The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	結晶学におけるman-machine-material network
Author(s)	角戸, 正夫
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1975, 17, p. 31-37
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65271
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

結晶学における man-machine-material network

大阪大学蛋白質研究所　角　戸　正　夫

1．主題について

この題目は去る3月24日，阪大計算機センター主催のネットワーク研究会にユーザーの一人として私が講演するつもりで出したものであった。誠に不本意ながらやむをえぬ理由で出席不可能となり，講演の方は工学部助教授・安岡則武理博に代役していただいたのであるが，講演の突然の代役を御願いした上に書きものまで御願いするわけにはいかず，といって当日の安岡氏の話の内容を正しく御伝えする筆力もないので，とに角題名はそのままにして，当日の安岡氏に御願いした話の内容をも含め，その他とりとめなく日常考えていることなどを書きつづってみた。

さて，ここに言う manとは結晶学または回折結晶学を主とする研究者のことで，machine とはこれらが使用する回折機器や interface, computer を指し，さらに materialとはこれらの研究対象たる物質を意味している。

次に networkであるが，以前我々のグループで情報処理の研究会をやった時に，東大竹田弘氏が man-machin interface という題で話をされた。この interface とは通常の computer用語の機器ではなく，この場合は結晶解析の実行手順の各段階を正しく能率よく実行できるように結晶学者と計算機の対話形式で仕事を進めてゆく方式を開発するもので，各段階のプログラム群と人と物とを linkするための独自の言語（CL/1と称す）が実はこの interfaceの意味であった。このプログラム作成のとき安岡氏がなにげなく“interaction”と書いたのであるが，私はその内容から見て interactionの方がずっと意味が深く適切だと感じていた。その後本研究会の私の話の題を決めるとき，この言葉を借りようかとも思ったが，またもなにげなく“network”と磯本氏に伝えてしまった。以上が事の真相で，この話は本来の computer network というよりも，三者の interactionつまり相互作用であり，もっとくだけて言えば，結晶学における“人と物と機器”という三題話なのである。

2．結晶学における計算機の位置について

一般に粒子線（電磁波）の回折現象を解析して，結晶中の原子の立体位置を決める方法，つまり結晶解析学が生まれてすでに60年近くになる。すなわち M·V·Laneが1912年X線の結晶による回折現象を発見して以来，第1期1930年までに主な鉱物，金属の原子配列が，またその後

1960年頃までを第2期として多くの有機化合物の分子構造が解明されてきた。そして1960年に至って，それまでやや使い古された方法論として残っていたこの結晶学が忽然として息を吹き返し，今世紀後半の科学の大発展の一つである生命科学に火をつける原動力となった。すなわち，生命を代表する蛋白質や核酸という重要物質の構造がEDSAC-MARK II を用いて決められて以来この分野は全く生まれ変わったように威力を発揮しはじめた。この大きい変革はここで結晶学の人と物との間に電子計算機が今一つの主役として重要な仲間入りをしてきたことに始まった。一般にある一つの科学や技術があるほんの一部の発見や発明から急速に発展することは歴史的にもそう珍しいことではない。しかし結晶学における電子計算機の参加は，このような過去の例とはやや異質の大きい進歩を促した。すなわち筆算，ソロバンやタイガー計算機の速度から何100万倍速くなったという単なる計算の速さだけのmeritはむしろ小さく感ずるほどにこの分野の本質的な思想の変化をも促すようになったのである。戦後電子計算機が出現するや英米の結晶学者が真先に取り着き，その後の計算機の進歩にも寄与しながら，ぴったりとくっついてきたという歴史がそれを物語っている。終戦間もない昭和25･6年頃だったと思うが，当時電気もガスも休日の多かったある日の理学部・仁田研究室のコロキュウムで，物理教室の助教授野口照雄理博（現在興亜石油社長）が米国ペンシルバニア大学より帰国されてX-RAC（二元フーリエ合成のアナログ計算機）の話をされたことが私共の計算機との出合いで強い印象として残っている。特にこのペンシルベニア大学は電子計算機の誕生地であり，Eckerが1946年世界で最初に電子管（実に約2万本の真空管を使用した）を利用したENIACを試作したところでもある。その後の発展についてはいうまでもないが，我々日本の研究者が使用できるようになったのはそれより数年後となった。阪大の結晶学グループでいえば，IBM650，704，NEAC-2203，2101，IBM709，7044，7090，NEAC-2230，2206，HITAC-5020，FA-COM-60，NEAC500，700，……等，およそ使用できるものは東京まで泊りがけで出向いて使ったものである。実はこの長い計算機とのおつき合い20年の歴史が，数少ない日本の結晶学の研究者を結び合わせ，又，次に述べるこの結晶解析のプロセスの全部にわたっての数十種に達する各段階の計算のプログラムが共同で作られ，貯えられ，その自由使用が行われて，今日まで実に見事なman-machine networkが形成されている。この美しいinteractionは科学の他の分野では一寸見られない我々の誇りである。特に理研桜井博士らによる東大センター・UNICS-I及びII，名大芦田教授（元阪大）らによる阪大センター結晶解析ユニバーサルプログラムシステムなど多くの業績を残してきた。

3．結晶解析の方法について

この結晶解析の方法は，内容は異なるがちょうど無機分析化学のように，一見して見事に系統化されるほど整理のよい研究分野である。図1にその全容を示しておいたが，この系統表示はそのままるで計算プログラムのフローチャートを見るようである。ただしこのプログラムフローチャートの中には“material”と，熟練した結晶学者たる“man”とが介入しており，単純

な algorithm ではないことに留意されたい。

X線が結晶に入射すると，material-wave 相互作用によって散乱され，その振巾は，

$$F=\sum f_j \exp\{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)\}$$

となり，その $|F|$ は実測される。F のフーリエ変換は結晶中に周期配列した電子集団の密度分布 $\rho(xyz)$ となり，

$$\rho(xyz)=\sum_h\sum_k\sum_l F(hkl)\exp\{2\pi i(hx+ky+lz)\}$$

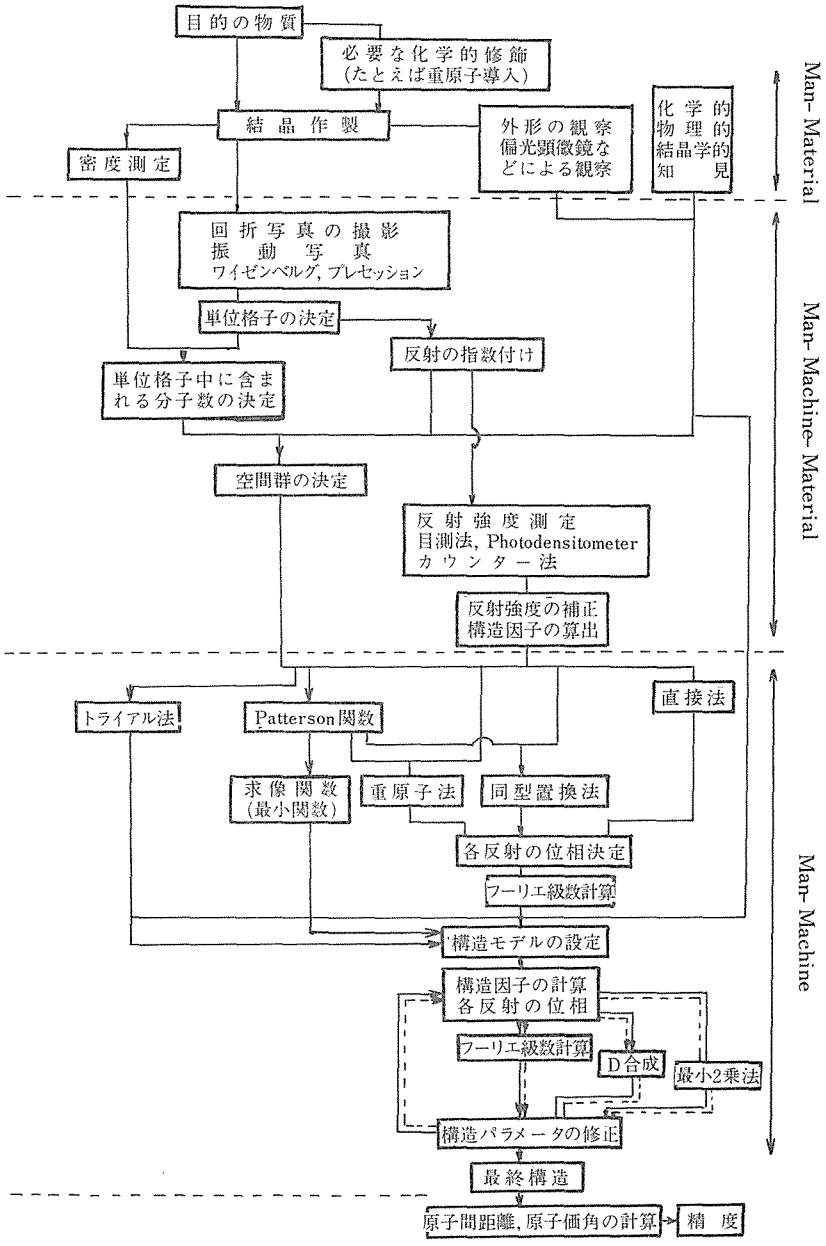

図1　結晶解析の系統図

により ρ を算出すれば結晶中の原子の立体配置を解析することができる。ただし，F は複素数であり，一般には物理的方法で観測されないため，実測の $|F|$ の集団のすべてについてその適切な「原点」を決め，正しい「位相角」を与えてやらなければ前記計算ができない。結晶学とは正にこの「位相角」を決めるということに直接間接に何らかの関連をもつ学術分野であると極言できるのである。これを一層よく理解されるよう図2を示した（理研・桜井氏による）。$|F|$ から F への点線の道はけわしい，というより60年の歴史をもつこの分野の研究でまだ決定的な道が発見されていないのである。結晶学はも早や完成された学問だと思われる人も多少あるようだが，全世界の I·U·Cr 関係数 1,000人の結晶学者はこの $|F|$ から F への道を作るため努力を続けているのである。

結晶学における次の難問は，取り扱うデータ量が漠大なことである。解析の全体の手順としてはほんの一部である $\rho(xyz)$ の計算だけをとってみても，たとえばある直方体空間の各稜を100等分した格子点の座標を用いた $\rho(xyz)$ の計算を行うためには100万個の点についてそれぞれ回折 $|F|$ の数（h, k, l の組の数で普通は数1,000個）だけの項数からなるフーリエ級数の求和を行うことになり，数十億から百億回以上の計算回数を要し，しかもこの計算は理論的判断を介して何回も繰り返し行われる。さらに言えばこの一連の計算ですら全プロセスにおける数値処理の量からはほんの一部にすぎないのである。一度でも解析を実行した人なら，この分野の仕事がいかにやっかいなものであるか痛感されるに違いない。しかもそれは誰かがやらなければならないという一種の使命感と，解析の過程の困難を克服して解明を遂げる勝利感とに支えられて，少数ではあるが現在の日本の結晶学は世界の第一級の仕事を続けているのである。なおこれら数1,000個の $|F|$ はすべて実測であり，これを補正し，選択するという前段階がある。今日はこの前段階も自動化され，material-machin の完全 on-line システムによって信頼出来る $|F|$ 集団が得られるようになった。

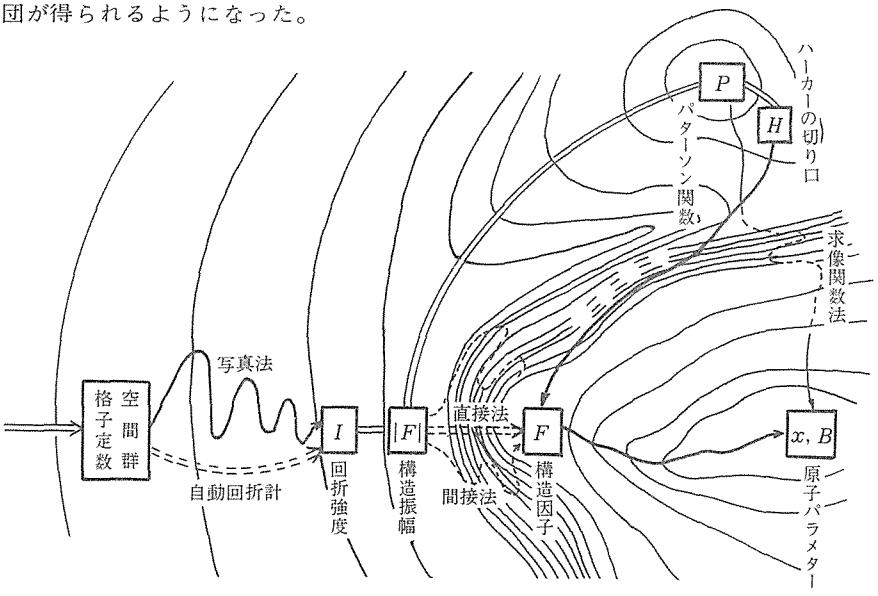

図2　構造解析への道

4. Algorithm と Heuristic

さて結晶学には前述の数値処理の他にまだ更にやっかいな問題がある。すなわち現在の物理学・化学の実験による測定値というものはほとんどの場合1次元的か2次元的量であるのに対し，結晶学においては徹底して3次元量の処理である。それは研究の性質上のことで，至極当然のことと思われるかも知れないが，この当り前のやっかいさが実は大部分の物理屋・化学屋にとって“結晶学を嫌う”共通した原因ともなっているのに驚く。クロスワードと組木細工を解く場合の困難さは単に2乗と3乗の比ではなく，人間の思考力における3次元への盲点の深さを痛感させられるに違いない。言い換えれば数値解析的な“algorithm”と人間の直観感覚によるいわゆる“heuristic”との間の溝の深さである。前にも述べた結晶学における man-machineの相互作用には単なる四則演算の速度以上のものを期待してきたとの意味が理解されるかも知れない。たとえば，マチスとルナールの絵の区別，ワグナーとモーツアルトの曲の区別は私ですら直ちにつけられる。もっと近い所でいえば，結晶の外形を一見しただけでその晶系は大体わかる。しかしながら現在の計算機では2次元の絵画ですらその絵のもつ意義はもちろんその作者すら判定して呉れない。heuristic とは science ではなく多分に個性的な technology であるとの考え方もあろうが，これらは必ず何らかの物理学的素量に解析され，新しい普遍的な論理判断が可能であると信じている。この広い意味の pattern recognition こそ現在の結晶学における man-machine-material を結合する“interface”である。

人間の頭脳の働きが，単純な電気的パルスのフリップ—フロップ計数のみによるか，場の強さとか位相など連続性のある量の情報受授が行われているのかはわからないが，その素子の間には極めて複雑な network が存在することは明らかで，次の時代の computer はこの intra-machine network にこそ指向すべきであろう。

5. 結晶解析の完全自動化への道

さて，感覚や意志をもった computer など S・F めいた話は一つの夢としても，現実に結晶解析の全手順の途中で常に必要なあらゆる heuristic judgements を，現在の computer の機能を最高に生かして algorithem に組み込むことによりその出発から終結まで全プログラムを系統的にリンクし，完全に自動遂行するプログラムシステムは可能ではないか。そのような信念が我々グループを引きつけてきた。これは結晶学として一つの理想でもあるが，一つには heuristic の algorithm 化への突破口としても大きい意味を持つのである。長年の経験と深い学識をもつ熟練の結晶学者が行った構造解析と同じことを全くの初心者が実行できるとすればどんなにか諸学への貢献は大きいことであろう。

たとえば将棋の四段か五段の人の技術をすべて computer に覚えこませてしまうことで，このプログラムのできた瞬間に初心者が夢想すらしなかった高段者へ飛び上がり，また同時に四段以下の多くの職業棋士は初心者と同列になってしまう。しかしながら結晶解析が自動化されるときは在来の結晶学者はより高度な解析のための理論的開発へ研究が指向されるにちがいない。

又，将棋の初心者にとってはコンピュータで勝つこと自体よりむしろ打って楽しむことに目的があるのに対し，結晶学の非専門者にとつては解析する過程自体は楽しみでも目的でもなく分子の構造を早く知りたいということが目的なのである。

今，我々グループが目標としている解析自動化の方法は，図2の登山において正面の絶壁をさけて遠回りの大通りを通ってパターソン関数法の山の尾根を通るものであるが，この道にも絶壁が前進をはばんでいるのが図に示されている。パターソン関数法とは，直接位相角を必要とする F を用いないで観測値たる $|F|^2$ を用いたフーリエ変換を利用する方法で，得られるものは結晶空間内の電子密度分布そのものではなく，密度分布の convolution である。この convolution は解析者の判断の介入を必要とせず全く実測値から一義的に得られる貴重な構造情報であり，解析はまずこれを出発点としてその密度分布の求像へ出来るだけ多くの情報を引き出すべきだというのが我々グループの開発する自動化の基本的思想である。この具体的方法についての説明や machine のレイアウトについては他の出版物にも記しているのでここでは省略する。要するにこの絶壁のどこを攻撃するか，どこに釘を打ち，どこへハシゴをかけるかなど登山の途中の観察，思索，実行，後戻り，やり直し，などを系統的に一貫化し，征服への最も安全で確実な道を自からたどりながら最終点に達するプログラムシステムを完成することであった。すでにその一つの道を開くことができた現在，我々グループは一層の勇気をもって次の道の発見にいどんでいるのである。

今試作した完全自動化のソースプログラムに要するカードは数1,000枚に上る。ここまでたどりつくまでに要した計算機使用時間の多かったことは充分御察しいただけると思うが，その一部は阪大センターの研究開発課題として特別時間を与えられたことを特にここで計算センターに対し感謝したい。さらにここで費用のことを言うのも気が引けるが，今までの使用を民間計算機でやれば約1,000万円に上るであろう。

それにしても，仮に1人の結晶学研究者が半年を要してある物質の分子構造を解析したとすると，その費用は人件費だけでも100万円を下らないであろうが，もしこれを自動解析すればC·P·U20分としてもセンター計算機ならわずか1万円で完成するのである。

さらに附言するならばこの分子の構造は，研究者が通常の方法で実行した場合は学術論文として発表されるのが慣例であるが，もし自動解析で実行した時はその論文の“著者”は NEAC-700かプログラム名となるのであろうか？

6．今一度 Network について

日本の回折結晶学者仲間がいかにその研究分野において密接な men-network を組んできたかについては前に述べたが，machine の面でも又，四軸型自動X線回折計という全国一色のものを用いていることや，すべての共用のプログラムによって computer を使用していることなど文字通り見事な man-machine network を形成しているめずらしい学術分野の一つである。そしてこれら研究者集団はあるものは金属へ，鉱物へ，又，天然有機化学へ，生物化学へ物性物理学へ，

さらに合成化学，薬品化学，材料工業へ，など技術畠にまでそれぞれの materialの分類に従って分散しているのである。そしてこれら“materialと人と機器”は常に回折結晶学という一本の共通の幹を頂点として完全に networkされている。研究会の主題たる network の意味を勝手にねじ曲げて結晶学の特殊な集団形成に話を向けてしまったが，実はこのような統一のとれた学術分野にこそ本来の意味の computers networkの完備を最も強く要望するものであることをむしろ了察して頂きたかったのである。

余談になるが，かつて私が非常に親しくして頂いた元日本ユニバックK·K·会長の宮崎清氏がよく Apolo計画の computer network systemとしての重要さを話しておられたのを思い出す。たかが1台のロケットという machineと3人の人間の30万kmの往復旅行のために，その瞬間数万人の人と900台の computerを完全に釘付けにしたのである。有名なヒューストン，ゴダート基地と世界に分散した追跡基地とロケット内の computerは最大24万ボーの回線で完全に network され，毎秒500種の計算と数千の情報が飛び交ったのである。しかも900台の computerのうち⅔は故障時の back upであったと聞き驚くほかはない。

文部省の研究助成課で調査された国公私立大学の実動計算機の数が現在389台であることが学術月報に出ていたが，この中の何台が networkに堪えうるのか誠に心細い話である。このような一般用機の問題は別としても，man-machine-material networkをいつでも実行出来るように十分準備のととのったこの結晶学のグループに対して，この分野共通の machine network system が与えられ，本来の意味の networkが組める日の一日も早いことを我々は本気で待っているのである。

極大の宇宙空間の征服と一方極小の原子の立体構造征服とに共通して computer networkが大きい威力を発揮するものであることも面白いではないか。

最後になったが，データベースについても触れておこう。結晶学の世界と computerの触れ合いについての既に述べた歴史から察せられようが，解析の結果である原子，分子，結晶の漠大なデータ A·Dの computer利用についても他の分野に先んじた。特に CODATAに先取りして，英政府援助によるケンブリッジ大学の結晶データベース（C. C. D. C.）の開発は大きい実績を挙げている。これを受けて我国でも結晶学グループが真先にこの Dataの検索，disseminationの試行を始めた。現在東大センターの非常に熱心な開発，援助を受け，既に本年中に acoustic couplerによる全国へのデーター伝送を開始すべく準備中であることを御伝えしてこの稿を終る。