OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	研究開発の成果 : NMRスペクトル解析プログラム、LAOCN5の移植と関連プログラムの開発
Author(s)	高木, 達也; 谷, 美香; 村埜, 賢次 他
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1988, 70, p. 161-173
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65792
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

研究開発の成果

ＮＭＲスペクトル解析プログラム、ＬＡＯＣＮ５の移植と関連プログラムの開発

（研究開発課題：分子科学用プログラムの移植と改良）

大阪大学薬学部

高木達也、谷 美香[1]、村埜賢司、清水尚人[2]、平井淳一[3]、藤原英明、佐々木喜男

化学、薬学分野、特に有機化学におけるＮＭＲ（核磁気共鳴）スペクトルの重要性については、今更解説する必要性はないものと思われる。従来、ＮＭＲスペクトルのスピン解析に関しては、ＬＡＯＣＯＯＮ３等のプログラムが公開されており、詳しい解説書[4]も出されていたが、大学の大型計算機センター等での整備、公開が遅れていたために、実験化学系の研究者がすぐに利用すると言う状況にはなかった。今回、我々の研究室で利用されている比較的新しいスピン解析プログラム、ＬＡＯＣＮ５を整備し、更に計算スペクトルをグラフィックディスプレイに表示するプログラム、ＰＩＣを開発したので、公開する。

§１．プログラムの概要

ＬＡＯＣＮ５プログラムは、ＬＡＯＣＯＯＮ３及びＬＡＯＣＯＯＮ４Ａを、Ｂａｒｉ大学のＬ．ＣａｓｓｉｄｅｉとＯ．Ｓｃｉａｃｏｖｅｌｌｉが改良したものであり、固有値固有ベクトルルーチンをＧｉｖｅｎｓ－Ｈｏｕｓｅｈｏｌｄｅｒ法に置き換える等の高速化[5]や、ピーク位置のスペクトルパラメーター依存性が出力される等の改良が行われている。又、計算されたスペクトルデータからグラフィックディスプレイ上にスペクトルを再現するために、スペクトルデータを外部媒体に出力するルーチンが付け加えられている（この部分は、筆者らによる）。ここでは、スペクトル解析の詳細は成書[6]に譲り、プログラムの実際的な使用法について解説する。

ＬＡＯＣＮ５プログラムで取り扱える系は、磁気的に等価な核がない場合は８スピン系まで、磁気的に等価な核がある場合は７グループ、384エネルギーレベルまでとなっている。例えば、以下のような系が計算可能である。

A_3ＢＣＤＥＦＧ系

A_3B_2ＣＤＥＦ系

A_6ＢＣＤＥ系

A_4B_3ＣＤＥ系

但し、スピン１／２の核に限る。

§２．入力例と入力方法

ＬＡＯＣＮ５プログラムの入力例を図１に示す。以下、この入力例に従って解説する。

１）第１行

ＮＧ，ＴＥＸＴ

ＦＯＲＭＡＴ（Ｉ１，３Ｘ，Ａ７２）

①ＮＧ

計算しようとしているスピン系のスピン数。磁気的に等価な核のある場合は、１つと数える。２～８の値をとる。例えば、A_3B_2ＣＤスピン系の場合は、４となる。

②ＴＥＸＴ

７２文字以内でコメントを書くことができる。

```
1234567890123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890123456
4   HISTAMINE IN CD3OD  ( 250MHZ )   ***LAOCON5***  87/09/24
     1     1     1     1                                1     1     1     1
0    9  0.1         0.1
    715.954  715.954  676.630  676.630
      0.0       7.067    7.067
      7.067     7.067
      0.0
    10   20                                         10   20
    30   40                                         30   40
    12                                              12
    34                                              34
    13   24                                         13   24
    14   23                                         14   23
0 0 0 0 0 0 0 0 0
    1     724.33
    5     722.80
   24     717.62
   33     716.70
   38     715.94
   42     715.94
   19     715.94
   20     715.94
   56     710.14
   52     709.22
   28     683.44
    4     682.52
   39     676.57
   47     676.57
   15     676.57
   13     676.57
    6     675.96
   36     675.04
   29     669.70
   53     668.33
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
```

図Ⅰ　　　　　ＬＡＯＣＮ５の入力例（ヒスタミン）

2）第2行

（NNG（J），J＝1，8），（ISO（J），J＝1，8）

FORMAT（16（3X，I2））

①NNG（J）

各々のグループにおける磁気的に等価な核の数。例えば、A_3B_2CDスピン系なら、3、2、1、1と入力することになる。

②ISO（J）

核種別に付ける番号。1～99の範囲に収めること。一般には、原子番号を入力しておくと良い。上の例では、すべてプロトンであるため、1，1，1，1となっている。

3）第3行

NPL，NI，AMIN，WIDTH，DEI，DES

FORMAT（2（I1，3X），2（F5.3，5X），2（F8.1，2X））

①NPL

このversionでは、常に0にしておく。

②NI

Iterationの制限回数を入力する。最大は9である。

③AMIN

ピーク高さの最低値を示す。これ以下の高さのピークは考慮されない。

④DEI，DES

計算されたスペクトルの出力をある範囲内に限定したいとき、その最小値と最大値を指定する。

4）第4行

W（J）

FORMAT（8F10.3）

①W（J）

NNG，ISOでの入力と同じ順序で化学シフトの値をHz単位で入力する。

5）第5～7行

（CC（I，J），J＝I＋1，NG），I＝1，NG－1

FORMAT（8F10.3）

間接結合定数（J）を入力する。順序は、J_{21}、J_{31}、……、$J_{NG\ 1}$の順序になる。上の例では4スピン系であるので、計6個のデータが入力されている。

6）第8～13行

（（JA（IOS，K），JB（IOS，K），K＝1，7），（IA（NOS，K），IB（NOS，K），K＝1，7））

FORMAT（3X，7（I1，I1，3X），5X，7（I1，I1，3X））

値を同じにするパラメーターを指定する。この例では、8、9行がシフト値、10～12行がJ値になっている。例えば、8行目の場合、4行目の順序で1番目のシフト値と2番目のシフト値は、常に同じ値にすることを指定している（ゼロは化学シフトを意味し、10は1の化学シフトの意味である）。又、10行目はJ値、J_{12}とJ_{34}を等しくすることを意味している。この例には漏れているが、右側に値を書かなければ（つまりIA，IBの部分を空白にしておけば）、そのパラメーターは、iterationの間変化させないことを示している。入力の終わりにはブランク行を挿入する。この例では13行目がそれに当たる。

7）第１５～３４行

ＩＬ（ＮＬ），Ｆ（ＮＬ）

ＦＯＲＭＡＴ（Ｉ５，Ｆ１０．３）

iteration を行う場合は、ここで実測スペクトルを入力する。ＩＬが transition number、Ｆが周波数を意味している。ＩＬは iteration を行わない計算で出力された値をそのまま用いる。入力の終わりには、ブランクカードを挿入する。この例では３５行目がそれに当たる。入力できるスペクトルの数は６１５以下である。

8）第３６行

データの終わりを示すためにブランク行を挿入する。

これでＬＡＯＣＮ５プログラムの実行のための入力はすべて終わったことになる。この入力例の実行結果は、ＬＩＢＳＯＵＲＣＥ／ＡＰＰＬＩＣ／ＬＡＯＣＮ５ＯＰという名前のファイルに入っているので、参照して頂きたい。

§３．ＬＡＯＣＮ５の実行方法

プログラム、ＬＡＯＣＮ５は、バッチ、ＴＳＳ双方で実行可能である。

①ＴＳＳでの実行方法

以下に実行例を示す。

```
SYSTEM ?FRT7 N
*LA05
FILENAME ?data-file-name
```

ユーザーは、上記の下線部分のみを入力すれば、自動的に一時ファイルが作成され、計算が実行さ

れる。計算終了後、ＰＩＣプログラムによって計算スペクトルを描くためのデータが格納されている一時ファイルが、１１　という名前で残っているので、これを保存しておきたい場合は、ＣＰＹコマンド等で、永久ファイルに保存しておく。

*CPY 11;file name

②バッチ処理のためのＪＣＬ

1	6	16
$	ＪＯＢ	利用者番号；課金コード$PASSWORD,ジョブクラス
$	ＥＸＥＣ	ＬＡＯ５，，CPU-time，，，SYSOUT-LIMIT
	（入力データ）	
$	ＥＮＤＪＯＢ	

バッチ処理における基本的なＪＣＬは上記のようである。ユーザーは必要に応じて$ＰＲＭＦＬ文を付け加えればいい。プログラムＰＩＣを実行するためには、ファイルコード１１のファイルを保存しておく必要がある。CPU-time の既定値は１（３６秒）、SYSOUT-LIMIT のそれは５０００行である。

§４．プログラムＰＩＣによる計算スペクトルのグラフィック表示

ＬＡＯＣＮ５はバッチ、ＴＳＳ双方で実行可能だがＰＩＣはＴＳＳ専用で、ＮＥＣ　Ｎ６９２２系グラフィックターミナルもしくはＰＣ９８０１系の端末でターミナルプログラムとしてＡＳＴＥＲを使用した場合とＮＥＣ　Ｎ６３００又はＮ５２００系ターミナルで、ＧＣＳの使用が可能な場合に限って使用できる（計算機センターの第一ＴＳＳ端末室や入出力棟の端末がそうである）。その他のグラフィックターミナル（ソニー・テクトロニクス系ターミナル等）では、ソースプログラムのわずかな変更で、使用可能な場合もある。詳細は、センター発行の図形処理利用の手引きを参

照して頂きたい。実行方法は以下のようである。

```
①PIC

②ENTER TERMINAL TYPE, IF CR THEN N6922-TERMINAL.
    1:N6922-TERMINAL OR PC9800(ASTER)
    2:N5200-07WS
    3:END
  ENTER TERMINAL TYPE>1

③DATA FILE NAME ?data file name   （ＬＡＯＣＮ５で装置番号11に指定したファイル）

④  WELCOME TO PICTURE, INPUT HALFWIDTH
    HEIGHT IS MULTIPLIED BY YFAC=  0.219E+02
  I*?0.6      （ピークの半値幅を入力する）

⑤ INPUT POINTS(MAX. 16000, 8192 TYPICALLY) AND MIN
  I*?640,0.01     （端末の実画面のドット数とピークと認識するためのピーク高さの最小値）

⑥  INPUT SCALX0,SCALX,SCALY0,SCALY
   IF SCALX=0 CHART AREA FOR X-AXIS WILL BE SIMULATED
   IF SCALY=0 CHART AREA FOR Y-AXIS WILL BE SIMULATED
  I*?800,-80,,,      （画面のスケーリング。詳細は後述）

⑦  INPUT FACTOR,XINITIAL,YINITIAL
    IF FACTOR=0 THEN DEFAULT VALUE WILL BE
    SIMULATED FOR FACTOR,XINITIAL, AND YINITIAL.
  I*?1.2,1.5,1.5     （画面のスケーリングと原点の位置指定。詳細は後述）

        （チャートの表示が始まる）

  (CR)  （チャートの表示が終了すればリターンキーを入力する）

⑧  INPUT SCALX0,SCALX,SCALY0,SCALY
   IF SCALX=0 CHART AREA FOR X-AXIS WILL BE SIMULATED
   IF SCALY=0 CHART AREA FOR Y-AXIS WILL BE SIMULATED
  I*?(CR)     （リターンキーで終了する）

      CPU TIME= 0.29886 (SEC)
```

順を追って説明することにする。

① コマンド、ＰＩＣで、プログラムが自動的に起動される。この時、ＡＦＴ上に、１１、０５、

０６という名前の一時ファイルがあれば消去されるので注意が必要である。

② 現在使用しているグラフィックターミナルの種類を指定する。Ｎ６９２２，ＰＣ９８０１／ＡＳＴＥＲの場合は１を、Ｎ５２００／０７，Ｎ６３００ＷＳ系の端末でＧＣＳの使用可能な場合は、２を入力する。

③ ここで指定するのは§２で入力例として出てきたファイルと異なることに注意が必要である。

④ ピークの半値幅をＨｚ単位で入力する。すべてのピークの半値幅は同じであると見なされるので、明らかに半値幅の異なるピークがある場合は、ソースプログラムの変更が必要である。ソースプログラムは公開されており、変更も容易である。

⑤ 端末の実画面の横方向のドット数とプログラムがピークとして認識する最小のピーク高さを入力する。例えば、ＰＣ９８０１（Ｅ，Ｆ，Ｍ，ＶＭ，ＶＸ／ＡＳＴＥＲ）の場合は、ドット数は６４０、又、最小のピーク高さとしては通常、０.０１程度が適当と思われる。ドット数に端末の精度以上の値を指定してもかまわないが、当然ながらディスプレイの精度を上回ることはない。

⑥ ＳＣＡＬＸ０，ＳＣＡＬＹ０は、原点における周波数（Ｈｚ）とピーク高さを意味する。又、ＳＣＡＬＸ，ＳＣＡＬＹは、それぞれ横軸、縦軸の１目盛り当たりの増分を意味している。目盛りは全体を十等分しているので、９０ＭＨｚ ^{1}Ｈ－ＮＭＲ用のチャート用紙と同じにしたい場合は、９００，－９０，，，となる。ＳＣＡＬＸが負の値になることに注意して頂きたい。ＳＣＡＬＹ０，ＳＣＡＬＹは、省略すれば自動的に最大のピークが丁度表示できるようにスケーリングを行ってくれるので、通常は省略すればいい。（ＳＣＡＬＸ０，ＳＣＡＬＸも省略すれば、同様に扱われるが、周波数の目盛りは当然ながら、きれいな数字にはならない）。

⑦ ＦＡＣＴＯＲは、画面に表示するチャートの倍率を意味しており、ＸＩＮＩＴＩＡＬ，ＹＩＮＩＴＩＡＬはチャートの原点（左下）の位置を意味している（単位はｃｍ）。このプログラムは全画面を１０ｃｍ×１０ｃｍとみなしており、省略すれば、デフォールト値として、それぞれ１.０，１.５，１.５が代入される。チャートの一部を拡大して見たいとき等に便利である。

⑧　チャートの表示がすべて終わった後、リターンキーを入力すると、⑤に戻る。スケーリングを変えて、続行したいときはＳＣＡＬＸ０等の値を変えて入力すれば、続行できる。リターンキーを入力すれば、終了する。

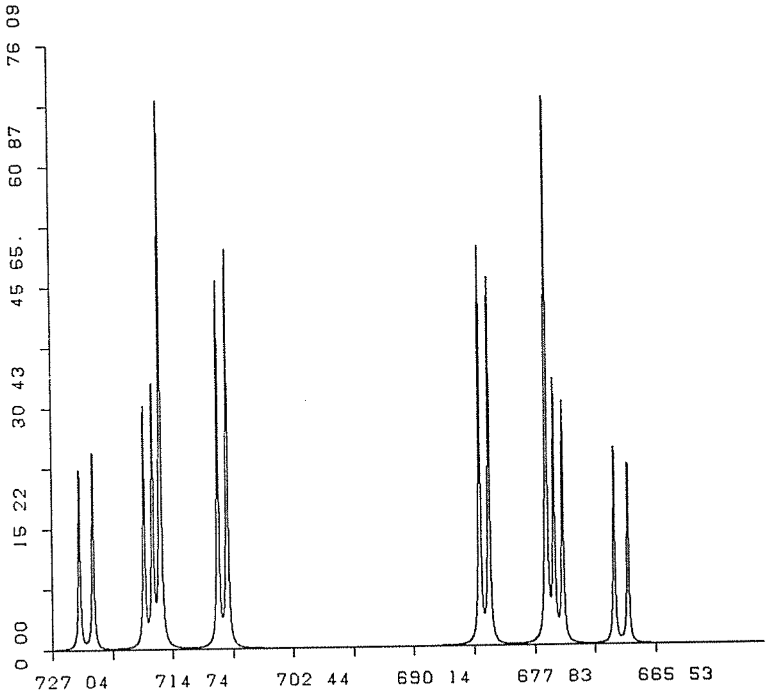

図２　プログラムＰＩＣによる計算スペクトルの表示例

§３の入力例の計算結果をＰＩＣによりグラフィック表示した例を図２に示す。

§５．その他の注意事項

１）ＬＡＯＣＮ５を利用した結果を論文として発表する場合は、ＱＣＰＥルールに従って、以下の

論文を参考文献として挙げていただきたい。

Cassidei L.; Sciacovelli O. QCPE No.458.

2）ＬＡＯＣＮ５は、中間ファイルとしてファイルコード０８、０９の２つの順編成書式無しファイルを使用する。

3）ＬＡＯＣＮ５，ＰＩＣのロードモジュールはそれぞれ

LIB/APPLIC/LAOCN5

LIB/APPLIC/PIC　（Ｎ６９２２用）

LIB/APPLIC/PIC6　（Ｎ６３００，Ｎ５２００／０７用）

という名前のファイルに、ソースプログラムは

LIBSOURCE/APPLIC/LAOCN5SP

LIBSOURCE/APPLIC/PICSP

LIBSOURCE/APPLIC/PIC6SP

という名前のファイルに収められている。ＳＸシステムでＬＡＯＣＮ５の計算を行いたい場合は、このソースプログラムを用いることになるが、ベクトル化率はそう大きくはないので、あまりお勧めできない。

又、入力例及びそれに従った出力例が、

LIBSOURCE/APPLIC/LAOCN5TD

LIBSOURCE/APPLIC/LAOCN5OP

という名前のファイルに収められているので、参考にしていただきたい。

4）不明な点は、筆者（高木）まで、問い合わせて頂ければ、できるだけのサポートを行うつもりである。

連絡先：565 大阪府吹田市山田丘１－６　大阪大学薬学部薬品分析化学教室

ＴＥＬ：06-877-5111　内線6134　又は A62245,X60358 の MAIL.BOX（両番号へ同じ内容を同時に送って下さい）。

§６．最後に

最後に一言、筆者（高木）の意見を述べさせて頂きたい。以下の意見は、連名の共同研究者に共通の意見ではなく、筆者（高木）個人の意見であることをおことわりしておく。

雑誌、「化学と工業」の８８年５月号に、伊藤忠テクノ・サイエンスの鈴木渉氏が、以下のような文章を載せておられる。

「アメリカの大学において開発中および開発された化学関連プログラムの多くはＮＩＨの資金援助により開発、作成され、場合により一つのプログラム開発のために１億円以上の開発資金が支給される。この結果として日米間に化学研究用コンピュータープログラムの格差が生じるのは当然である。」

「意見を述べさせて頂きたい」等と大上段に構えたが、筆者の言いたいことのほとんどすべてがこの文章に出尽くしている感じがする。もちろん筆者は、計算機センターにもっと援助をしろとせまっているわけではない。一計算機センターのできることには限界があるのも、よく理解しているつもりである。今や、計算化学が何の役にも立たないなどと思っている研究者は、ほぼ後を断ったように思う。にもかかわらず、国の取り組み方が、極めてたち遅れているように思われるのである。

筆者には今一つ不満足な点がある。近年、ソフトウェアに関する著作権の問題が、クローズアップされている。ソフトウェアの著作権が、もっと守られなければならないということに異論はない。しかし、国公立大学の研究者が共同利用の計算機センターで開発したソフトウェアに関しては、やや事情が異なるように思うのである。そもそも大学における研究というものは、公開されることが原則のはずである。そのうえ、開発に要した計算機使用料のほとんどは、国民の税金で賄われているのである。アメリカでは、Public Domain Library と呼ばれる、誰が使用してもよいプログラムライブラリーがあると聞いている。計算科学に従事する研究者はもはや、かつてビデオデッキでソニーが演じた

戦略上の誤りと同類の誤りを犯すような事は許されない、と筆者は信じる。ソフトウェアのプライオリティの尊重を前提として、かなり多くの、公開されるべきプログラムが埋もれているのではないだろうか。この文章を読んで、同意して下さった方があれば、＄ＢＢＳコマンド等を利用して、有益なプログラムの公開を行って頂くよう、お願いする。それが、計算科学の発展に直接の影響力を持つと考えるからである。

§７．謝辞

本プログラムの開発は、主として大阪大学大型計算機センター研究開発計画として行われました。本課題を研究開発課題として承認して頂いた、大阪大学大型計算機センター・プログラムライブラリ小委員会に感謝致します。更に、プログラムＬＡＯＣＮ５の公開を許可して頂いたＤｒ．Ｃａｓｓｉｄｅｉ及びＤｒ．Ｓｃｉａｃｏｖｅｌｌｉ、更に、プログラムＰＩＣの開発に際し、種々ご援助頂いた大阪大学大型計算機センターの職員の皆様に感謝いたします。

又、このプログラムの開発は、一部、分子科学研究所電子計算機センターにおいて行われました。計算機の使用を許可して頂いた分子科学研究所電子計算機センターに感謝いたします。

§８．参考文献及び注

１） 現在、大阪大学産業科学研究所

２） 現在、日本新薬株式会社

３） 現在、塩野義製薬株式会社

４） Peter D.F. ed. "Computer Programs for Chemistry" vol.1 W.A.Benjamin Inc., 1968.

５） ＶＡＸシステムでは約３倍高速化されているとの報告がある。

６） 例えば、中崎昌雄、「有機化学者のための核磁気共鳴スペクトル解析」、東京化学同人、1976.