

Title	化学とコンピューター
Author(s)	神戸, 宣明
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1991, 82, p. 31-35
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/65936">https://hdl.handle.net/11094/65936</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

Osaka University

# 化学とコンピューター

工学部応用精密化学科

神戸宣明

センターニュースの編集委員の先生から、本誌への寄稿をお誘い頂いた。私とコンピューターとの付き合いは、学生時代にかの名機NEC PC8001のBASICで少し遊んだ程度であり、現在はMS-DOSにアプリケーションを登録するのが関の山である。最近、分子研の諸熊先生、古賀先生のご指導のもとに、量子化学計算を始めたが、私は有機化学を専門とする実験屋であり、コンピューターについてはソフト、ハードともほとんど知らない。近年、学術面のみならず世の中のいろいろなところに、急速にコンピューターが導入され、その重要性が増してくる中で、化学の分野においてもコンピューターケミストリーが盛んになり、専門雑誌もいくつか創刊されている。私はコンピューターについては素人であり、また化学と一口にいってもいろいろな分野があるため、偏見や誤解、間違いが多いのではないかと危惧しているが、化学におけるコンピューターの利用として、次の6項目についていくつか気のつくことを書かせて頂くことにする。

①分子構造及びエネルギー計算

②グラフィクス

③統計処理

④データベースと情報検索

⑤情報通信

⑥ネットワークの構築

①の代表的な利用法としては、分子軌道法計算がある。これは、パラメータを用いて計算時間を大幅に短縮する半経験的法と、パラメータを用いず、計算のみによりシュレディンガー方程式の近似解を数値的に求める非経験的法とに分けられる。コンピューターの性能向上により、前者はマイコンレベル、後者はワークステーションレベルでの利用が可能となりつつある。分子軌道法計算では、気相中、絶対零度における、分子の構造とエネルギーを求めることが出来る。また、ある状態における数十または数百の分子集合体の個々の分子の運動をシミュレーションする分子

動力学計算やモンテカルロ法も代表的な利用法の一つである。これらの方法により、実験化学的に解明することが困難な反応機構の細かなところまで、あたかも見てきたかのように明らかにすることが出来るし、未知化合物の構造や物性等の予測など重要な知見を数多く得ることが出来る。

このような利用に関しては、現在の計算機の能力はまだ不足している様に思う。私が行っている有機反応に関する非経験的分子軌道計算では、出来る限り30分以内で終了するように、実際の反応よりかなり単純なモデルを用いて計算を行っている。もちろんこれでも重要な結果がたくさん得られるが、計算時間は分子の有する全電子の数の約4乗に比例するため、少し大きな分子を用いるモデルでは、膨大な計算時間となってしまう。まして、実際の反応にしばしば極めて重要な効果を及ぼす溶媒を加えた反応モデルの計算を行うことは現在では不可能であり、実験化学的に得られた結果と直接比較することは困難な場合が多い。そのため、種々の近似法が考案されているようだが、計算を専門としない者が気軽に利用するのはむずかしいのが現状である。この状況も、計算機の処理能力の向上とソフトの改良、新しい方法論の創出等により、実行速度が百倍～千倍程度早くなれば計算機化学的な専門の知識を持たない一般の研究者がすこしは気軽に利用できる状況が整うように思われる。一方、そうなればニーズも飛躍的に大きくなり、計算能力の不足がより深刻になるかも知れないが、廉価な高性能のワークステーションの登場がその一つの救世主となる可能性が大いと思われる。分子研の古賀先生がIBMのワークステーションと日立のスーパーコンピューターS820について、GAUSSIAN 88プログラムを用いて処理能力を比較しておられたが、ワークステーションでのCPU時間は8倍程度かかるものの（これは計算の種類と分子の大きさに依存する）、計算結果を得るまでの実行時間はTSSで複数のユーザーが使用しているスーパーコンピューターとほとんど変わらないし、ジョブ待時間を考えるとシングルユーザーのワークステーションの方が早い場合が多いのではないかと結論であった。

計算機センターにおいても、全てを大型コンピューターで処理するのではなく、例えばワークステーションを百台程度揃え、大半のジョブをそちらで行い、超高速処理と広大なメモリーを必要とする特殊な計算のみ大型機で行うシステムへの移行を積極的に推進する必要があるように思える。この場合、ユーザーに使用機種を意識させないジョブコントロールが望ましいし、OSの違いやプログラムの移植など

専門的な問題は大きいと思われるが、ワークステーションの高性能化、低価格化が急速に進むと予想されることから、その有効利用はコストパフォーマンスからみて非常に重要であろう。また、研究室単位でワークステーションを備えるところも徐々に増え、ルーチンの利用のかなりの部分がパーソナルユースのワークステーションに移るかも知れない。

②は、上記の分子軌道計算やX線構造解析結果などを入力データとして、分子構造、分子軌道等をコンピュータグラフィクスにより表示するものであり、分子の反応性の予測及び説明に極めて有用である。特に、その機能が特異な立体構造に起因する酵素などの複雑な生体高分子をCRT上でリアルタイムで回転させ、任意の方向から3次元表示させることなどは、構造解析の重要な研究手段となる。

化学における統計処理の利用例としては、生・薬理活性と化合物の構造についての構造活性相関があげられる。現在、新しい医薬品や農薬の開発には、数万に及ぶ化合物のスクリーニングが必要とされているが、化合物に含まれる置換基の立体的及び電子的効果と、必要とされる機能との相関関係をいくつかの化合物について求め、それを基に目的とする機能を有する最適構想を予測することにより、実際にスクリーニングする化合物数を絞り込むことが出来る。これは、新規医薬開発の効率化に不可欠の手段として、既に広く利用されている。

④は、データベースの作成とそれを用いてのオンライン検索サービスの提供に大きく分けられる。いずれにおいても、わが国は欧米に大きく遅れているが、情報提供に対するニーズは高い。私のいる研究室では、日本、アメリカ、ドイツにセンターを持つ国際ネットワークSTN International に属するCAS Online サービスをよく利用する。これはアメリカ化学会作成の化合物ファイル(Registry File: 1千万余りの化合物を収録、毎週7千~1万4千件追加)と化学文献ファイル(CA File: 950万余りの文献を収録、隔週毎約1万8千件追加)を基にした情報検索システムであり、大学割引制度(80%割引)を利用して年間20~30万円の検索料を支払っている。CAS Online は、本学部化学系のほとんどの研究室が利用しており、その他にもワークステーションに乗るデータベースを購入し、特定の有機化合物を合成するための反応経路の検索等に利用しているところも多い。また、X線構造データや、赤外吸収スペクトル、核磁気共鳴スペクトル、マススペクトル等の数値データベースが着

実に整備されつつある。

情報通信としては、電子メールが近い将来広く利用される様になると予想される。また、日本化学会は本年度よりNIFTY-Serveと契約し化学の掲示板を出している。これを契機に、学会に関する種々の連絡が文書からオンラインに徐々に移行するものと予想される。また、日本やアメリカの化学会では、ディスクによる論文の投稿について検討しており、一部の雑誌では既に利用されている。

最後の、ネットワークの構築は、CPU資源、メモリー等のハード、およびプログラム、データベース等のソフトを共有し、効率の良い快適な作業環境を作るために必要であるが、大小いろいろなレベルがある。

一番小さなものは、個人または研究室単位での小規模なネットワークである。私のいる研究室では、NECのパソコンとMacがそれぞれが2台ずつある。そのほかに、個人所有のMacが数台あるが、いずれもワープロとして利用することがほとんどである。Macについては、全てをホーンネットでつなぎ、プリンターを共有している。転送速度が遅いのと、たまにハングアップすることに慣れると、これはどこのハードディスクにある文書ファイルも空いているMacから好きなときにアクセス出来るので非常に便利である。NEC同士、NECとMacをオンラインでつなぎたいが、ワープロとしての利用程度では、そこまで投資する魅力はまだない。

次のレベルは、学科単位でのLANである。化学系には、共同利用のための幾つもの大型測定機器が備わっている。これらと、各研究室をLANで結び、研究室に居ながら機器の予約、使用状況および予約状況の確認、測定データの処理と出力が可能となれば、非常に便利である。また、学科内での事務連絡もかなりペーパーレスで行えるものと思われる。ただし、日本では電子メールは余り普及しておらず、一部の人を除いて頻繁にメールボックスを覗くことは負担が大きいいため、なんらかの工夫が必要と思われる。

3番目は、大学単位でのLANであり、計算機センターが中心となって、高度の計算機及び周辺資源の提供と、学外のネットワークへのゲートとしての役割が期待される。私は、ASPENのエミュレータEtermを使って、N1ネットワーク経由で分子研の計算機を利用することがあるが、どこかでコントロールコードが化けているらしく、決まったところでプログラムが機能しなくなる。私事で恐縮だが、

これはなんとか改善して頂きたいところである。

最後は、全国ないし国際的ネットワークである。このような大きなネットワークを利用する電子メールは、近い将来、郵便、FAXに相当する有用な通信手段になると考えられるが、わが国のように複数のネットワークが乱立し、その間での機能的な相互接続が無い状態では魅力に乏しい。一つのIDでほぼ誰からでもメッセージを受け取れるようになれば是非利用したいと思う。また、N1ネットワークでのデータ転送にはかなりの時間がかかる。これから、大量のデータを転送する必要性が益々高くなると予想されることから、大幅な機能アップが強く望まれる。

最先端を進む大企業では複数のスーパーコンピューターを備えている所が多い。また、それを用いるシミュレーション無くしては、研究開発競争に打ち勝てないとのことである。大量の情報を処理する通信網の整備においても、民間企業の方がはるかに進んでいる。また、アメリカでは電子メールが重要な通信手段として一般に広く利用されている。残念なことに、わが国の学術分野におけるコンピューターおよびネットワークの整備は非常に遅れている。しかし近い将来、コンピューターは利用形態こそそれぞれ異なるかもしれないが、あらゆる研究分野に於て、一般社会における電話のように、当り前の研究手段としてその必要性が益々高くなるであろう。