

豊橋技術科学大学長、殿

平成 6 年 2 月 28 日

審査委員長 阿部英次 (阿部)

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	速水 健一	学籍番号	第 895503 号
申請学位	博士(工学)	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 — 構造発生法に関する研究 —		
公開審査会の日	平成 6 年 2 月 21 日		
論文審査の期間	平成 6 年 1 月 26 日～平成 6 年 2 月 21 日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 6 年 2 月 21 日	最終試験の結果	合格

論文内容の要旨

有機化合物の自動構造推定に際して提案される候補構造の可能性の順位をつけたり、分子式が曖昧な場合や不明な場合でも構造推定が行えることは実用上大切なことである。本論文では、既に開発の進められている自動構造推定システム CHEMICS の構造組立てアルゴリズムに注目し、構造組立ての単位である部分構造の確からしさの評価を通して可能性の高い候補構造から組立てていく手法や、分子式の不明な場合を考慮できるように CHEMICS とは別の新たな構造組立て法とスペクトル解析の手法の詳細が述べられている。

本論文は4章から構成されている。第1章では研究の背景と目的が、第2章では CHEMICS における構造発生法に注目した候補構造の順位付けのための手法が述べられ、いくつかの実用例により実用性を示している。また、第3章では分子式が不明な場合の構造推定に対処するための構造組立てとスペクトル解析のアルゴリズムが実例を交えて詳述されている。ここで推定される候補構造は全構造および部分構造であるが、既に申請者が修士課程において開発を済ませているマススペクトル予測システムと組み合わせることにより、提案された全(部分)構造の重要度を評価できることが示されている。第4章では総括として今回開発したそれぞれのプログラムの実用上の有用性と今後の課題が述べられている。

審査結果の要旨

従来、有機化合物の自動構造推定システムでは候補構造の確からしさの順位付けはすべての候補構造が提案された後に行われてきた。そのため候補構造の数が多い場合や推定に要する演算時間が長い場合などは利用に大きな制約が生じるなどの問題が指摘され、入力データに対して確からしいとされる順に候補構造が組立てられ出力されることが望まれてきた。本研究ではこれを実現するために、入力データに対してなるべく確からしい部分構造から順に選び候補構造を組立てるよう工夫を行っている。その選択の基準として、スペクトルデータベースをもとに各部分構造に対して求めた化学シフト出現頻度分布関数を用いている。このことは関数作成のもととしたデータの内容に沿った未知試料の構造解析には極めて有効に作用することを意味しており、しかも妥当な構造を早い段階で組立て終わることから、実用上の意義も大きい。また、分子式が不明な場合を取り扱う自動化システムはこれまで開発されてこなかったが、今回種々のスペクトル解析プログラムや利用者によって与えられる部分構造を NMR スペクトルデータをもとにそれらの結合の可否を検討しながらより大きな部分構造へと組立て上げるシステムの新規開発がなされたことによって、コンピュータ利用による構造推定分野での未解決の問題の一つの解を与えたことになる。よって、本論文は博士(工学)の学位論文に相当するものと判定した。

審査委員

阿部英次 (阿部) 宮下 芳勝 (宮下) 神野清勝 (神野)
船津 公人 (船津) 西山 久雄 (西山) 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。