャル（ダングリング・ボンドによって生成される強い表面力を含んでいる）を提案し，用いた。初期条件として，大きな箱（12A の立方体）の中に60個のＣをランダムに配置させ，固体炭素の融点よりはるか上の7000K を初期温度に設定してシミュレーションを開始し，20psの間に7000K から1000K に冷却した。すると6000K で短い鎖が形成され,5000Kでは長い鎖が形成され，同時に枝分れが始まる。4000K になると六角形のリングが形成され，2000K まで下げると，フラーレンが形成された。

また，Cheng とKlein [6] は，固相中でのC_{60}分子の再配向を分子動力学法で調べた。C_{60}を剛体として扱い，分子間ポテンシャルには，原子－原子間のLJポテンシャルの和から求めたものを用い，アンサンブルにはNHP が用いられた。 83.4Kから340.3Kまでの温度でシミュレーションが行われ，200K以上の温度では，C_{60}は自由回転子のように振る舞い200K以下では，C_{60}の回転は止まり，ある特定の構造に凍結されることが見いだされた。この相転移の存在は熱測定，Ｘ線回折,NMRから得られているおり，実験事実を再現した。

炭素同素体の分子動力学シミュレーションは，C_{60}の他にも，ダイヤモンド基板上でのMBE による結晶成長[7] やダイヤモンドに近いbc8 構造からグラファイト構造への相転移[8] など材料科学的に重要な研究が行われている。また，最近筆者らは，グラファイト基板上でのC_{60}のMBE のシミュレーションを行い，(4×3)構造の薄膜が形成されることを明らかにした。

5．おわりに

材料科学の強力な道具になるであろう分子動力学法の最近の技術的進歩及び最近の話題となっている応用例について述べてきた。最近の応用の傾向として，現実の材料を意識した研究例が多い（紙面の都合上，その多くの研究例を紹介出来ないのは残念である。興味ある方は筆者まで照会されたい）。まだ，材料科学への応用は入口にさしかかったところであるが，計算手法とコンピュータのさらなる発展は近い将来，この方法の適用をさまざまな物質に拡大し，コンピュータによる材料設計を可能にするかもしれない。いま確かに言えることは，分子動力学法は，材料科学において実験を補助する一手段としての地位を徐々にではあるが，着々と固めつつあるということだ。

【参考文献】

(1)M.P.Allen and D.J.Tildesley,‘Computer Simulation of Liquids ’,1989, Calarendon
(2)岡田勲，大澤映二編：『分子シミュレーション入門』，海文堂，1989年
(3)三上，第２回計算化学シンポジウム予稿集，1992年５月，東京
(4)M.Tuckerman and B.J.Berne, J.Chem.Phys.,97,1990(1992)
(5) J.R. Chelikowsky, Phys. Rev. Lett., 67,2970(1991)
(6) A. Cheng and M.L. Klein, Phys.Rev. B 45,1889(1992)
(7) H.P. Kaukonen and R.M. Nieminen, Phys. Rev. Lett., 68,620(1992)
(8) D.B. Boercker, Phys.Rev. B 44,11592(1992)

部 会 行 事

第５回情報化学夏期セミナー報告

姫路工業大学　中野英彦

今年で第５回目となる情報化学夏期セミナーを、８月２６・２７日の両日、兵庫県赤穂市において開催し、２日間の日程を無事終了することができた。利用した宿泊施設の赤穂ハイツは、瀬戸内海に面した岬の先端近くの小高い丘の中腹に位置しており、窓からの眺めの大変良いところであった（しかし、昼間はスライド映写のため窓を暗幕で締め切って、びっしりと講演がつまっていたので、受講者にその眺望を堪能して頂けなかったのが残念であるが）。

セミナーの副題は、今年も第３回以来の「情報化学・基礎と応用」を踏襲し、下記のプログラムの演題で、それぞれの講師の方々に講演して頂いた。いずれも、情報化学・計算化学における中心的なテーマであり、入門的・基礎的なお話を主として、それに現在講師の方々が取り組んでおられる先端的な話題を加えた講演は、参加者にとって有益なものであった。

夕食時のフリートーキングにおいては、参加人数が講師を含めて２８人と比較的少なかったので、参加者全員に自己紹介を含めて、本セミナーへの参加の動機などを話して頂いた。一応全員に発言していただくことが出来たが、宴会場の時間制限の厳しい公的施設のため、それ以上の突っ込んだ議論は出来なかった。しかし、その後はそれぞれの部屋に戻って、遅くまで歓談の花が咲いたもようである。

上述のように、今回のセミナーは講師を含めた参加者が２８人と、例年に比べて小人数であった。それも、最初「化学と工業」や CICSJ Bulletin に掲載された締切日を延長し、電話等で各方面に参加を呼び掛けた結果にもかかわらずである。その理由の一つとして、赤穂と言う場所が関東地区の方から見れば遠方であって、参加が困難だと思われたことも一因かも知れない（８時頃東京発の新幹線を利用すれば参加可能であり、実際に参加された方も有ったのであるが）。その他に今回の特殊事情として、日本化学会近畿支部主催の、ワークステーションを使用した計算化学に関する講習会が、期日が比較的接近した７月に大阪で開催された事があげられる。

この催しはワークステーションを実際に使用した講習会として人気が高く、予定を上回る申込者があった。これは、泊まり込みの夏期セミナーとは必ずしも趣旨を同じくするものではないが、参加者の層において競合した事も否定できないであろう。今後もこの種の催しが増えてくることが予想され、この分野が一般の化学者の認知を得てきた結果である事は情報化学部会としても喜ぶべきことである反面、今後の夏期セミナーの在り方について再検討することも必要になるかも知れないとの印象を持った。

最後に、講師の先生方を始めとしてご協力頂いた多くの方々に感謝の意を表します。

プログラム

第１日（８月２６日）

午後

1	化学構造知識ベースの構成	（関学大）	岡田　孝
2	分子力学計算法の基礎	（京大・理）	今城　文雄
3	分子軌道計算法の基礎	（兵教大）	木原　寛
4	分子グラフィックス	（システム）	伊賀　祐一

夕食後

フリートーキング

第２日（８月２７日）

午前

5	コンピュータを用いた農薬のデザイン	（住友化学）	高山　千代蔵
6	蛋白質工学における蛋白質設計	（蛋白工学研）	中村　春木

日本化学会情報化学部会

第４回ケモメトリックスワークショップ

－　ユーザー・ソフトメーカー・測定機器メーカーの３サイドフォーラム　－

主催　日本化学会情報化学部会
共催　日本化学会・日本分析化学会（予定を含む）

ケモメトリックスは、高度化した測定機器とコンピュータ技術の進歩に支えられ、数学および統計学を背景として、化学に情報の概念を導入して、誕生した比較的新しい分野です。データ解析・処理の手法を解明する理論的な基礎研究が必要なことは言うまでもありませんが、いろいろな方面で多彩な応用を展開するには、使いやすくて、有能なソフトウェアの普及が不可欠です。そのために、ユーザー、ソフトウェアメーカー、測定機器メーカーの３者が、それぞれの立場から情報交換を行う機会が必要だと考えて、本ワークショップを企画しました。ケモメトリックスを有効に活用したいとお考えの方をはじめ、大勢の皆様のご参加をお待ちしています。

日　時　　平成５年２月８日（月）　10:30 - 17:45
会　場　　（社）日本化学会　化学会館　（〒101 東京都千代田区神田駿河台 1-5 ）
プログラム

10:30 - 10:40	開会
10:40 - 11:10	測定値の不確かさのFuzzy回帰法による取り扱いと定量分析への応用（東大工)○北森武彦・下坂琢哉・澤田嗣郎
11:10 - 11:40	たばことケモメトリックス　(JTたばこ中央研究所)榊　武志
13:00 - 13:30	SPSSによる機器分析データの多変量解析（エスピー・エス・エス㈱）小川博明
13:30 - 14:00	ニューラルネットワークを使ったシステム開発　(ニチメンデータシステム㈱)清水昇一
14:00 - 14:30	FT-NIRによるパターン認識手法と製造現場におけるその利用（ブランルーベ㈱)福士　真・○桜井香織
14:30 - 15:00	FT-IRへのケモメトリックスの応用　－多変量解析による複合有機材料の測定－(㈱パーキンエルマージャパン　技術開発部)新見　栄
15:00 - 16:30	デモンストレーションとミニ懇親会
16:30 - 17:00	C-13 NMR化学シフトデータのPLS解析（福島高専)石山純一
17:00 - 17:40	(特別講演) Novel Kalman filtering techniques in chemometrics (Toyohashi Univ. Tech.) Z. Li
17:40 - 17:45	閉会

参加費　　３０００円（当日受付にて）
参加申込み　名前，所属，連絡先，電話及びFAX を明記の上、郵便又はFAX(藤枝宛)で、
〒112 東京都文京区大塚2-1-1 お茶の水女子大理学部化学教室　藤枝修子
(電話03-3943-3151 内線562 FAX03-3942-2815)へ、1月25日までに。

部会記事

開かれた情報化学部会へ

ＣＩＣＳＪ編集副委員長
豊橋技術科学大学
宮下芳勝

情報化学部会は大澤映二先生を会長として新しい体制で発足した。新会長は本誌５月号に「情報化学部会の新しい問題」と題して部会の活性化をいかにするかを中心に会長としての抱負を語っておられる。幹事会では具体的な活性化の方策を探った結果、まず日本化学会春季年会講演申込分類番号一覧の「２２,化学情報•計算機化学」の細目を大幅に改訂した。化学と工業１０月号をお読みの方の中には、このことに気付かれた方もあると思う。

さて今年度の部会活動として夏期セミナーが８月２６、２７日に赤穂で開催された。今後は１１月２５～２７日に京都で情報化学討論会が開催され、さらに１２月９日には「化学者のためのパーソナルコンピュータ利用講習会」が予定されている。また、来年の２月８日に東京で第４回ケモメトリックスワークショップが開催の予定となっている。

ところで私自身も第２回ケモメトリックスワークショップのお世話をした経験があるが、参加者の半数近くが非部会員であったことに驚いた。これは情報化学に興味をもつ人が必ずしも我々の部会員ではないことを示しており、ワークショップを開催することが”開かれた情報化学部会”へと変化させる一つの有効な方法であることを示唆している。従って部会の活性化のため会員以外の方も積極的に参加できる、情報化学の新しい動向や展開に関するワークショップの開催を勧めます。

部会としてはニュースレターＣＩＣＳＪを皆様にお届けしていますが、最近非部会員の方からのニュースレターに関する問い合わせが増えており、編集関係者としては大変喜ばしいことと思っています。今年のＣＩＣＳＪは五つの特集を組むことができました。来年もドラッグデザイン等の特集を企画しております。今後、開かれた情報化学部会のために、皆様の御意見をＣＩＣＳＪにお寄せください。

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.〇一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

ＭＯＬ－ＭＯＬＩＳ，ＣＲＹＳの概要

ダイキン工業（株）
電子機器事業部　技術部
佐野　均

１．はじめに

昭和６２年３月に３次元分子設計支援システムＭＯＬ－ＧＲＡＰＨを発表して以来、医薬、農薬、素材分野、蛋白質・遺伝子工学分野等のユーザーにＭＯＬ－ＧＲＡＰＨを幅広く利用されています。

また、昭和６３年４月にはユーザー会を設立し、会員による研究発表やバージョンアップ計画の検討、国内外の技術動向調査を目的として活動してきました。

ＭＯＬ－ＧＲＡＰＨは、ユーザー要望を取り入れた年２回のバージョンアップで、全ての分野で、汎用的に利用できるシステムになりました。

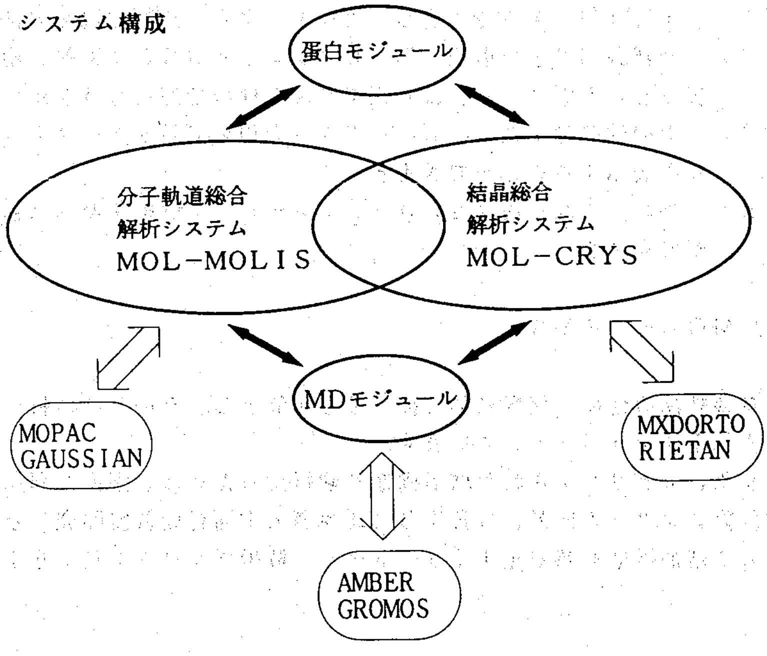
その一方、専用分野に特化した使い勝手のよいシステムをユーザーから望まれるようになりました。

そこで、ダイキン工業では、ＭＯＬ－ＧＲＡＰＨの開発で培ったノウハウをもとに、下記の新しいシステムを開発しました。（図－１参照）

◇分子軌道総合解析システム　「ＭＯＬ－ＭＯＬＩＳ」
◇結晶総合解析システム　　　「ＭＯＬ－ＣＲＹＳ」

以下に、これらのシステムの概要を説明します。

図－１　システム構成



2．システム概要

2.1 MOL－MOLIS

低分子・素材分野での研究開発時に基礎的手法としてよく用いられている分子軌道法の代表的ソフトウェアであるＭＯＰＡＣを使用して、その計算結果から得られるさまざまな知見を、研究者に分かりやすく理解できるように開発されたシステムです。

このシステムは反応機構の解析に重点を置き、ＭＯＰＡＣが計算した反応解析へのいろいろな角度からの理論的アプローチの莫大な結果を整理し、分かりやすくビジュアル化できるようになっています。また複雑な反応計算の実行が、３次元グラフィッククワークステーションの機能をフルに生かして容易に行えるよう配慮されています。

たとえば、遷移状態の探索や反応経路のトレースなど、反応機構の解析に欠かせない情報を研究者に分かりやすく視覚化する事ができます。そのほか、分子の振動解析や各種スペクトルの予測など分子軌道法を行って得られる情報をくまなく生かしたシステムとなっています。

特徴

（１） 分子軌道法計算プログラムの中で最も良く利用されている代表的ソフトウェアＭＯＰＡＣとのインターフェイスをとり、反応解析実行時に特に複雑となる入力ファイルの作成作業を容易に行う事ができます。

（２） 遷移状態の探索や反応過程の追跡など、反応機構の解析時に、重要な知見となる事柄を研究者に分かりやすくビジュアル化します。

（３） 反応途中の原子間結合の強さの変化を表示する事により、反応に関与する原子や置換基を探索する事ができます。

（４） 原子に働く力を表示したり、その力に相当した動きをアニメーション化することにより振動解析を行う事が可能です。

（５） ＩＲスペクトルを予測し、実験データとの比較し構造の推定ができます。

（６） 非経験的分子軌道法計算プログラムＧＡＵＳＳＩＡＮを用いて分子軌道図の表示を行う事により、より正確な反応性の把握を行う事ができます。

（７） その他の分子軌道計算プログラムを用いてＵＶスペクトル、ＮＭＲスペクトルを表示することができます。

（８） モンテカルロ法などのコンフォメーション解析を使った初期候補構造の抽出ができます。

2.2 MOL－CRYS

有機結晶の他に、無機結晶を扱う事を可能とし、そのための特有なモデリング方法や表示手法をサポートしています。

また、モデリングされた結晶構造を解析するために、国内で利用者の多い分子動力学計算プログラムＭＸＤＯＲＴＯ（北海道大学河村助教授開発）とＸ線回折データを使って結晶構造を精密化するリートベルト解析プログラムＲＩＥＴＡＮ（科学技術庁

無機材質研究所泉博士開発）との操作性の良いインターフェイスを持ちます。その計算結果のビジュアル化をリアルタイムに行うことにより効率の高い研究のサポートを行います。さらに、Ｘ線、中性子線などの回折パターンの出力も行うことができます。

特徴

（１）　空間群による対称操作を行い、単位構造のモデリングができます。結晶への分子の挿入や格子欠陥構造も扱うことができます。
（２）　無機結晶構造を把握するための多面体モデルの表示、ミラー面の抽出や他の結晶を重ね合わせることが可能です。
（３）　多くのユーザを有する北海道大学の河村助教授開発された結晶の分子動力学ソフトウェアＭＸＤＯＲＴＯを用いた構造解析が可能です。
（４）　構造変更に連動したＸ線粉末回折パターンの表示が可能です。
（５）　科学技術庁・無機材研究所の泉先生が開発されたリートベルト解析プログラム「ＲＩＥＴＡＮ」を用いて、モデリングされた構造と実験データを比較して構造を精密化することが可能です。
（６）　Ｘ線、中性子線などの回折図形の表示が可能です。
（７）　結晶と低分子のドッキングシミュレーションが行えます。

２.３ ＭＯＬ－ＭＯＬＩＳ／ＣＲＹＳの共通機能

（１）　原子数に制限のないモデリング
（２）　２次元スケッチングでのモデリング
（３）　１２分子の同時表示
（４）　選択したコマンドの階層表示
（５）　操作途中での別コマンドへの移動
（６）　プレゼンテーション用の簡易ドローイング
（７）　理論化学計算プログラムとのインターフェース（表－１参照）
（８）　蛋白モジュール（オプション）
　　　生体高分子のモデリング・解析機能
（９）　ＭＤモジュール（オプション）
　　　ＡＭＢＥＲ，ＧＲＯＭＯＳインタフェースをサポートし、計算結果のアニメーション表示が可能

２.４ プラットフォーム

◆ＣＯＭＴＥＣ　４Ｄ　Ｓｅｒｉｅｓ
　ＣＯＭＴＥＣ　４Ｄ　Ｃｒｉｍｓｏｎ　Ｓｅｒｉｅｓ
◆ＩＲＩＳ　４Ｄ　Ｓｅｒｉｅｓ
　ＩＲＩＳ　Ｃｒｉｍｓｏｎ　Ｓｅｒｉｅｓ
◆ＩＢＭ　ＲＳ／６０００　Ｓｅｒｉｅｓ

３．おわりに

ＭＯＬ－ＭＯＬＩＳ／ＣＲＹＳは、操作性のよかった従来のＭＯＬ－ＧＲＡＰＨのさらに上をいく操作性になっています。また、充分なサポート体制をとっており、ユーザー要望をとりいれたユーザーとともに発展していくシステムです。
詳細をお知りになりたい方、またはデモをご覧になりたい方は下記までご連絡ください。

問い合わせ先　：　ダイキン工業（株）電子機器事業部　営業部　営業４課　若尾
ＴＥＬ　０３－３３４４－８１４７
ＦＡＸ　０３－３３４４－８１１３

表－１　サポートしている理論化学計算プログラム

NO			MOL-MOLIS	MOL-CRYS	蛋白ﾓｼﾞｭｰﾙ	MD ﾓｼﾞｭｰﾙ
1	ＭＭ	MM2	○	○	－	－
2		MM2prime	○	○	－	－
3		MMP2	○	○	－	－
4		BIGSTRN3	○	－	－	－
5		ECEPP2	－	－	○	－
6	ＭＯ	MOPAC	○	○	－	－
7		GAUSSIAN 90	○	－	－	－
8		CNINDO/74	○	－	－	－
9		MNDOC	○	－	－	－
10		EXTHC	○	－	－	－
11		CINDO/SHIFT/UV	○	－	－	－
12		FORTICON8	○	－	－	－
13		CNDUV99	○	－	－	－
14	ＭＤ	MXDORTO	－	○	－	－
15		AMBER	－	－	－	○
16		GROMOS	－	－	－	○
17	ＮＭＲ	3JHH	○	－	－	－
18		LAOCN5	○	－	－	－
19		FINITE	○	－	－	－
20		NMRCINDO	○	－	－	－
21	結晶	PCK83	－	○	－	－
22		MCA	－	○	－	－
23		RIETAN	－	○	－	－
24	その他	PSI/77	○	－	－	－
25		MS	○	○	－	－

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
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	
DAYLIGHT	アダムネット	※デイライトケミカルインフォメーション					
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、フラットフォーム機能	VAX、VMSシリーズ	約180万円(ユーザー限定)	92年1月	
Daybases	〃	〃	THOMデータベースの管理機能		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、ホモナ大学レオ教授開発		約90万円		
POMONデータ	〃	〃	約2,700件の化合物の活性炭、構造のデータ		約81万円		
PCmodels	〃	〃	CLogP-疎水性(オクタノール/水の分配係数)LogPの計算。CMR-分子の屈折率(分極率)の計算	UMXシリーズ、Sun sparc他	個別相談	92年1月	
Thor	〃	〃	データベースにアクセスし、構築したり、編集したり、データ入力が可能	〃	〃	〃	
Merlin	〃	〃	データベースの中の構造の一覧表を作成。与えられた構造、又はパターンの上位、下位構造の検索	〃	〃	〃	
Castor	〃	〃	構造検索のフォームを使用し、同位元素掌性、互変異性、構造検索を完全サポート	〃	〃	〃	
Discover	菱化システム、三菱商事、アダムネット	※BIOSYM	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。コンソシアムで吟味した精度の高いポテンシャルエネルギー関数を使用	IRIS、ESV、VAX、CONVEX、ALLIANT、FACOM、IBM、CRAY	1,350万円～	87年9月	
Insight II	〃	〃	一般低分子からペプチド、たん白質、核酸等の生体高分子、合成高分子等の分子システム全般を対象とする分子設計用三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、RS6000、ESV	690万円～	87年4月	
DMol	〃	〃	局所密度汎関数法によるAb initio分子軌道法プログラム。計算精度が高く、有機化合物・金属クラスター・無機物にも適用可能	IRIS、ESV、IBM、CONVEX、FACOM、CRAY	1,400万円～	89年3月	
Del Phi	〃	〃	生体高分子等の静電ポテンシャル計算プログラムで、非線形型Poisson Boltzmann方程式の数値解を求める。分子及び溶媒のイオン強度、誘電率を考慮した計算が可能	IRIS、RS6000、ESV	1,000万円～	89年4月	
Homology	〃	〃	X線結晶構造解析された相同たん白質の三次元構造に基づき、その構造ホモロジーを活用して一次シーケンスのみ既知のたん白質モデリングを行うプログラム	IRIS、ESV、IBM	850万円～	90年4月	
Open Interface	〃	〃	三次元グラフィックスプログラム Insight IIに、ユーザー独自の外部ソフトを組み込むインターフェース	IRIS	100万円	91年7月	
POLYMER	〃	〃	合成高分子の物性推算及び分子設計のためのプログラム群	IRIS、RS6000			
QSPR			構造式とデータベースから、構造と物性の相関関係を求めるプログラム				
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				
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				
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				
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				
Interphases			DillのLattice法を用いてInterphaseの物性を求めるプログラム				
Apex	〃	〃	QSARによる化合物の薬理活性予測プログラム	IRIS	1,100万円～	92年7月	
Ludi	〃	〃	酵素活性部位の三次元分子構造に基づいてリガンド設計を行うプログラム	IRIS	600万円～	92年7月	
触媒・吸着コンソシアム	菱化システム	〃	機能材料用の実用的な分子設計ソフトの開発を目的としたコンソシアム。会員にはソフト入手権のほか利点が与えられる。現在会員募集中			91年4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評価、改善を目的としたコンソシアム。現在新会員募集中			90年10月	
ポリマーコンソシアム	〃	〃	ポリマー用の実用的な分子設計ソフトの開発を目的としたコンソシアム			89年7月	
EOMコンソシアム	〃	〃	電子、光学、磁性材料用の実用的な分子設計ソフトの開発を目的としたコンソシアム			92年7月	
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。各種文献より80,000件の反応を厳選、収録	VAX、IRIS、NEC、EWS-4800、HP、SUN、Macintosh	1,400万円 600万円	87年 91年	
CHEMICS	〃	電子科学	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。オプションプログラムとしてNMRシフト予測、MASSスペクトル予測可能	VAX、HP、IRIS、SUN、NEC、EWS-4800、TITAN、PC-98シリーズ	EWS版350万円 PC版115万円	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	

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
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、HP9000、DEC station5000	637万円～	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	〃	1,092万円～	89年4月	
Professional PolyGraf	〃	〃	各種物性値を算出するためのPolyGrafのサブモジュール。Phase Diagram、振動解析などの7つのモジュール		182万円～	92年11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	〃	546万円～	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	〃	410万円～	92年4月	
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、TITAN、IBM、HP	300万円～	91年4月	
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、IRIS、HP	161万円	92年11月	
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）	
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
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				
ISIS	〃	〃	分散処理型統合化学情報管理システム	サーバーマシン…VAXシリーズ クライアント…Macintosh、IBM－PC(PC-9801)		91年11月	
ISIS/Desktop	〃	〃	パソコン用化学(化合物、反応式)情報管理システム	Macintosh、IBM-PC(PC-9801)		91年11月	
ISIS/Draw	〃	〃	パソコン用化学反応、構造式作画ツール	〃	10万円	91年11月	
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	〃	米モレキュラーシミュレーションインク	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ーシリーズ、、クレイ、IBMパワーステーション、コンベックス		87年3月	
X-PLOR	〃	〃	X線及びNMR情報を用いた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、IBMパワーステーション		87年3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	

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
ISIS/Draw	富士通	MDL社	化学構造式/反応式作画システム。化学式を作成する「化学構造式/反応式作画機能」と一般図形を作成する「スケッチ機能」から構成	FMR、FM-TOWNS PC98、Mac	10万円	92年10月	
ISIS/Desktop	〃	〃	化合物/反応情報管理DBシステム。化学構造式/反応式作画の(ISIS/Draw)と化合物反応情報の登録・検索・出力(ISIS/Bsae)から構成	FMR、FM-TOWNS PC98、Mac		91年11月	
ISIS/Host	〃	〃	統合化学情報管理DBシステム。化合物情報(MACCSⅡ)、反応情報(REACCS)、化合物の物性・活性情報(RDBⅡ)を統合的に管理。ISIS/Desktop必須	Mシリーズ VPシリーズ	2,800万円～	91年11月	
MACCSⅡ	〃	〃	化合物情報管理システム。化合物に関する種々のデータベースを統合的に管理し、高速に検索することが可能	Mシリーズ VPシリーズ	2,500万円～	83年11月	
REACCS	〃	〃	反応情報管理システム。反応式や反応条件に関する種々のデータベースを統合的に管理し、高速に検索することが可能	Mシリーズ VPシリーズ	1,600万円～	85年5月	
ANCHORⅡ	〃	富士通、呉羽化学工業	三次元分子設計支援システム。分子計算の入力と系統的な解析を専門家だけでなく、実験化学者にも容易に行えることを目的としたシステム	Sファミリ(Sun)	800万円	92年10月	
ADAPT	〃	富士通、ペンシルバニア州立大学	パターン認識による構造活性相関(分子構造と活性/物性/毒性/スペクトルなど)研究支援システム。構造式から180種類の数値データを創出可能	〃	600万円	92年6月	
EMIL	〃	富士通	リード化合物構造展開支援システム。有機研究者の思考様式にそって、優れた活性プロフィールが期待される候補化合物の構造を提示する	〃	200万円	92年6月	
KAMELO	〃	〃	化学データハンドリングシステム。スプレッドシートにより化学構造式を中心とした種々の情報を一括表示し、研究者間のコミュニケーションを支援	〃	300万円	91年4月	
Crystruct	〃	〃	結晶構造設計支援システム。仮想結晶構造のモデリングや各種構造解析を行う。超伝導物質や強磁性体などの新材料設計を強力に支援	〃	180万円	90年9月	
MASPHYC	〃	〃	計算材料設計支援システム。分子動力学等のシミュレータおよび結果の解析機能等から構成。半導体、セラミックス、液晶材料等の設計を支援	Sファミリ(Sun) VPシリーズ	300万円 1,000万円	92年5月	
FROENS/MT	富士通、富士ファコム制御	富士ファコム制御	材料開発支援システム。実験依頼から測定作業に至るまでの膨大なデータの整理と解析機能を提供	Sファミリ(Sun)	未定	93年7月	
LATOX-F	富士通、富士ファコム制御	富士ファコム制御	薬物安全性試験システム。医薬品開発時に実施される安全性試験を「GLP基準」で実施。一般毒性試験・生殖試験・特殊毒性(癌原性)試験をサポート	Sファミリ(Sun)、FMR	2,500万円～	92年12月	
BIORESEARCH/DB	富士通	富士通	配列DBハンドリングシステム。各種の配列データベース中からキーワード検索およびホモロジー検索によって高速かつ正確に必要なデータを抽出	Sファミリ(Sun)	80万円	92年10月	
BIORESEARCH/AE	〃	富士通、京都大学	アラインメント専用配列エディタ。アラインメント(特に複数配列のアラインメント)を強力に支援する専用の配列エディタ	〃	40万円	91年8月	
BIORESEARCH/SQ	〃	富士通	配列付加情報解析システム。配列DB中に記述してある配列付加情報(Feature Table)を配列データに反映させてグラフィック表示。配列の切り出しが可能	〃	40万円	92年10月	
BIORESEARCH/SINCA	〃	富士通、遺伝学研究所	分子進化学解析システム。遺伝子または蛋白質配列情報より、生物の進化の過程を「進化系統樹」として表示。進化系統樹の編集が可能	〃	40万円	91年1月	
BIORESEARCH/SM	富士通、富士ファコム制御	富士ファコム制御	配列情報編集システム。遺伝子や蛋白質に関する各種実験データをグラフィカルに編集・操作・管理。レポート作成やユーザーDB構築などの作業に有効	〃	100万円～	92年10月	
BIORESEARCH/PR	富士通	富士通	モチーフDBハンドリングシステム。モチーフDB(PROSITE)に登録されているモチーフ情報によって、配列中のモチーフ分布の解析や配列DB検索を行う	〃	40万円	92年10月	
BIORESEARCH/3D	〃	富士通、京都大学	蛋白質立体構造解析システム。蛋白質立体構造DB(PDB)についてその立体構造を三次元グラフィックス表示し、各種の立体構造解析を行う	〃	180万円	91年8月	
BIORESEARCH/3M	〃	富士通、九州大学	蛋白質プレモデリングシステム。蛋白質立体構造DB(PDB)をベースにしてポイントミューテーションを行い、構造改変のシミュレーションを行う	〃	80万円	92年10月	
BIORESEARCH/SODHO	富士通、ビジネス・エクステンション	富士通、遺伝学研究所	相同性アラインメントDB。GenBank™⇒アミノ酸翻訳⇒ホモロジー分類⇒アラインメントの一連の作業をスーパーコンピュータで解析した付加価値型DB	MS-DOSマシン、Sファミリ(Sun)	6万円	91年11月	
CHEMTERM/MM-MO	富士通	富士通	パソコン用の理論化学計算システム。コンピュータ・ケミストリの入門システムとして教育等で利用	MS-DOS マシン	30万円	89年11月	
G³TERM	〃	富士通BSC	ソニーテクトロニクス社製のT4105と富士通のF9430型のグラフィックスエミュレータ。Ethernet型LANにも対応	〃	25万円	89年10月	
理論化学計算入門 CALMM2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	理論化学計算プログラム(MM2)の教育用CALシステム	〃	2万4,000円	90年11月	
理論化学計算入門 MOPAC編	〃	〃	理論化学計算プログラム(MOPAC)の教育用CALシステム	〃	2万4,000円	90年11月	
MO解析	〃	〃	MOPACの計算結果を解析するシステム	〃	9万8,000円	90年11月	
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	〃	700万円～ システム価格 720万円～	91年8月	
MOL-MOLIS	〃		分子軌道総合解析システム	〃	700万円	92年9月	
MOL-CRYS	〃		結晶総合解析システム	〃	700万円	〃	
D-MOL	〃	※BIOSYM	局所密度汎関数法によるAbinitio分子軌道法プログラム	〃		〃	
DISCOVER	〃	〃	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	〃		〃	
InsightⅡ	〃	〃	低分子からペプチド、たん白質等の生体、合成高分子等の分子グラフィックスソフトウエア	〃		〃	

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
BIOCES〔E〕	日本電気	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-3シリーズ	月間レンタル75万円	92年7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	90年7月 89年11月	}約2,000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	75万～250万円	92年10月	約500本
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シリーズ	約2,000万円～	87年12月	18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	EWS、WS	800万円	89年3月	65システム
MOELMATE/LEAF MODELMATE/LEAF/WS	〃	日立製作所	独自のLEAF(LINKAGE of EMBEDDED ATOMIC FIELDS)ポテンシャルをベースにした分子軌道法。遷移金属を含む系など多様な解析対象に適用が可能	HITAC Sシリーズ、Mシリーズ、EWS、WS	180万円～(S、Mシリーズ) 8万円～(EWS、WS)	92年2月 92年3月	3システム 5システム
MODELMATE/DVX2	〃	〃	実験値を使用せず電子数などの原子固有のデータから多原子系の電子構造を解析できるSシリーズ向けの分子軌道計算プログラム	HITAC Sシリーズ	180万円～	92年2月	2システム
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 92, 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。SIMULATED ANNEALING法でペプタイドモデリングを実現	SUNシリーズ、HP Apollo9000シリーズ、IBM RS/6000、Apollo DN 10000	180万～1,000万円	87年7月	

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
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)		
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)		
GENETYX-IN	〃	〃	核酸配列入力、DNAフラグメントサイジング装置。核酸配列フィルム映像パターンを自動的に核酸塩基情報として入力		48万円(ハード含む)		
GENETYX-PLOT	〃	〃	遺伝情報図形処理。DNA、アミノ酸配列解析で必要なKbP単位の結果を一紙面に出力		30万円(ハード含む)		
GENETYX-ATSQ	〃	〃	DNAシーケンサーや核酸配列入力装置で決定したDNAフラグメントの自動結合・編集が可能		28万円(ハード含む)		
GENETYX-Σ/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	50万円	91年5月	
GENETXY-MAC	〃	〃	マッキントッシュ用遺伝子解析ソフトウエア、核酸マルチアアライメント、たん白機能ドメイン検索など	マッキントッシュ	38万円	91年12月	150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	100本
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	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1.000本 海外2.000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500台 海外650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	国内150本 海外250本
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	15台
P/COMPOSITE	サイバネットシステム	※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	
MOLLIB	情報数理研究所	情報数理研究所	①化学、材料用に特化したグラフィックスライブラリ ②特別なグラフィックボード類やPHIGS等は不要 ③動画からシューディング、ボリュームマッピングまで全てXlib上で可能	カラーディスプレイを持ったUNIX-WS	16万円/ホスト	92年10月	6本
POLYGRAF	帝人モレキュラーシミュレーション	米モレキュラーシミュレーション	ポリマーの分子設計・シミュレーション・解析を行うシステム	IRIS、PS6000、HP700、TITAN、DECstation			
BIOGRAF	〃	〃	生体高分子の分子設計・シミュレーション・解析を行うシステム	〃			
NMRGRAF	〃	〃	NMRデータを用いての構造予測プログラム	〃			
POLARIS	〃	〃	静電相互作用エネルギー評価用プログラム	〃			
CERIUS	〃	〃	無機/有機の結晶化合物設計支援システム。X線回折シミュレーション・電子顕微鏡画像シミュレーション・吸着シミュレーション等が可能	IRIS、RS6000、HP700、TITAN			
ChemistryViewer	〃	〃	計算化学用可視化プログラム	IRIS、RS6000、HP700、TITAN、DECstation、SUNS PARCstation			
QSPR-Polymer	〃	〃	定量的構造物性相関プログラム	IRIS、RS6000			
QUANTA	〃	〃	生体高分子用分子構造作成・グラフィックスモデリングシステム	〃			
CHARMm	〃	〃	分子動力学を用いた、生体高分子設計支援システム	〃			
X-PLOR	〃	〃	高分子結晶構造解析支援システム	〃			

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	510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	130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	150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填、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, IRIS	500万円～	88年11月	55本
POLYGRAF	〃	米国モレキュラーシミュレーション	ポリマー設計支援システム。独自の力場パラメータを用いたメカニクス、ダイナミクス計算により高分子の構造や物性のシミュレーションができる	IRIS, IBM, RS/6000	1,050万円～	92年4月	
CERIUS	〃	〃	無機/有機の結晶化合物、設計支援システム。X線回折シュミレーション、電子顕微鏡画像シミュレーション、吸着シミュレーション等が可能	〃	モジュール販売 500万円～	92年4月	
PC/GENE	〃	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-9081シリーズ, IBM PC/XT, AT, PS/2互換機	84万円	90年10月	海外含め 1,700本
GeneWorks	〃	〃	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	90万円	91年10月	海外含め 800本
METABOLELXPERT9.2	フジシステムリソース	ハンガリー・コンピュードラッグ	有機化合物の構造式を入力することにより、化合物の可能性のある代謝物を予測する。知識ベースには、著名な文献より選択した500以上の代謝ツリーを含む。	IBMPC/AT, PS/2, PS/55	390万円	92年8月	
HAZARDEXPERT1.2	〃	〃	毒物学上の知識と最新のQSAR情報とAI技術を統括して、化合物が生物に与える悪影響(毒性、危険性など)を予測・評価する	〃	390万円	92年8月	
HPLC-METABOLEXPERT9.2	〃	〃	予測したそれぞれの代謝物のHPLCの保有時間を有機相の濃度やPHの必要な変換とともに算定する	〃	390万円	92年8月	
AGRO-METABOLEXPERT9.2	〃	〃	METABOLEXPERTの機能に植物生理学の形質転換反応の濃芸化学知識ベースを組み込んでいる	〃	390万円	92年8月	
PROLOGP4.2	〃	〃	有機化合物のlogP値を化合物の構造式に基づいて予測する。3種類のセグメント・データベースを新たに組み込み、的確な計算値を迅速に提供できる	〃	78万円	92年8月	
ELUEX2.0	〃	〃	検査される化合物の化学構造だけに基づいて、PRC―18カラム用HPLC方式を迅速かつ効果的に開発するための専用ツールである	〃	85万円	92年8月	
SYBYL Basicモジュール Advanced Computation モジュール Biopolymerモジュール	住商エレクトロニクス	米トライポス	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 立体配座解析、量子力学計算、分子動力学計算等 たん白質、核酸等の生体高分子操作	VAXシリーズ、IRIS4D、INDIGO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	
QSARモジュール			合成高分子構造活性相関操作			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	
ALCHEMYIII	〃	〃	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、INDIGO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、INDIGOシリーズ、ESVシリーズ、RS6000シリーズ	150万円	91年9月	
BOSS	〃	〃	有機分子モデリング、溶媒中の複合、活性計算	IRIS4D、INDIGO、VAX、SUN	約300万円	92年2月	
MM2(91)/MM3	〃	〃	分子力場法による分子構造の決定	IRIS4D、INDIGO、VAX、IBM社(MM2(87))	370万円	92年2月	
NMR TRIAD	〃	〃	多次元NMRデータ分析結果の画像出力、及び3次元構造の決定	IRIS4D、INDIGO、VAX、ESV	約1,000万円	92年9月	
3DB UNITY	〃	〃	ケミカル・ベータベースの3次元検索システム	〃	約1,200万円	92年6月	
PROTEP	〃	〃	たん白質の構造類似探索プログラム。シェフィールド大学ウィレット教授開発	IRIS4D		92年8月	
RECEPTOR	〃	〃	ファーマコフォア高速計算プログラム。ワシントン大学ダムクーラー教授開発	ISIS4D、IBM、ESV、SUN		92年6月	
Mac Molly®Tetra	アロカ	独ベルリン自由大学	DNA・プロテイン解析ソフト。シーケンス入力・編集から比較・結合、マルチプルアライメント、PCRプライマー部位検索、プラスミド作図、データベース検索などの機能を持つ	マッキントッシュ	80万円		
ChemWindow	東京化成工業	米ソフトシェル社	化学構造式作図用ソフト。リングやボンドなど基本的なツールが用意されており、マウスを使った簡単な操作で短時間に美しい作図ができる	NECPC-9801シリーズ	3万7,000円	90年9月	
ChemInotsh	〃	〃	ChemWindowの機能の他に自分自身のツールが登録できるなど、多種類の機能が追加されている。また、ChemDrawのデータと互換性がある	Macintoshシリーズ	8万5,000円	92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
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	
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)32万５,500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)23万5,500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 Wineow GUIを用い、最新のMITHRIL91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 ＩＲＩＳ	600万円 700万円 700万円	91年４月 90年４月 92年３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	ＣＯＭＴＥＣシリーズ ＩＢＭ社/ＲＳ6000シリーズ	400万円～	89年10月	
SPARTAN	〃	米ウエーブファンクション	非経験、半経験法の分子軌道法計算プログラム。原子番号54(Xe)までの分子の作成、計算、結果の表示が簡単に行える。３次元グラフィックス表示	ＳＧＩ社/ＩＲＩＳシリーズ、ＩＢＭ社/ＲＳ6000シリーズ	450万円～（アカデミック・ディスカウントあり）	90年６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	９万8,000円	89年１月	20本
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	92年７月（予定）	
TOPIQUS	〃	〃	各種たん白質関連データベースを効率的に運用し、たん白工学研究者を支援する高速検索システム。マッキントッシュをクライアントとして採用し、操作が容易	サーバ：SUN、HP クライアント：Macintoshシリーズ	45万円	92年７月（予定）	
Chem3D v3.1	ヒューリンクス	米ケンブリッジサイエンティフィック	分子の立体構造描画ソフト。2,000個以上の原子からなるモデルの作成表示が可能。ボール＆スティック、シリンダー、スペースフィル図など表現力も豊か。ＳＹＳＴＥＭ7対応になった	マッキントッシュ	９万5,000円		
Chem3D Plus v3.1	〃	〃	Chem3D v3.1のカラー版で、MM2によるエネルギー最小化機能、モレキュラーダイナミックス機能付加	〃	17万円		
Chem Draw3.0	〃	〃	化学用グラフィックツール。マウスだけで化学構造式などが簡単に描ける。反応メカニズムシンボル、ローンペア、ラジカル、陽イオン、ラジカル陰イオン等の新機能に加え、ＭＯＬＦＩＬＥフォーマットのファイルの読み書きが可能。ＳＹＳＴＥＭ7に対応	〃	11万8,000円		
ChemDrawPlus3.0			ChemDraw3.0のカラー版。ChemDraw同様、SYSTEM7に対応。		13万8,000円		
ChemFinder			ChemFinderは化合物を集めたユーティリティーホルダーで、ビルトインするとChemFinderがフォルダ内の化学構造式を名前、ＩＤナンバーやコメントなどで自動的に捜し出すというもの。ＳＹＳＴＥＭ7対応		９万5,000円		
ChemOffice3.0			ChemDraw,ChemFinder,Chem3Dのバンドルセット		21万8,000円		
ChemOfficePlus			ChemDrawPlus,ChemFinder,Chem3DPlusのバンドルセット		33万5,000円		
SPARTAN(Ver.2)	ＣＲＣ総合研究所	米ウエーブファンクション	３次元グラフィックインターフェースを備えた非経験的および半経験的分子起道法プログラム	ＩＲＩＳ４Ｄシリーズ ＩＢＭ ＲＳ6000シリーズ	450万円	92年10月	
GEMS/MD	〃	ＣＲＣ総合研究所	分子材料を主対象とした汎用分子動力学コード。液晶、アモルファス高分子、界面（気液、液液）のシミュレーションが可能	ＩＲＩＳ４Ｄシリーズ、ＨＰ9000シリーズ、ＩＢＭ ＲＳ6000シリーズ	300万円	91年11月	
GEMS/PREP	〃	〃	分子モデリング。ＭＯＰＡＣの分子起動、振動表示、ＭＤアニメーション機能。MMによる構造最適化機能	ＩＲＩＳ4Ｄシリーズ	30万円	91年４月	
PRO-EXPLORE	〃	仏バイオストラクチャー	蛋白質のモデリング、相同性解析	ＩＲＩＳ４Ｄシリーズ	660万円	93年１月	
PRO-SIMULATE	〃	〃	分子動力学法ＧＲＯＭＯＳ用インターフェイス	ＩＲＩＳ４Ｄシリーズ	660万円	93年１月	
PRO-QUANTUM	〃	〃	分子軌道法ＭＯＰＡＣ、ＣＡＤＰＡＣ用インターフェイス	ＩＲＩＳ４Ｄシリーズ	660万円	93年１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
MOLDA&GRIM MVer5.15/5.1J	サイエンスハウス	広島大学 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	5万2,000円(5.1)、5万8,000千円(5.1J)	89年2月	250本
3D-Molmaster I	〃	山形大学 阿部昭吉	化学者が使い慣れた2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やグラフィックソフトとのリンク可能	〃	7万8,000円	89年8月	30本
3D-Molmaster II	〃	〃	スペクトル解析システム。NMR、IRなどの実測データを読み込み、不適当な分子式を削除し、有力候補分子式の検出へ。分析化学者と同じ思考過程で同定	〃	4万2,000円	92年11月	
3D-Molmaster III	〃	〃	スペクトルの予測計算システム。同定結果から算出した予想スペクトルと実測値を検討。より確かな分子構造同定をサポート。3D-Molmaster I とのリンク可能	〃	4万2,000円	92年11月	
MODRAST-E	〃	姫路工業大学 中野英彦	上記2種の分子設計支援システムをもとに、高精細な分子グラフィックスを行う。上位システム並みのスペースフィル図表示可能。3次元ソリッドモデラー	〃	5万8,000円	87年8月	120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	〃	7万8,000円	87年11月	30本
PC版MM2	〃	東京大学 吉村仲	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	〃	2万8,000円(民間)、9,800円(公共)	86年6月	125本
MOLDA-S	〃	広島大学 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	〃	1万8,000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	5万8,000円	90年10月	15本
MMHS-ex	〃	群馬大学 中田吉郎、藤沼一信	分子の設計からコンホメーションの解析そして、シェーディングつきの立体模型表示まで、分子設計のための各種計算を一つのパッケージで提供	PC—9800シリーズ	5万8,000円	92年5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 PC-98XL² PC-98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—H98シリーズ	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(V6.0)を、32ビットパソコンに移植したプログラム	PC—9801シリーズ(32ビット) PC—98XL² PC—H98シリーズ	19万円	89年11月	
パソコンMOPAC/386 (拡張モジュールV)	〃	〃	基本プログラムとの組み合わせでMOPAC(V6.0)のESPを除く全機能に対応、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	IRISシリーズ	150万円	90年10月	
Constrictor	〃	〃	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オメトリ法のプログラム	IRISシリーズ VAXシリーズ SUN Spark-Stationシリーズ	150万円	90年10月	
Asp	〃	〃	"bioisosterism"の概念を論理的に定量化した"Similarity index"を計算することにより、複数分子の類似性を求めるソフトウエア	〃	150万円	90年10月	
PC—Asp	〃	〃		PC—9801シリーズ(32ビット)	19万円	91年6月	
Cobra	〃	〃	知識データベースとAI手法の組み合わせで安定配座群を探索し複数の初期構造を生成するソフトウエア	IRISシリーズ VAXシリーズ SUN Sparkシリーズ	200万円	92年6月	
PC-Cobra	〃	〃		PC—9801シリーズ(32ビット)	25万円	92年6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 Quadraシリーズ	25万円	90年10月	
Pimms	〃	〃	3次元分子モデリングシステム。力場計算、動力学計算、部分電荷計算の解析プログラム内蔵。また、Asp、Cobra、Constrictorとのインターフェース完備	IRISシリーズ	290万円	91年6月	
Python	〃	〃	データ処理(表作成)、統計処理、表示機能が全て一つのシステムでできる構造活性相関プログラムです。HanschとLeoの置換基データベース内蔵	〃	250万円	92年7月	
Iditis	〃	〃	PDB(Protein Data Bank)をリレーショナル化し、SQL言語で検索できるようにしたプログラム	IRISシリーズ	350万円	92年8月	
CAChe(キャッシュ)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CAChe Scientific.Inc.	3次元(立体)分子設計モデリング・システム。Macintoshの直観的操作でMOPAC、ZINDO、拡張MM2等の計算および結果の視覚化ができる	MacintoshII f シリーズ(ci/cx/fx)、Quadr900/700、PR88プロセサボード	183万8,000円〜	91年4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 〃 〃	5万8,000円 17万円 35万円	89年4月 86年5月 87年11月	

MEETINGS

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).

28 March-2 April 1993.
205th ACS National Meeting.
Denver, CO.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

13-17 June 1993.
3rd Scandinavian Symposium on Chemometrics.
Arhus, Denmark.
Contact: SSC3 Secretariat, Department of Chemical Technology, Danish Technogical Institute, Teknologiparken, DK-8000 Arhus C, Denmark. Tel. :+45 86 142400; Fax: +45 86 147445.

August, 1993.
Gordon Conference on QSAR.
Tilton, NH.
Contact: Alexander M.Cruikshank, Gordon Research Conferences, Gordon Research Center, University of Rhode Island, Kingston, RI 02881-0801(401-783-4011;FAX:401-783-7644)
22-27 August 1993.
206th ACS National Meeting.
Chicago, IL.
Contact: American Chemical Society, Meetings Dept., 1155 16th St., NW, Washington,DC20036(202-872-4396).

5-11 Sept. 1993.
Euroanalysis Ⅷ. European Conference on Analytical Chemistry.
Univ. of Edinburgh, Edinburgh , UK.
Contact: Miss P.E. Hutchinson, Analytiacal Div., The Royal Society of Chemistry, Burlington House, Piccadilly, London W1VOBN, UK. Tel. :+44 71 437 8656; Fax: +44 71 734 1227.

文献紹介

〔コンテンツリスト〕

JOURNAL OF MATHEMATICAL CHEMISTRY

☐ July 1992, VOL.10, NO.1-4.

☐ Sept.1992, VOL.11, NO.1-3.

JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION

☐ Aug. 1992, VOL.69, NO.8

JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND COMPUTER SCIENCES

☐ VOL.32, July / August, 1992