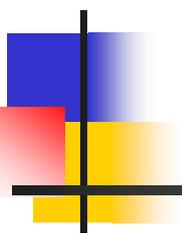


# 情報化学を考える

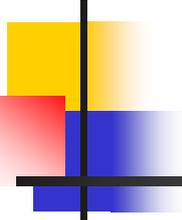


---

知的コミュニティ基盤研究センター

知の表現基盤研究部門

中山伸一



# はじめに

---

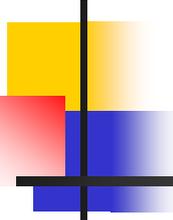
- 情報化学部会 (日本化学会)
  - CICSJ Bulletin
  - JCAC
  - 情報化学討論会
  - 講演会, 講習会
- 情報化学教育
  - 化学 情報化学
    - 情報学 情報化学



# 演者の情報化学研究

---

- タンパク質のデータベース化
- 有機合成プロセス設計システムの開発
- タンパク質配列の分類(クラスター分析)
- 構造活性相関(クラスター分析)
- タンパク質配列検索
- 化学反応メカニズム解析エキスパートシステムの開発
- 有機化合物命名法知的教育システムの開発
- タンパク質立体構造予測
- タンパク質立体構造の類似
- タンパク質機能発現部位の自動抽出



# 情報化学の研究

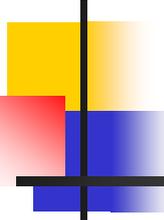
---

- 情報化学討論会の討論主題
  - 化学情報学
  - 理論化学、計算化学
  - ケモメトリックス及びそのソフトウェア
  - 化学教育・学習システム
  - その他情報化学に関するもの

# 化学情報学

## chemical information

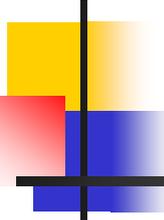
- 化学データ(構造、反応、物性、スペクトルなど)の扱い
  - 表現
    - WLN1953
    - IUPAC表記法1961
  - データベース・検索
    - CA Condensate 1969
    - CAS ONLINE 1980
- 日本の化学情報学
  - トポロジカルインデックス(細矢)1971
  - TOOL-IR (東大・藤原鎮男)1975
  - JOIS (JICST)1976
  - ICAS (国際電電)1980



# 化学情報学の展望

---

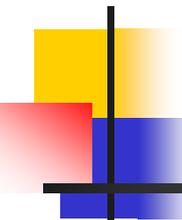
- データベース
  - 大規模なものができると追従できない
    - 量子化学データベース
- 表現
  - 化合物の構造的類似
    - コンビケム
      - 化学 / 情報学からのアプローチ



# 分子グラフィックス molecular graphics

---

- 化学構造表示システム
  - ケンブリッジ結晶構造データ
  - PDB
- 日本のシステム
  - MOLDA (吉田弘) 1984
- 分子グラフィックス研究の展望
  - 静的モデルから時間軸の追加へ



# 化学エキスパートシステム

## chemical expert system

---

- 化学者システム
  - 構造決定
    - DENDRAL (Lederberg) 1965
    - Heuristic DENDRAL (Duffield) 1969
  - 合成経路設計
    - OCSS (Corey) 1969
- 日本の化学エキスパートシステム
  - CHEMICS (佐々木、工藤、船津) 1968
  - HYPO (米田) 1972
  - GRACE (米田) 1979
  - AIPHOS (船津、佐々木) 1986

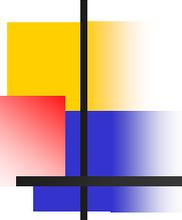
# 化学エキスパートシステム 研究の展望

- 工学部的展開
  - 大規模開発
    - CHEMICS (佐々木グループ)
  - 新しいテーマがあるか
  - 新しい基礎技術があるか
    - 虚遷移構造 (藤田) 1986

# 化学統計学

## chemometrics

- Chemistry+metrics (Wold) 1972
  - 数学的・統計学手法を用いて化学データから得られる化学情報量の最大化「Computers in Chemical and Biochemical Research」(Kowalski)1974
- 化学データ
  - 構造・物性 構造物性相関
  - 産地・スペクトル 識別問題
  - アミノ酸配列・二次構造 二次構造予測
- 日本のケモメトリックス
  - 「化学者のためのパターン認識序説」(宮下、佐々木ほか)1984
  - ケモメトリックスワークショップ(藤枝、相島 / 情報化学部会主催)1990



# ケモメトリックスの展望

---

- 化学情報学とともに情報化学の中心
  - 新しい手法
    - パターン認識
      - 分類(判別分析など)
      - クラスタリング(クラスター分析など)
    - ニューラル
    - ファジイ
  - 新しい対象
    - 官能評価と化合物
      - 2003年 感覚計量学手法とケモメトリックスを用いたフレーバーとテクスチャー特性の解析(Piggott)

# 化学教育

## chemical education

---

- CAI
- シミュレーション
  - 化学教育(日本化学会)
    - マイクロコンピューターを利用した化学教育(下沢)1981
- 化学教育の展望
  - WBT
  - エキスパートシステムなどとのリンク

# 計算化学

## computational chemistry

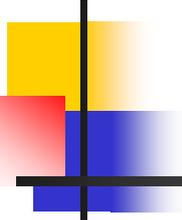
---

- 理論計算による仮想実験
  - 分子軌道法
  - 分子力学法 1946
    - 分子力学プログラム (Wiberg) 1965
  - 分子動力学法 (Alder) 1956
  - モンテカルロ法 (Metropolis) 1953

# まとめ

## 情報化学(応用情報学)

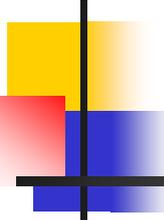
- 学問領域の定義
  - 確立していない
- 内容の変遷(新しい方法論, 新しい対象)
  - 情報理論
  - データベース / 情報検索
  - エキスパートシステム
  - ファイジイ / ニューロ
  - 認知 / 感性
  - インターネット
  - ロボット



# 日本の情報化学コミュニティ の創成

---

- 日米セミナー Computer assisted chemical research designの報告書 1973
- 化学と情報に関する討論会 1978
- 日本化学会情報化学部会 1982



# 情報化学部会歴代部会長

---

- 米田幸夫 (1985-9)
- 藤原 讓 (1990-1)
- 大澤映二 (1992-3)
- 細矢治夫 (1994-5)
- 吉田元二 (1996-9)
- 時田澄男 (2000-1)
- 細矢治夫 (2002- )

# 部会幹事

(筑波大(図書館情報大)関係者)

- 藤原 譲(副部会長1985-6) (1987-9)
- 鈴木 巧(1985-7)
- 石塚英弘(1987-90)
- 岩澤まり子(1987-9、1991-5)
- 中山伸一(1995-6、2000- )

# 情報化学関連学会等

- 化学情報協会 1971
- 日本薬学会構造活性相関部会 2002
  - 構造活性相関研究会 1994
    - 構造活性相関懇話会 1975
- 日本化学会情報化学部会(726(30):2003/2) 1982
  - 化学と情報に関する討論会 1978
- 情報計算化学生物学会(CBI学会) 2000
  - 計算機と化学・生物学会(CBI研究会) 1981
- 日本コンピュータ化学会(915(90):2002/6) 2002
  - 化学ソフトウェア学会 1992
    - 化学PC研究会 1985
  - 日本化学プログラム交換機構 1989
- 近畿化学協会コンピュータ化学部会 1988
- CACフォーラム 1996
  - CHEMICS研究会 1990
- 日本バイオインフォマティクス学会 1999

# まとめ2

## 情報化学コミュニティ

- 情報学(応用情報学)としてのコミュニティは困難
  - 研究会など
- 名前が人を集め,人が中味を作る
- 中核的な人物のリーダーシップ
  - コミュニティーは変遷する
- 学問として成熟すると本来の学問領域に戻る
  - 化学 情報化学
  - 情報学 情報化学