



Title	T00L-IR利用者の立場から
Author(s)	安岡, 則武
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1976, 22, p. 75-77
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/65317">https://hdl.handle.net/11094/65317</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

# TOOL-IR 利用者の立場から

大阪大学工学部 安 岡 則 武

「コンピュートピア」という言葉が使われたのはずいぶん古のことであるが、その当時、コンピューターのもつ驚異的な計算能力をもとに多くの未来社会像が語られた。行き過ぎると、SF的になるが、コンピューターの発展が科学・技術に大きな影響を与え、発展の契機になった例は、いくらでも探すことができよう。社会もまた大きく影響されていることは間違いないのない事実である。

コンピューターのハードウェアの発達過程を根底にして社会構造の変化していく過程は一般に次の4つの段階を経るといわれている<sup>(1)</sup>。

- 第1段階 大量計算時代
- 第2段階 情報検索時代
- 第3段階 法則性発見時代
- 第4段階 創造時代

単純な反復的事務の大量処理や複雑な技術計算処理をこなすのが、コンピューターの第1の性能であってこれが第1段階にあたる。大容量記憶装置と、オンラインリアルタイムシステムの結合により大量の情報が蓄積され、各種の情報センターが設置されるのが第2段階である。第3段階以降は、いわば未来予測であるが、蓄積された大量の情報の数学的・工学的処理によって各分野で新しい法則が見出され、そしてそれらを基礎に人間の創造的能力が飛躍的に向上していく時代へ移っていく。

大学に共同利用の大型計算機センターが設置されてから、すでに10年余りの年月が流れた。初期にはプログラムを作り計算を行なうことで、それまでよりもずっと早く、質の高い結果を得ることができた。しかし、ターンアラウンドタイムが長く、ジョブが殺到する時期には2週間もかかる有様であり、利用者としてはより大きい計算能力をもつ計算機を導入することが第1の希望であった。

ここ2・3年の各大学計算機センターの充実ぶりは目を見張るものがある。とくに東大センターの HITAC 8800/8700 のシステムは、JOBの即日処理を実現した。われわれの阪大センターでもセンター長をはじめ関係者の御努力で、処理能力は格段の改善を見るところとなり大半のJOBが即日処理されるに至ってきた。さきほど述べた第1段階の大量計算時代はすでに爛熟期に入ったと言えよう。

昭和48～50年度にわたって、特定研究「広域大量情報の高次処理」が実施され、その一

環として、TOOL - IR が開発された。その詳しい紹介は、さきの山本毅雄氏の講演にあつたおりであるが、このシステムを利用して自分の研究に関係のある検索を試みた。その一つの例を次に述べてみたい。

### XDCシステムを利用した Pd-S 結合の検索 三木 邦夫

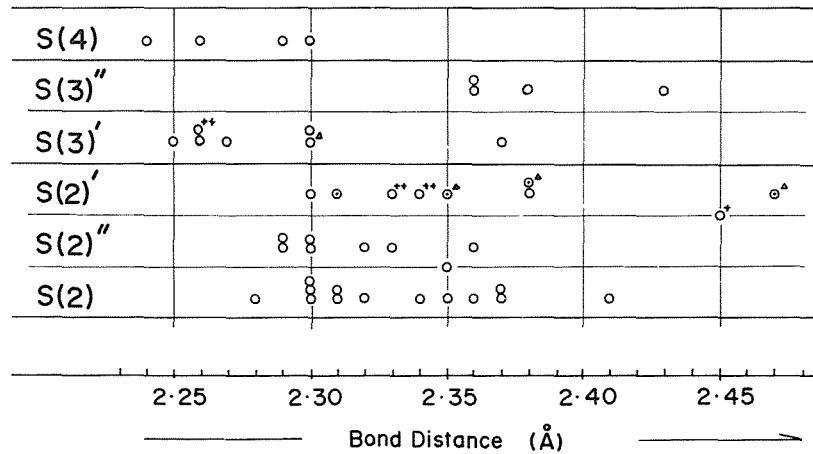
金属 - イオウ結合を有する遷移金属錯体の X 線による構造解析は、数多く行なわれているが、イオウ原子の金属に対する配位挙動は興味深いものがある。

最近、我々がとりあげたこの金属 - イオウ結合を持つ一連のパラジウム錯体に関連して、今迄に解析された Pd-S 結合を有するすべてのパラジウム錯体における Pd-S 結合距離を、TOOL - IR の XDC システムにより検索した。この結果、36 例（昭和 50 年 10 月現在）のパラジウム錯体がみつけられ、これに我々の解析した  $[(\text{Ph}_3\text{P})\text{Pd}(\text{Cl})\text{CH}_2\text{SCH}_3]$  のデータを加えて検討した。

これらの結合距離のデータを、結合の様式によって何らかの分類を行ないたいと考え、まず非常に形式的ではあるが、イオウ原子の配位数（状態）と結合距離との関係を調べてみた（表参照）。横軸に 100 分の 1 Å きざみで結合距離を、縦軸にイオウ原子の配位数（状態）をあらわしている。その分類において S のあとのかっこ内の数字がイオウの配位数を示し、そのあとに何もないものは明らかな結合、プライム（'）がつけてあるものは明らかな配位結合とみなせるもので、またダブルプライム（''）がつけてあるものは σ 結合と配位結合の両方の可能性を有するもの、あるいはその区別の難しいものとした。ただ S(4) に関しては

#### Relation between Coordination Number of S and Bond Distance in Pd-S Bonds

Pd(II) ○ ( ○<sup>†</sup>: Pd(II)<sup>+</sup>, ○<sup>++</sup>: Pd(II)<sup>++</sup>)  
Pd(0) ◎ △: The data are crystallographically doubtful.



単にイオウが4つの原子と結合しているというにすぎない。外見的、形式的な分類であるにもかかわらず、何らかの相関があるようではなかなか興味深い。

ただ、結合距離を知るには、XDCシステムの利用だけでもちろん十分であるが、今回はすべてのものについて一応原報を参照した。それは主に次に示す2つの理由による。第一に、先にあげた分類を行うためには、Pd-S結合距離以外の結合距離、結合角、または原報における著者の議論を知る必要があったということ。第二に、XDC検索からはその距離の精度（標準偏差）についての情報が得られないことのためである。この精度の問題に関しては、PdとSが重原子であるため、ほとんどのものが100分の1Åでの比較には十分の精度を持つと考えられた。

今後、さらによりよい分類法、あるいは他の効果の考慮などを加え、また他の結合にも拡張したりして発展させたいと考えている。（この項 三木邦夫）

これはほんの一例であるが、多くの興味深い事実を教えてくれる。まず、一つの問題について、多くの研究がなされ多くのデータがすでに存在しているということである。これは多くの学問分野すでにそのような状態になっているのに、データの収集や整理が遅れており個人のばらばらな作業で行なわれていることが多い。データの組織化が必要であることが痛感される。第2に、今までのデータを整理すれば、おのずから法則性が見出されてくるということである。それほどに、現在までに蓄積された情報は豊富であり、その体系化が緊急を要することを物語っている。もちろん、各学問分野で、こうした情報の組織化がそれぞれとりくまれているが、TOOL-IRは、その一部を全国の大学の研究者に開放した点で意義が深いと考えられる。

さきの分類で言えば、大学の計算センターも大量計算時代を過ぎて、情報検索時代に入ったと言えるだろう。いろいろな形態がありうるだろうが、情報の組織化が各分野で強力に推進され、多くの検索システムが次々と完成されていくことが予測される。その核として、各大学の計算センターが果す役割に期待したいと思う。そしていかなる学問分野も、多かれ少なかれ、こうした情報検索システムによって発展の刺激を受けることになるだろうと思う。未来を予測することは難しいが、敢えて述べた。

XDCシステムを利用したPd-S結合の検索の仕事は工学研究科石油化学専攻の大学院生三木邦夫君が行ったものです。引用させていただいたことを感謝します。

(1) 長谷川寿彦、梨山修 「情報検索システム入門」 オーム社 1972