


豊橋技術科学大学長 殿

平成3年2月28日

審査委員長 神野 清勝 

論文審査及び最終試験の結果報告書

このことについて、下記の結果を得ましたので報告いたします。

記

学位申請者	原藤 寛	学籍番号	第 889801 号
申請学位	工学博士	専攻名	材料システム工学
論文題目	有機化合物の自動構造推定システムの開発 - NMRスペクトルデータの高速利用と構造発生法に関する研究 -		
公開審査会の日	平成 3 年 2 月 20 日		
論文審査の期間	平成3年1月24日～平成3年2月21日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 3 年 2 月 20 日	最終試験の結果	合格




論文内容の要旨


本論文は、有機化合物の構造推定問題に対するコンピュータの利用の中で、2次元NMRスペクトルデータの解析処理、および未知構造を構成する既知部分構造と未知部分構造の独立した取り扱いによる解析効率の向上を目的としている。本研究を進める上での基礎となる概念は、スペクトルデータ等の解析を通して得られた部分構造を用いて、入力データ全てに矛盾しない可能な候補構造をもれなく発生するところにある。これを実現するための基本アルゴリズムは申請者の所属する研究室で既に開発が行なわれていたが、このアルゴリズムは構造推定対象の分子式が大きくなると構造発生のための部分構造集合の組み合わせの増大に伴う演算時間の増大という実用上の難点を抱えていた。一方、構造推定の対象となる構造未知の試料については、一般に何らかの経緯により、ある程度の大きさの部分構造の存在を確認できる場合がある。これを既知部分構造と呼ぶことにする。この問題に対処するために本研究では、未知構造を構成するこの既知部分構造を、一旦構造発生処理から除外し、未知部分構造のみに注目した推定を進め、最後に両者をつなぎ合わせる事で実質的な構造推定時間の短縮を実現している。また、天然化合物等の構造推定にとって有用な情報として用いられている2次元NMRスペクトルデータを上記の手法に適用することで、推定される候補構造数の減少、および演算時間の短縮を実現している。

審査結果の要旨

有機化合物の構造推定問題へのコンピュータの利用は、大きく分けて2つの手法によりなされてきた。一つは、構造とそれに対応したスペクトルデータという測定事実のいわゆるデータベースへの格納およびその検索であり、もう一つは、測定データの解析にもとづく、可能な候補構造の発生である。構造未知の試料の構造推定を考えた場合、データベース検索のみに頼るには自ずと限界があり、したがって後者の解析的立場に立たざるを得ない場合がある。本論文は申請者の所属する研究室で、この後者の立場に立って開発されてきた自動構造推定システムの実用性を高めるために、構造未知の試料の中の既知部分構造に対する処理と未知部分構造に対する処理を独立して行なう事で、後者の手法による構造推定に常に存在していた構造発生段階における組合せ数の増大を著しく低下させ、演算時間の短縮を実現した。また、この手法は演算時間の短縮に効果的であるのみならず、実際に実験室で分析化学者が行なう構造推定の手順になじんだ手法であることから実用的価値が高いと評価される。同時に、本研究では上記手法への2次元NMRデータの適用も図られており、現在のNMR測定技術から得られる情報に対応した解析処理アルゴリズムが開発されている点は学術的および実用的見地からも高く評価される。よって本論文は工学博士の学位論文に相当するものと判定した。

審査委員

神野清勝  阿部英次  宮下芳勝  印

舟橋津公人  印

(注) 論文審査の結果及び最終試験の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。