


豊橋技術科学大学長 殿

1989年〇月〇日

審査委員長 伊藤 浩 

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	遠藤 智明	学籍番号	第 845501 号
申請学位	工学博士	専攻名	材料システム工学
論文題目	有機合成反応データベース管理システムの開発とその高次利用に関する研究		
公開審査会の日	1989年2月14日		
論文審査の期間	1989年1月28日~1989年〇月〇日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	1989年2月14日	最終試験の結果	合格

論文内容の要旨

有機合成設計・反応予測システムとしてのAIPHOSの完成のためのキーステップとして、(1)個別の有機合成反応をデータベースとして登録・管理するシステム、(2)各反応の反応部位を自動的に認識するシステム、(3)出発物と生成物の間を結ぶ反応経路を列挙するシステムを開発した。

(1)は、化合物(構造式)情報として、部分構造、環、および鎖インデックスを含み、結合行列、結合表で構造式を表現させ、また反応情報として、出発物→生成物の反応形式、反応条件、文献情報を管理させた。(2)は、出発物、生成物の最大共通骨格を自動認識させる方法を開発することによって、複雑な転移反応を含めて、反応部位を的確に認識させることができた。(3)は、この結果をふまえて、可能性のある反応経路のすべてを列挙させるシステムを開発したもので、反応解析はもちろん、新しい機構の発見、新しい("常識"外の)反応の開発の可能性につながる。



以上のように、本研究はまだ狭い範囲(管理した個別反応例は約300)ではあるが、有機合成における有用な知識を管理し、これを反応機構の確認・推定、さらに分子設計へ発展させるための基本的システムを開発した。



審査結果の要旨


計算機を有機合成設計に利用しようとする研究開発が活発化しようとしている中で、AIPHOS (Artificial Intelligence for Planning and Handling Organic Synthesis) は、従来の経験に基づく反応規則と、それにとらわれない論理的な反応予測を融合させた独自の設計システムとして、完成が急がれている。本研究は、上記のように、そのための基本的段階として、反応データベース管理システムと、これから有用な単位知識を抽出管理するシステムを開発したものと見ることができ、その内容の独創性、厳密性、論理性、発展性は充分である。

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する。

審査委員

伊藤 浩   
宮下 芳勝 

大岩 元   
伊藤 健児 

阿部 英次   
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。