

| | | |
|--|--|--|
| 演 題 | クライアント/サーバー型有機合成設計システムの開発 -AIPHOS・KOSP・TOSP統合システム- | |
| 発 表 者 (所 属) | 船津公人, 六本木一人, 能勢容幸, 竹内雅志*, 藤井三穂子** (豊橋技科大, *富士写真フイルム, **住友化学) | |
| 連 絡 先 | 〒441-8580 愛知県豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1 豊橋技術科学大学知識情報工学系船津研究室 Tel : 0532-44-6879 , Fax : 0532-47-9315 , email : funatsu@tutkie.tut.ac.jp | |
| キ ー ワ ー ド | Organic Synthesis Design, Client/Server System | |
| 開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど | <p>これまでに相互補完的な三つの有機合成設計システム TOSP、KOSP、AIPHOSの研究開発を進めてきたが、今回この3つのシステムに共通のインターフェースを提供することにより、3つのシステムを自在に組み合わせながら合成経路設計ができるクライアント/サーバー(C/S)型有機合成設計システムの開発を行った。</p> <p>この統合システムはサーバーを Linux、クライアントを Windows とし、GUIを向上させるとともにマルチタスク、マルチユーザー環境を実現した。</p> | |
| 環 境 | 適 応 機 種 名 | SGI ワークステーション (サーバー) DOS/V(AT 互換)機 (サーバー、クライアント) |
| | O S 名 | Linux, IRIX6.5 (サーバー) Windows (クライアント) |
| | ソ ー ス 言 語 | Fortran, C, C++ |
| | 周 辺 機 器 | |
| 流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い) | <ul style="list-style-type: none"> ・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・ 独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ・未定 | 具 体 的 方 法 |
| | | CAC フォーラム(http://www.quebec.tutkie.tut.ac.jp/cac/)からの一部配布。AIPHOS 研究開発部会によるコンソーシアム形式の研究開発。ソフトハウスからの製品化の検討中。 |

1. はじめに

本研究室では有機合成化学者の創造的研究に寄与する三つの有機合成設計システムの開発を進めている。情報・経験指向および論理指向的戦略の利点を相互補完的に生かしつつ、新規合成経路の創出と、創出された経路の実際性の評価を行える AIPHOS (Artificial Intelligence for Planning and Handling Organic Synthesis) [1]、同様に二つの戦略を用いるが、AIPHOS よりもやや経験型の KOSP (Knowledgebase-Oriented Synthesis Planning) [2]、そして transform を利用した完全に経験型の TOSP (Transform-Oriented Synthesis Planning) [3]である。

今回、この有機合成設計システムに共通のインターフェースを提供することにより、3つのシステムを自在に組み合わせながら合成経路設計ができるクライアント/サーバー(C/S)型有機合成設計システム

ムの開発を行った。この統合システムは操作性を向上させると共にマルチタスク、マルチユーザー環境を実現している。本発表ではこの開発した C/S 型有機合成設計システムの紹介を行う。

2. 動作

動作環境

今回開発した C/S 型有機合成設計システムはサーバーを PC-Linux、クライアントを Microsoft Windows 系 OS とし、共に PC/AT 互換機上で動作する。また、TCP/IP 接続で通信を行う。

実行結果表示画面

図 1 にクライアントの実行結果表示画面を示す。この画面は左に経路樹表示部と右に逆反応表示部から構成されている。逆反応表示部では左上に標的構造、右に前駆体構造が示される。反応前駆体構造を選択すると、その逆合成の戦略部位が標的構造の部位に赤く示される。また、前駆体構造の赤くなっている部位が反応部位である。前駆体構造の下の番号を右クリックすることで、この反応スキームを支持した知識の元となった個別反応データを別ウィンドウで見ることができる。

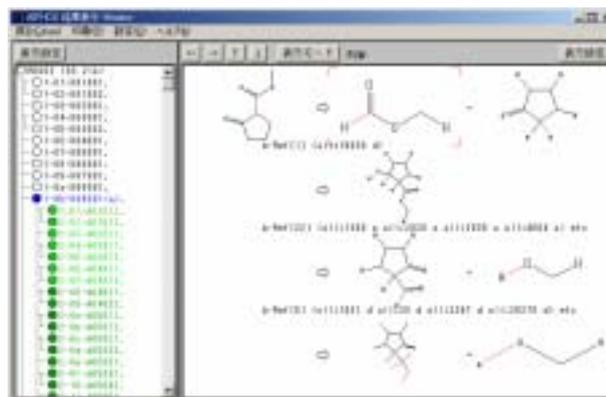


図 1 実行結果表示画面

新規合成経路

新規に標的構造を入力する場合、構造式エディタによって入力するほか、結果表示画面から前駆体を標的構造にすることもできる。前後者ともに実行条件設定画面が現れ、AIPHOS、KOSP、TOSP のどれか、または複数の手法を選択し実行する。それぞれ transform、知識ベースの選択ができる。また、TOSP では出力前駆体構造を自動的に標的構造にし、連続して TOSP を実行することが可能である。KOSP では出力する前駆体構造の数を制限するオプションがあり、AIPHOS には戦略部位をセントラリティによって順位付けし、実際性が高いと期待できる前駆体構造から順に出力させるオプションがある。

ジョブの管理

今回開発した C/S 型有機合成設計システムではジョブの管理ができる。TOSP、KOSP はマルチステップ時に実行ごとに停止させることができ、比較的計算時間の長い AIPHOS は強制的にプロセスを終了させ、途中までの実行結果を取得することができる。

3. 参考文献

- [1] 船津公人, 佐々木慎一; AIPHOS コンピュータによる有機合成経路探索, 共立出版株式会社(1994)
- [2] Koji Satoh, Kimito Funatsu; A Novel Approach to Retrosynthetic Analysis Using Knowledge Bases Derived from Reaction Databases, J. Chem. Inf. Comput. Sci., Vol.39, No.2(1999), pp.316-325
- [3] 佐藤耕司, 行本裕介, 船津公人; Transform を利用した逆合成ルート提案機能の開発, 日本化学会誌, No.6 (1997), pp.435-441