

特集に当って

ORに従事する者にとって、ORの手法や考え方が、さまざまなビジネスや学問分野でどのように役立っているかはきわめて関心の高いことである。そしてまたそのような現場での固有技術への適用を通してORのような管理技術の効用や問題点、限界が認識され、次の飛躍につながるのである。

従来、ビジネス分野でのORの適用例は事例としていろいろな形で発表されてきたので、古くからの学問あるいは、新しい学際的な学問分野でORがどのように応用され、また貢献しうる可能性をもつのかを探ってみるのは大変興味深い。そこでいわば「学問(学術)とOR」というような形で今後いくつかの分野をとりあげる計画である。

その第一弾としてとりあげたのは化学である。化学はよく知られているように物質を対象にする学問であり、物質の性質を解析したり、新しい物質を合成することが行なわれる。しかし、そのような行為を決定するのは物質に関する情報である。その大量の情報を収集したり、処理するツールとしてのコンピュータの発達はめざましく、化学分野にもその利用は日常茶飯になりつつある。

そこで、このようなツールを用いた化学の情報に關し体系化する新しい学問分野が出現した。それは計算機化学あるいは化学情報学とよばれる。そこでの方法論は未整備の状態であるが、以前は実験データの処理、化学プロセスのシミュレーションやプロセス制御などへの適用が中心であった。ORの数理的手法も、このような新しい方向が生まれたことにより、研究開発、つまり新規物質の探索や解明に必要とされるようになったのである。そこでは研究者に対するすぐれた研究サポートシステムが必要である。それは神沼氏の論文にみられるような知的応答システム、つまり知識ベースシステムでなければならないであろう。

それを実現するためにはいくつかの要素技術が必要になる。第1は化学物質の構造をコンピュータでとり扱えるような構造のモデル化である。その数学的表現によく用いられるのがグラフ理論である。これに

より化学構造のデータベース化ができ、構造の検索も可能となった。(中山、藤原氏論文)

次は分子の構造の三次元の表示をいかにするかが問題になる。グラフィックディスプレイ上で分子の結合状態が立体視できれば、未知物質の解析もきわめて効率的に行なわれるであろう。しかも鈴木氏の解説中のDNAの表示例にみられるように、分子生物学でのニーズも大きく、今後このような方法が先端技術の開発に欠かせないものになるであろう。

さてこのような化学情報の基礎的な処理法ができあがれば、次にそれをいかに駆使するかになる。およそ化学の研究開発の主要な目的は、あるニーズに合った機能を有する新しい物質の創造であるといえよう。そのためにはその物質の構造をデザイン(設計)しなければならない。それにはどのような構造の物質がどのような機能を有するかを研究しなければならない。これは「構造活性相関分析(QSAR: Quantitative Structure and Activity Relationship)」とよばれ、特に医薬品の開発では熱心な研究が続けられている。これについては具体例をまじえて森口氏に解説をお願いした。

上記以外に物質の反応や物性の予測、合成法の探索、構造の自動解析など興味あるテーマは尽きないが、実用化にはまだ一歩であり、開発段階にあるので紹介は別の機会にゆずりたい。

本号での紹介がORの新たな道を開く一助になれば幸いである。

(長田 洋 (綽)旭リサーチセンター)