

2P07 副反応生成物予測システムのためのクライアント・サーバシステムの開発

○太田 圭輔、船津 公人
豊橋技術科学大学

1. 背景と目的

本研究では有機合成化学者の創造的研究に寄与する3つの有機合成経路設計システムの開発を進めている[1]。有機合成経路設計システム AIPHOS (Artificial Intelligence for Planning and Handling Organic Synthesis) [2]は、情報・経験指向および論理指向戦略の利点を合わせ持ち、新規合成経路の創出、および実際性の評価を行うシステムである。KOSP (Knowledge-base-Oriented Synthesis Planning) は、同様に2つの戦略を用いるが、AIPHOS よりもやや経験指向のシステムであり、TOSP (Transform-Oriented Synthesis Planning) は、transform を利用した完全に経験指向のシステムである。

一方、合成経路設計システムから提案された合成経路の評価を目的に、生成物を予測する副反応生成物予測システム[3]を開発がされている。これにより、副反応生成物の安全性やその生成条件などに着目した経路の評価を行うことができる。このように、合成経路設計に副反応生成物予測を併せて行うことは重要であるが、これまでにそのようなシステムは開発されていなかった。

そこで、本研究では合成経路設計システムと副反応生成物予測システムを統合することで、合成化学者の研究に寄与するシステムの開発を行った。

2. クライアント・サーバシステム

本研究で開発したシステムはクライアント・サーバ型を採用している。ユーザはクライアントを通して、システムの入力構造を用意する。そして、実行するシステム (AIPHOS, KOSP, TOSP, 副反応生成物予測システム) および知識ベースの選択を行い、サーバに対して計算を要求する。計算要求を受けたサーバは、選択されたシステムを起動し、予測構造の計算を行う。計算終了後、各システムの出力結果をクライアントに表示するための共通のフォーマットに変換する。クライアントは変換後のデータをサーバから受け取り、予測構造や反応条件などの情報を表示する。クライアントは処理の要求や表示のみを行い、サーバがデータベースへのアクセスや計算などの負荷の大きい処理を請け負うため、負荷分散が可能である。また、クライアントとサーバ間の通信はTCP/IPを用いており、インターネットを経由した利用などが可能である。

また、サーバはC言語、クライアントはC/C++言語を用いて開発を行った。実行環境は、サーバがLinux または IRIX、クライアントがMicrosoft Windows である。

3. 実行結果

本システムは、入力構造に対して反応ベースに基づいて予測された構造を出力する。実行画面例を図1に示す。左側に予測構造の一覧がツリー状に表示され、右側に入力構造と予測構造が表示される。図2に反応・文献情報の表示画面例を

示す。この画面を参照することで、適用した反応ルールの反応条件や、文献情報を知ることができる。

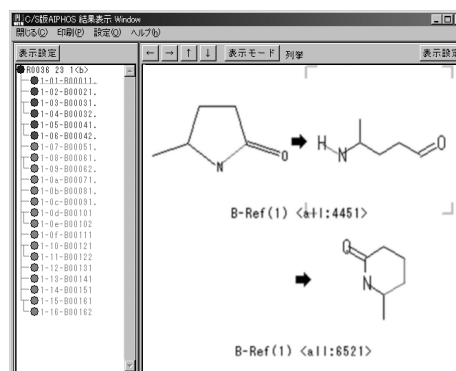


図1 実行画面例

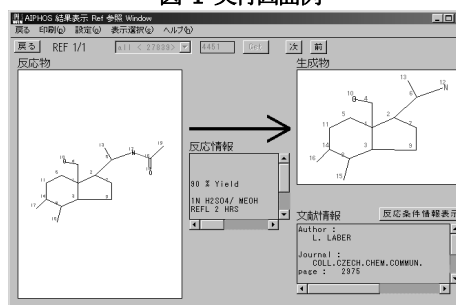


図2 反応・文献情報表示画面例

4. まとめ

合成経路設計システムと副反応生成物予測システムを統合し、共通のインターフェースで利用できるシステムを開発した。本システムは、合成経路探索と同時に副反応生成物予測による合成経路の評価が可能である。今後、合成経路設計研究に役立つことが期待される。

現在、本システムの副反応生成物予測はシングルステップ処理のみ実行可能であるが、これをマルチステップ化することで、より高度な合成経路設計が可能になると考えられる。また、反応条件情報による反応経路のまとめ上げ、スコアリング、ソート機能の追加なども、今後の課題として挙げられる。

参考文献

- [1] 船津公人, 六本木一人, 能勢容幸, 竹内雅志, 藤井三穂子, クライアント/サーバ型有機合成設計システムの開発, 第25回情報化学討論会講演要旨集, 61-64, 2002
- [2] 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
- [3] 塚本幸治, 佐藤寛子, 船津公人, 副反応評価システムによる合成経路設計システムAIPHOSの経路評価, 第24回情報化学討論会講演要旨集, 131-132, 2001