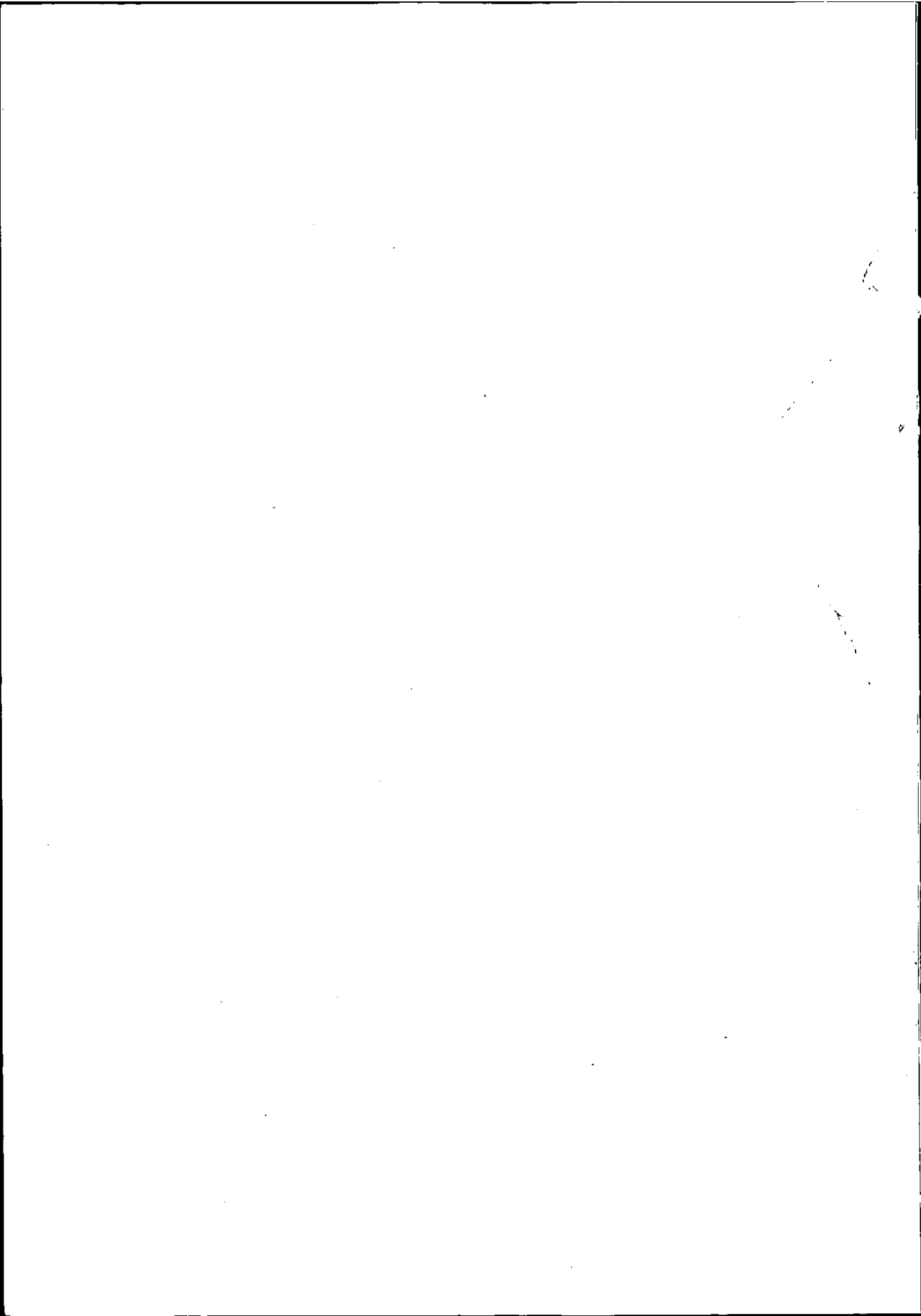


第5回(昭和49年度)研究奨励金 受賞研究の概要

昭和50年10月

財団法人 日本情報開発協会



この研究奨励金制度は、本協会に対する民間の寄付金の一部をもって基金を創設し、その果実を

(1) 電子計算機の高度利用に寄与する技術と知識に関する研究

(2) 電子計算機の適用分野の拡大開発に寄与する技術と知識に

関する研究

のうち優れたものに対し、研究奨励金として交付することを目的としている。

公募は、年1回行なうことになっており、本協会の依頼した大学、研究機関、関連団体および本協会役員等の推薦人（機関）をを通して推薦を受けることとしている。

審査は研究奨励金審査委員会において厳正公平に行なうことになっている。

今回はその第5回として昭和50年2月27日に公募を行なった。

目 次

I 推薦および審査のあらまし

- 推薦状況 1
- 選考方針および選考の経過 3
- 選考の結果 3

II 受賞研究の概要

奨励金の部

都 市

本年は概当研究なし

医 療

1. 臨床肺機能検査法の自動化に関する研究 7

広島大学医学部教授

西 本 幸 男 (他5名)

2. フーリエ変換法によるX線廻転断層二次元映像処理の研究 17

京都大学医学部教授

村 地 孝 (他5名)

3. 久山町における成人病の疫学と管理に関する情報科学的研究 27

九州大学医学部教授

尾 前 照 雄 (他4名)

公 害

4. 大気汚染分布の三次元的な多元情報の実時間計測

および高速度処理のための新しいレーザー・レーダー・

システムの開発研究 ... 39

東北大学電気通信研究所教授

稲 場 文 雄 (他2名)

5. 高速液体クロマトグラフ・プラズマクロマトグラフ・

コンピュータ・システムの開発と利用 49

京都大学理学部教授

波多野 博 行 (他7名)

流通・経営

6. M D I Sの開発に関する基礎研究 73

一橋大学商学部教授

宮 川 公 男 (他5名)

自 由

7. 一貫自動方式結晶解析 — プログラム・システムについて 85

大阪大学蛋白質研究所長教授

角 戸 正 夫

8. 電子計算機による電気機械エネルギー変換機磁気回路の解析と

その最適設計法の研究 97

東北大学電気通信研究所教授

津 屋 昇 (他4名)

9. 制癌性有機化合物に関する電算機の高次利用研究 111

慶応義塾大学医学部助教授

稲 山 誠 一 (他4名)

10. フローチャートランゲージの処理系の開発とその応用 121

早稲田大学理工学部教授

門 倉 敏 夫 (他3名)

報奨金の部

11. コムトラック（新幹線運転管理システム） 133

日本国有鉄道電気局

稲田伸一（他3名）

12. IBM-3270-CICS を使用したオンライン・サポート・

システムの開発 ... 148

久保田鉄工㈱電算センター

井上拓一郎（他）

I 推薦および審査のあらまし

○推 薦 状 況

本協会が依頼した推薦人から奨励金部門に57件，報奨金部門に6件の推薦があった。機関別の推薦状況は次の通りである。

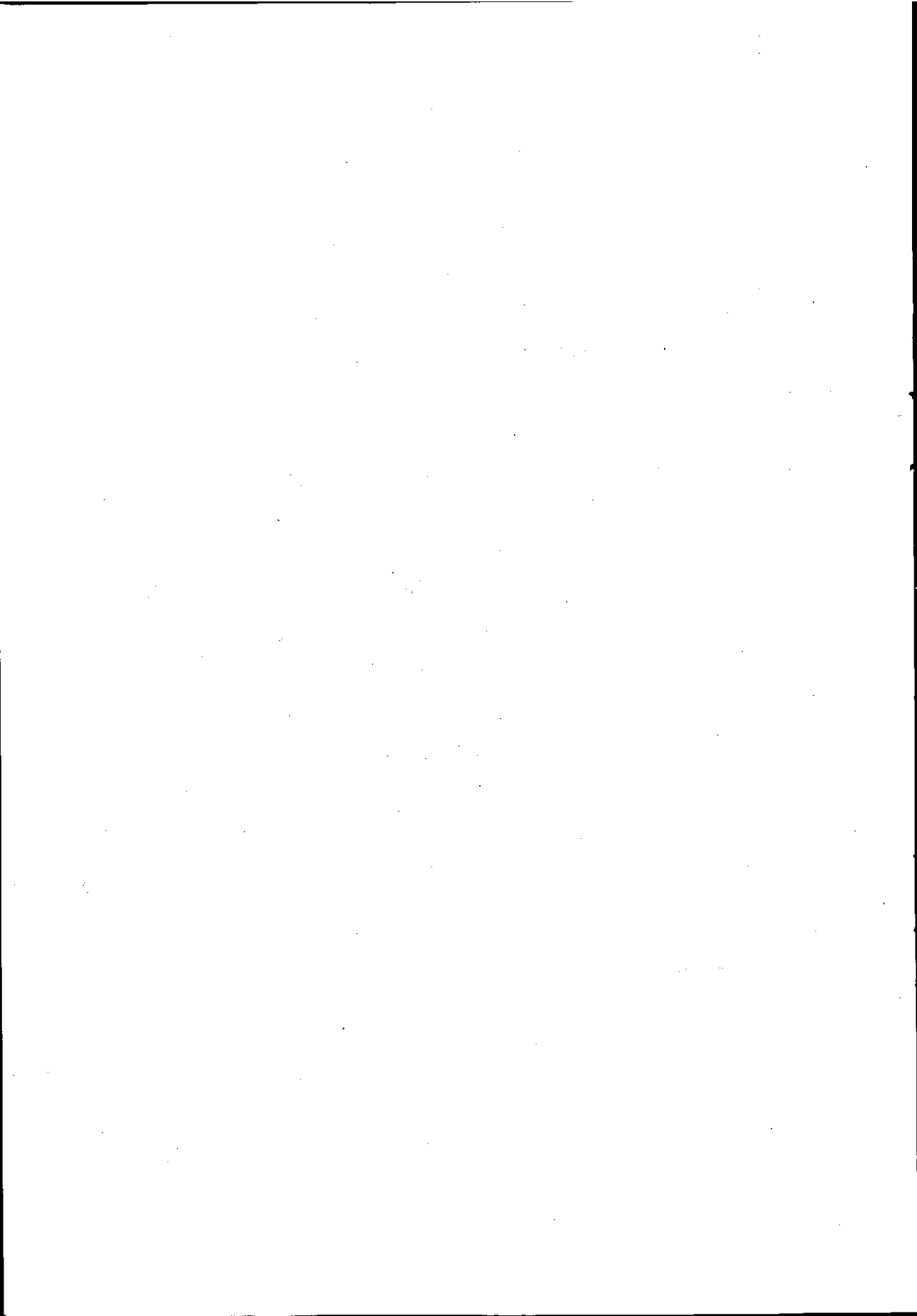
(1) 奨励金部門 57件

(内 訳)

	大 学	企 業	その他	計
都 市	3	1	—	4
医 療	16	1	—	17
公 害	4	4	1	9
流通・経営	6	1	—	7
自 由	19	1	—	20
計	48	8	1	57

(2) 報奨金部門 6件

合 計 63件



○選考方針および選考の経過

- (1) 独創的な研究であり、近い将来利用に供せられる可能性の大きいもの、各種の専門分野にまたがる共同研究等を優先的に考慮した。
- (2) 選考は審査委員会（委員長 堀越禎三氏，副委員長 山内二郎氏）において厳正に行われた。

○選考の結果

選考の結果次の通り決定した。

件	名	担	当	者	交	付	額
							千円

奨励金の部

都 市

本年は該当研究なし

医 療

1. 臨床肺機能検査の自動化に関する研究	広島大学医学部教授 西 本 幸 男 (他5名)	1,000
2. フーリエ変換法によるX線廻転断層二次元映像処理の研究	京都大学医学部教授 村 地 孝 (他5名)	1,000
3. 久山町における成人病の疫学と管理に関する情報科学的研究	九州大学医学部教授 尾 前 照 雄 (他4名)	1,000

公 害

4. 大気汚染分布の三次元的な多元情報の実時間計測および高速度処理のための新しいレーザー・レーダー・システムの開発研究

東北大学電気通信研究所
教授
稲 場 文 雄
(他2名)

1,000

5. 高速液体クロマトグラフ・プラズマクロマトグラフ・コンピュータ・システムの開発と利用

京都大学理学部教授
波多野 博 行
(他7名)

1,000

流通・経営

6. M D I S の開発に関する基礎研究

一橋大学商学部教授
宮 川 公 男
(他5名)

1,000

自 由

7. 一貫自動式結晶解析—プログラム・システムについて

大阪大学蛋白質研究所長
教授
角 戸 正 夫

1,000

8. 電子計算機による電気機械エネルギー変換機磁気回路の解析とその最適設計法の研究

東北大学電気通信研究所
教授
津 屋 昇
(他4名)

1,000

9. 制癌性有機化合物に関する電算機の高次利用研究

慶応義塾大学医学部助教授
稲 山 誠 一
(他4名)

700

10. フローチャートランゲージの処理系の開発とその応用

早稲田大学理工学部教授
門 倉 敏 夫
(他3名)

700

小 計

10件

9,400

報 奨 金 の 部

11. コムトラック（新幹 線運転管理システム）	日本国有鉄道電気局 稲 田 伸 一 （ 他 3 名 ）	200
12. IBM-3270- CICS を使用したオン ライン・サポート・シス テムの開発	久保田鉄工㈱電算センター 井 上 拓一郎 （ 他 ）	200
小 計	2 件	400
合 計	12 件	2,800

1. 臨床肺機能検査法の自動化に関する研究

研究代表者

広島大学医学部教授

西本 幸男 (他5名)

I はじめに

医学領域の情報は比較的、電子計算機による処理が困難な例が多い。

臨床肺機能検査法では、測定値から検査成績を導くのに、諸種の数式を用い、演算する必要があり、その演算のために、無騒な長時間を費さなければならぬ。そのために、臨床肺機能検査法が一般に充分普及していないのが現状である。

本研究は、臨床肺機能検査法の普及が目的であり、電子計算機の医学応用が目的である。

臨床肺機能検査法の普及のためには、まず肺機能検査法による診断方法の確立であり、次に最もおこなわれている、肺機能の治療面への応用である。

本研究で開発している自動化システムには、上記の2つの機能を持たすべく企画した。

すなわち、R.C.U.(Respiratory Care Units)の機能をも持った自動化システムの開発である。

II 自動化システムの概要

肺の機能は、大気中より酸素を体内組織に供給し、組織からの老廃物である炭酸ガスを大気中に排泄する、すなわちガス交換が主である。このガス交換には、換気・拡散・循環などの各機能が関係しており、日常おこなわれる肺機能検査法は、表1に示すように、これら各機能を測定するために選定されている。

表 1 呼吸器疾患診断のための心肺機能検査

種 類	第 1 次検査	第 2 次検査	第 3 次検査
心 肺 機 能	スパイロメトリー 運動負荷（換気量 測定）	動脈血・残気量・ 拡散能力・運動負 荷 $\dot{V} / \dot{Q}$, A-aD	メカニック（気道抵 抗・コンプライアン スなど） RI (^{131}I -MAA, ^{133}Xe)
	心電図	心音図・ ベクトル心電図	心カテーテル法
自動化装置	スパイロコンピュ ータ呼吸抵抗計	パン・スパイロ・ コンピュータ	ミニコンピュータ・ システム

われわれは、この日常の臨床肺機能検査法に基づいて、各種肺機能検査用自動
1) 2) 3) 4)
化装置を、すでに開発している。

例えば、スクリーニング用自動化装置としての換気機能を測定する、スパイ
ロコンピュータや呼吸抵抗を測定できる呼吸抵抗計、精密検査用（2次検査）
としての、換気・拡散・肺気量分画の測定できるパンスパイロコンピュータを
開発している。

本研究の目的は、機能的診断技術の向上が1つの柱であるから、データ処理
のスピードアップ化と、総合診断方法の開発が必要である。

われわれがすでに開発している、肺機能検査用自動化装置（以後、自動端末装
置と略す）は、リアルタイムのデータ処理が可能で即時に演算結果をプリント
アウトするが、本研究では、これら自動端末装置を自動制御し総合診断をする
中枢部の開発である。

研究開発中の自動化システムは図1に示すような概要をしている。

すなわち、各種自動端末装置や共同研究者の西田らが開発した呼吸用質量分
5)
析装置など連続ガス分析装置をA. スクリーニングテスト, B. C. 精密検査,

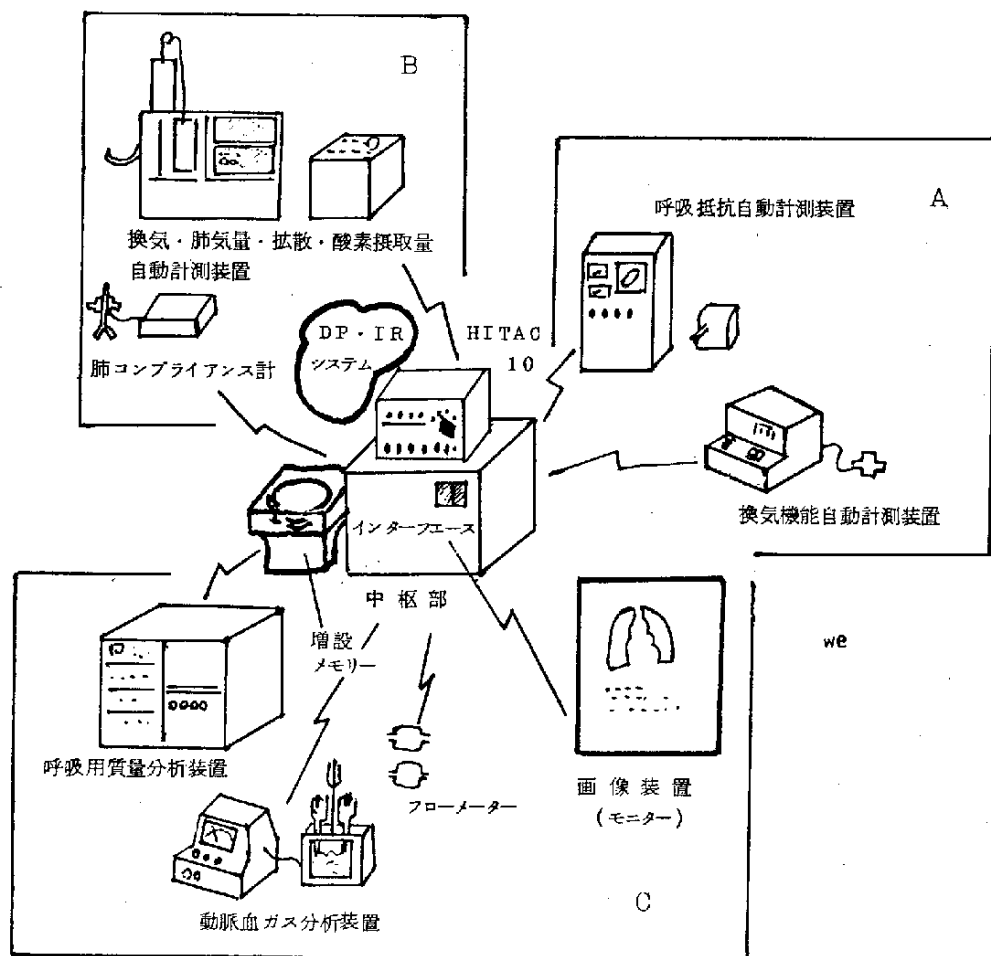


図 1 肺モデルを持った呼吸管理装置の完成予定図

C. 呼吸監視用と区別し、汎用性小型デジタル電子計算機 (HITAC 10, 記憶容量 4K words) で相互の装置を自動制御した。

したがって本自動化システムの測定できる肺機能検査項目は、

- 1) 換気機能 (スパイログラフィー, 呼吸抵抗, 肺コンプライアンス, クローピングボリウム, フローボリウム)

2) 肺気量分画および酸素摂取量

3) 拡散能力

4) A-aD, 動脈血ガス

5) 呼吸監視

などである。

本自動化システムを円滑に臨床に活用するためには、さらに、ハードウェアとして、中枢部であるHITAC-10の記憶容量の増設、中枢部と自動端末装置とのインターフェースの開発、入出力装置のスピードアップが必要であり、本研究の主眼でもあった。

さらに、R.C.U.機構を持たせるために、呼吸波形を分析する熱線式フローメーターをトランスデューサーとして開発した。

さらに、本自動化システムを円滑に動かし、総合的に自動診断できるソフトウェアも開発中である。

次に、本研究で開発および開発途上の装置およびプログラムについて説明する。

■ インターフェースについて

本研究の主眼である、中枢部であるHITAC-10の記憶容量増設と、R.C.U.機構をもたせるために、データのリアルタイム処理が必要であるから、入出力装置のスピードアップが要求された。

われわれはまず、磁気テープ(カセット方式)による記憶容量の増設を計画したが、利点が少ないため、それよりも、すでに開発している自動端末装置の記憶機構を補助メモリーとして利用し、記憶容量をあまり使用しないプログラム(HITAC-10 アセンブラ)を開発し制御する方式をとった。

入出力装置のスピードアップは、インターフェースを開発することにより、自動端末装置とHITAC-10とをオンラインで接続したので、問題でなくなった。

われわれが開発したインターフェースは、図2のブロック図に示すように、
 おのこの、2チャンネルごとのデジタル入出力機構とアナログ入出力機構を
 保有している。

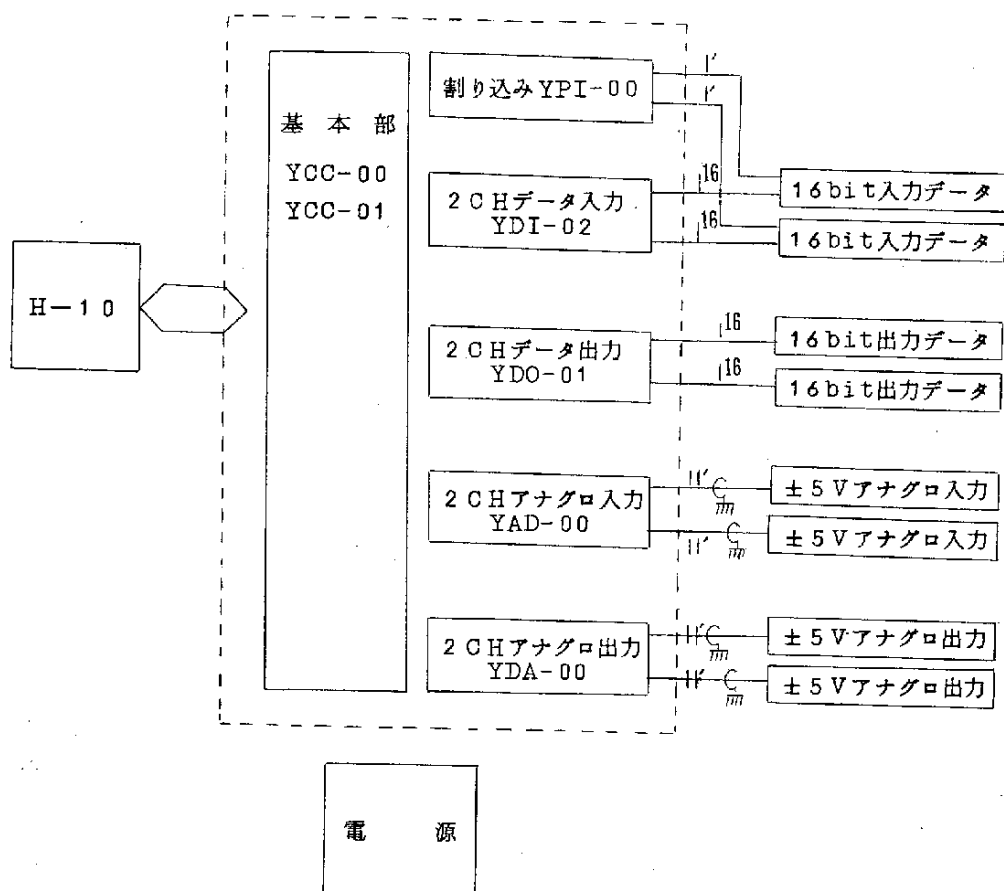


図2 インターフェースのブロック図

デジタルデータ入力は32bit(16bit+16bit)パラレル方式で入
 力され、論理1で $0V \pm 0.5V$ 、0で $+4.5V \pm 0.5V$ で、立上り、立下りのチャ
 タリングはない。

割り込みは入力データと共に端末側より送出される2レベルの割り込み信号
 を受けて処理装置に割り込みを発生して、データ読み取りのタイミングを決定

する。

デジタルデータ出力は32bit(16bit+16bit)の平行データでHITAC-10より一方的に出力される。

アナログデータ入力の条件は、入力電圧はフルスケール、 $\pm 5V$ 、20mA、入力耐電圧は最大 $\pm 15V$ 、入力インピーダンスは、ONチャンネルで300 Ω 、OFFチャンネルで1000M Ω 、データ持続時間は5msec、データ立上り時間は20 μ sec以内である。A/D出力データは9bit+sine bitで、A/D時間はスタートより40 μ sec以内である。2チャンネルのアナログデータはHITAC-10からの入出力命令により読みとられ、2チャンネルの出力端子から一方的に出力される。アナログデータ出力の条件は、出力電圧がフルスケール $\pm 5V$ 、5mA、負荷抵抗が1K Ω 以上で、データ持続時間は次のデータ出力命令が終了するまで連続する。本インターフェースのために開発した命令語は7語である。

IV ソフトウェアの開発について

本自動化システムの機能をフルに活動するためには、効率のよい、経済的なプログラム、特に入出力システムの開発が必要であった。特にR.C.U.機構を本自動化システムに持たせる場合、データをリアルタイムで解析するDynamic Programmingの開発が必要であった。

R.C.U.の検査装置は主に動脈血ガス分析装置(電極法)と後述する熱線式フローメータである。動脈血ガス分析用のプログラムは動脈血採血という技術が途中に入るので、オンラインで入出力する必要がない。 PaO_2 、 $Paco_2$ 、pHの値をタイプライターから入力することにより、 SaO_2 、B.B.B.E、 HCO_3^- などを解析するプログラムの開発中である。

熱線式フローメータによる呼吸波形の分析は呼吸監視に最も大切な情報である。

$$Paco_2 = 0.863 \times \frac{VCO_2}{V_A}$$

ただし、 $Paco_2$ ：動脈血炭酸ガス分圧、VA：肺胞換気量、 Vco_2 ： CO_2 排泄量

の式であらわされるように、換気量は動脈血ガス成分をコントロールする大切な因子である。⁶⁾したがって、換気量の測定は有意義なことだが、換気量をリアルタイムで解析するプログラムの作成は記憶容量などの問題があり困難であった。しかし、われわれは、なるべく経済的な分時換気量測定用プログラムを作成し、低肺胞換気量を疑わせる場合、警報を発するよう計画した。

この呼吸監視、各種自動端末装置からの信号のやりとりはディバイスコントローラーを開発することにより、スイッチでコントロールした。

図3に診断用プログラムの1例を示すが、総合診断、検査の良否の判定を可能にするように計画している。

ESC-3 (PAN SPIRO) DATA

DATA =0831	I D = 001	SEX AGE=M049	
HEIGHT = 171	WEIGHT = 053	W-S / S=-011	
PRVC = 3.77	V C = 3.18	FVC = 3.14	/PRVC = 084
FEV1 = 2.22	FEV2 = 2.63	FEV3 = 2.86	
FEV1% = 073	FEV2% = 087	FEV3% = 094	
FV1/PR = 067	A-TRAP =+004	DEC = 001	
FRC = 3.98	FRV = 1.57	R V = 2.41	
V C = 3.22	TLC = 5.63	T V = 0.45	
I C = 1.64	PRTL C = 7.36	/PRTL C = 077	RV/TLC = 043
VO2 = 0.40	M V =1.43	VO2/MV = 028	
DEC = 002	R R = 031		
BSA = 1.61	PRDLCO =311	V I = 3.20	
V A = 5.05	DL(VA) =208	/PRDL = 067	/BSA = 013
VAA = 5.08	DL(VAA)=209	/PRDL = 058	/BSA = 013
TIMF =101	VA/TLC = 090	DEC = 002	
MVV = 072	E V =31.3	M V =15.6	PRMVV = 117
/PRMVV = 062	E I = 043	V R = 079	
/BSA = 045	=	V I = 018	
DEC =TEST	DEC =TEST	DEC = F3	

図3 プリントアウトの一例

検査が上手におこなわれたかどうかの判定方法は、まず、被検者の協力を最も必要とするのはスパイログラフィーである。

肺・胸部系は、一般には、肺・胸部系を中心とした弾性抵抗（C）と気道系を主にした粘性抵抗（R）で、その特性はあらわされているといわれている。そうであれば、努力性呼出の際の流量曲線は瞬時にピークフローに達するはずである。しかし現実には、呼出開始からピークフローまで200msecあまりの時間遅れがあり、その時間遅れと呼出努力度との関係があることが、われわれの本研究で実証された。

したがって、被検者の呼出努力度を客観的に判定する方法として、努力性呼出曲線の二次微分曲線の特性から判断する方法をとった。

次に、検査の良否を総合的に判定する方法として、複数回おこなわれる検査の再現性でチェックする方法もとった。

V 熱線式フローメーターの開発について

R. C. U. で最も大切なことは呼吸波形の分析である。そこでわれわれは、呼吸測定用トランスデューサーとして小型軽量の熱線式フローメーターを開発した。

熱線は、わずか18 μ φの白金線で、350℃～400℃に加熱した定抵抗型である。方向指示はバリアー方式をとり、図4に示すように気流速測定用センサー部より印加電圧を制御し応答を良くした。方向指示の時遅れは2～4msecである。

図5に熱線式フローメーターの換気量変換特性を示している。

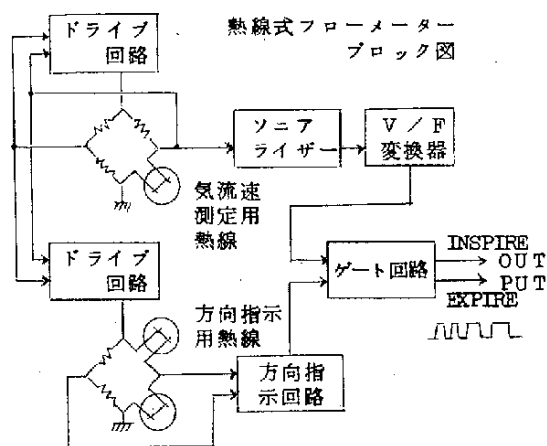


図4 熱線式フローメーターの原理

われわれが開発した熱線式フローメーターは、ポリウムメーターとしては非常に良いスパイロメーターと非常に高い相関があった。

この熱線式フローメーターの出力を換気量に変換するためのMCU(トランジスター方式の記憶回路)を利用し、なるべくHITAC-10の負担を軽減するように企画した。

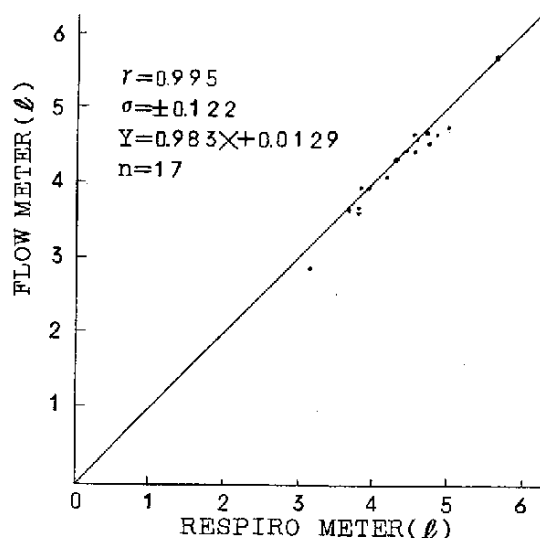


図5 熱線式フローメーターの特性

VI お わ り に

比較的、電子計算機の応用が困難な分野である、医学領域への電子計算機の応用を目的に、本研究を開始した。

特に、最も、電子計算機を応用することによって進歩の期待できる、臨床肺機能検査へ応用し、自動化システムを開発しつつある。

本研究は現在進行形であるが、今後の問題点として次の2点があげられる。

まず記憶容量が、HITAC-10の4K words ではあまりに少なすぎることである。

本研究で、自動端末装置の記憶容量を利用する方法をとっていたが、R.C.U.機構を本自動化システムに持たせるには、記憶容量が不足する。したがって今後、広島大学電子計算機センターの大型電子計算機の端末装置として本自動化システムを接続する計画をしている。

次の問題点は、R.C.U.の機構をフルに活用するためには、適確に、病状を表示するディスプレイの開発が必要である。

本研究に際し、日本情報開発協会の奨励金に対し深謝する。

参 考 文 献

- 1) 西本幸男, 鈴木孝治他; スパイロコンピューターを用いた呼吸機能検査, 日本臨床 27, 12, 昭44
- 2) 西本幸男, 西田修実, 神辺真之, 鈴木孝治, 大塚進; スパイロコンピューターとパンスパイロコンピューター, 総合臨床 19, 12, 昭45
- 3) 西本幸男, 神辺真之, 鈴木孝治他; 呼吸抵抗計の自動化の研究, 22, 3, 昭49
- 4) 西本幸男, 西田修実, 神辺真之, 鈴木孝治他; じん肺における肺機能検査の自動化, 広島医学, 28, 6, 1975
- 5) 西田修実, 神辺真之; 呼吸器用連続ガス分析装置の現状, 医科器械学雑誌, 45, 7
- 6) 西本幸男, 勝田静知, 神辺真也; 呼吸不全対策の問題点, 総合臨床, 22, 2, 昭48
- 7) 西本幸男, 神辺真之, 鈴木孝治他; 肺機能検査自動化の研究(フローメーターの検討)

第14回日本M E学会大会発表

2. フーリエ変換法によるX線廻転断層 二次映像処理の研究

京都大学医学部教授

村 地 孝

(他 5 名)

従来のX線診断は、撮影されたX線フィルムの黒化度の微細な差を、眼で、いわば視覚的に識別する方法であり、フィルムの性質による制限を受け、軽微なX線の吸収差、例えば、脳脊髄液と脳灰白質の区別を描出することは不可能であった。今回の研究目標は、フィルムの代わりにNaI シンチレーション・カウンタを用い、X線の吸収差を数値化し、X線の廻転投射によって得られる多くの情報を、計算機処理にて、フーリエ変換し、体内の微細なX線吸収差を映像として明瞭に描出させる方法の確立と、諸条件の検討であるが、従来のX線診断を定性的なものとするならば、いわばより定量的なX線診断法を目標にしたものと言えよう。

1. まえがき

近年画像処理に対するフーリエ変換の応用が著しく注目されるようになって来たが、医学分野に特に重要な意義を持つと考えられる応用のひとつは、Projection Dataから、二次元像を再生する断層映像法の開発である。

フーリエ変換原理を用いてProjection Dataから断層像再生を行う問題は、Brucell(1956), De Rosier, Klug(1968), Crowther 1970 らによって行われ、続いて1974年より、EMI, PC, OHIO NUCLEAR, SIEMENS, ACTA社らによって実行機の作成が

行われているが、わが国では未だ研究的な報告も尠い現況である。

2. フーリエ変換による断層映像の基本原

濃淡図形の直交座標、および極座標による表現をそれぞれ $\omega(x, y)$, $\lambda(r, \theta)$ とすると, Projection Data $f(\zeta, \phi)$ は (図1A)

$$f(\zeta, \phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \omega(x, y) d\eta = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(r, \theta) d\eta \quad (1)$$

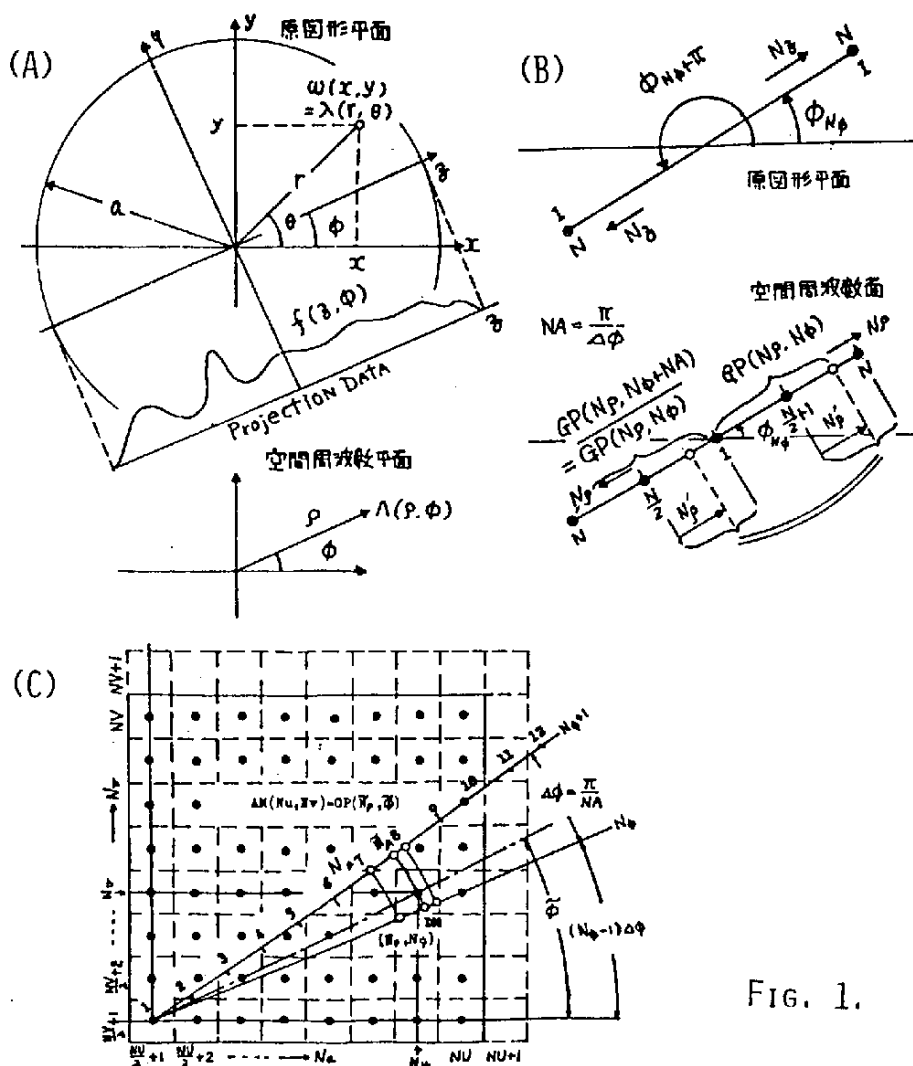


FIG. 1.

と表わされる。 $\lambda (= \omega)$ に対する極座標二次元フーリエ変換は

$$\Lambda(\rho, \phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{2\pi} \lambda(r, \theta) e^{-i2\pi \rho r \cos(\phi - \theta)} r dr d\theta \quad (2)$$

一方, Projection Data f の ζ 軸に関する一次元フーリエ変換は, つぎに示すように, $\Lambda(\rho, \phi)$ に一致することがわかる。

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_\zeta(f(\zeta, \phi)) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\zeta, \phi) e^{-i2\pi \rho \zeta} d\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(r, \theta) e^{-i2\pi \rho \zeta} d\zeta dy \\ &= \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \lambda(r, \theta) e^{-i2\pi \rho r \cos(\phi - \theta)} r dr d\theta = \Lambda(\rho, \phi) \end{aligned} \quad (3)$$

3. 変換式の Discrete 表現と変換像の共役複素関係

Projection Data $f(\zeta, \phi)$ として, ϕ の変域 $0 \sim \pi$ を NA 等分, ζ の変域 $-D/2 \leq \zeta \leq D/2$ を N 等分したものを考える。

すなわち

$$\left. \begin{aligned} F(N_\zeta, N_\phi); \quad N_\zeta = 1, 2, \dots, N-1, N &\iff \zeta = -D/2 \sim D/2 \\ N_\phi = 1, 2, \dots, NA-1, NA &\iff \phi_{NA} = (N_\phi - 1) \Delta \phi \quad \Delta \phi = \pi/NA \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

D の区間を N 等分したことは, 原図形の含む最高角周波数 Ω を

$$\Omega = 2\pi / (D/N) = 2\pi N / D \quad (5)$$

より十分小と考えたことを意味する。変換像 $\Lambda(\rho, \phi)$ として, やはり ρ 軸変域 $0 \sim \Omega$ を N 等分したものの $GP(N\rho, N\phi)$ を考える。

$$GP(N\rho, N\phi); N\rho = 1, 2, \dots, N-1, N \iff \rho = 0 \sim \Omega \quad (6)$$

$\rho \implies N\rho$ への座標平行移動の結果, (3) 式の Discrete Form はつぎのように表現される。

$$GP(N_\rho, N_\phi) = (-1)^{N_\rho-1} \sum_{N_\zeta=1}^N F(N_\zeta, N_\phi) e^{-i \frac{2\pi}{N} (N_\rho-1)(N_\zeta-1)} \quad (7)$$

図 1B に示すように, $\phi = \phi_{N\phi} + \pi$ に対する Projection Data $F(N_\zeta, N_\phi + NA)$ と $F(N_\zeta, N_\phi)$ の間には, 明らかに

$$F(N_z, N\phi) = F(-N_z, N\phi + NA) \quad (8)$$

なる関係が成立する。したがって

$$G_p(N_p, N\phi + NA) = (-1)^{\sum_{N_z=1}^{N_p-1} N_z} F(N_z, N\phi) e^{+i\frac{2\pi}{N}(N_p-1)(N_z-1)} \\ = G_p(N_p, N\phi); \text{Complex Conjugate of } G_p(N_p, N\phi) \quad (9)$$

更に、 $N\rho = N/2 + 1 \sim N$ に対する GP の値を考える。 $N\rho = N/2 + 1 + N\rho'$ と置くことにより

$$G_p(N_p, N\phi) = (-1)^{\frac{N}{2} - N_p'} \sum_{N_z=1}^N F(-N_z, N\phi + NA) e^{+i\frac{2\pi}{N}(\frac{N}{2} - N_p')(N_z-1)} \\ ; (-1)^{\frac{N}{2} + N_p'} = (-1)^{\frac{N}{2} - N_p'}, e^{-i\pi(N_z-1)} = e^{+i\pi(N_z-1)} \quad (10)$$

(9), (10) 式より、GP の値 (複素数) は第一、2 象限、 $N\rho = 1 \sim N/2$ についてだけ求めれば充分である。

4. 変換像の極座標表現から直交座標表現への変換と Data 補間

原図形再生には、GP の二次元逆フーリエ変換が必要である。変換核を分離可能にし、一次元高速 (逆) フーリエ変換を各次元独立に適用できるよう極座標表現 GP ($N\rho, N\phi$) を直交座標表現 AM (Nu, Nv) に変換する。この際生起する問題は、直交座標点 (Nu, Nv) に対する AM の値を GP の近傍点の値から近似する補間問題である。ここでは図 1C に示すように、GP ($N\rho, N\phi$), GP ($N\rho + 1, N\phi$), GP ($N\rho, N\phi + 1$), GP ($N\rho + 1, N\phi + 1$) 4 点の値を用いて、原図形 $\bar{O}(Nx, Ny) (= \omega(x, y))$ は

$$\bar{O}(Nx, Ny) = (-1)^{Nx+Ny} \sum_{Nu=1}^{NU} \sum_{Nv=1}^{NV} AM(Nu, Nv) (-1)^{Nu+Nv} e^{i\left[\frac{2\pi}{NU}(Nx-1)(Nu-1) + \frac{2\pi}{NV}(Ny-1)(Nv-1)\right]} \quad (11)$$

として求められる。

以上のようにソフトウェアの確認を行った後、X 線ビーム走査型廻転断層映像法の基礎的特性を調べるため、簡単な実験装置を試作し、各種ファントム

や生体組織を用いて像再生を行い、従来のX線断層像との比較検討を行った。

5. X線ビーム走査型廻転断層映像法の基礎的特性

Projection Data $f(z, \phi)$ の1点 z におけるデータ x において、1本のX線ビームの、組織通過による減弱過程を考える。検出器において測定されるX線強度 $x = f(z, \phi)$ は

$$x = x_0 \cdot e^{-(\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_i + \dots + \mu_n)l} \quad (12)$$

と表わされる。

$$\log \frac{x_0}{x} = (\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_i + \dots + \mu_n)l \quad (13)$$

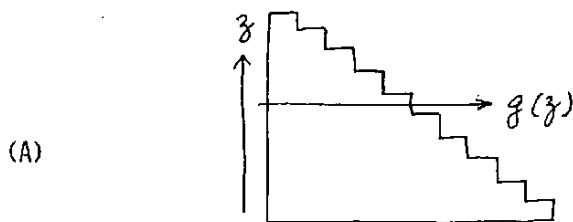
したがって

$$g(z, \phi) = \log e \frac{f(z_0, \phi)}{f(z, \phi)}$$

を、処理すべきProjection Data として、コンピュータに入力することにより、照射断面に含まれる物質の吸収係数 μ_i に関する像が再生されることになる。ただし $f(z, \phi)$ はProjection Axis ϕ 上の z_0 に於けるProjection Dataであって、X線は直接検出器に照射されることになる。

5-1 X線減弱特性の直線性の検討

本基礎実験で用いた検出機構は、線源→物体→NaI 結晶→光電子倍增管→波高分析器→プレアンプ→カウンターという構成から成り、全くRI 検出用のものである。X線の場合には、 γ 線のように単純に離散的粒子線として捉えることができず、カウンターに収録される値は、一定測定時間中におけるエネルギー値が、ある閾値を起したものの離散数値を示すことになる。この数が十分大となるよう、測定時間および閾値をとれば、ピーク数は統計的に、その測定位置における透過X線強度に比例するものと考えることができる。このよう



(B)

A(I)	LOG(G(I))	
10354	1	EE
7432	.71779	EE
5475	.528781	EE
3834	.378292	EE
2599	.251014	EE
1717	.16583	EE
1194	.115318	EE
803	8.52010E-02	EE
623	6.81740E-02	EE
434	4.19162E-02	EE
272	2.62700E-02	EE

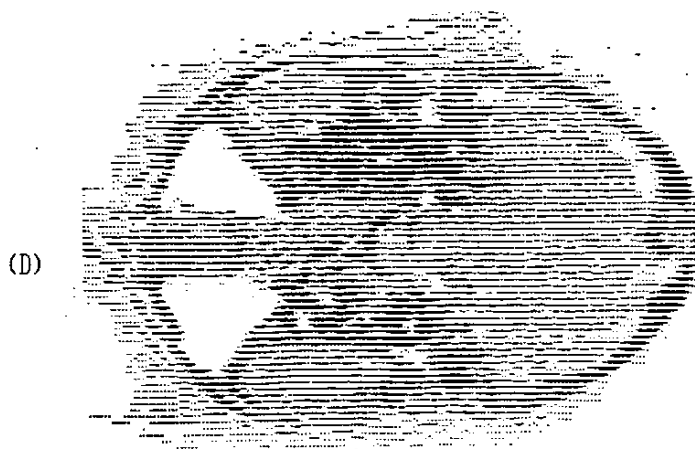
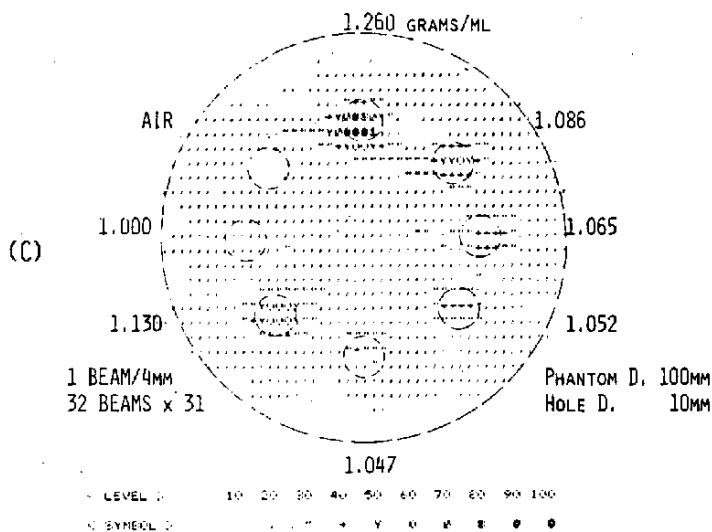


FIG. 2.

な仮定が成立するならば、例えば図2Aのようなファントムを用いた場合、 $g(\theta) - \theta$ 特性は直線でなければならない。図2BはX線ターゲット電圧90KV、DISCRIMINATORのBASE 005と選んだ場合の、アクリル樹脂に対する減弱特性実測値である。図中のA(I)は0.3秒毎のカウントであり、 $\text{LOG}(A(I))$ は良好な直線性を示している。以下の実験はこの条件で行った。

5-2 断層像再生結果

図2Cはレンコン状MIX- D_p の小孔に各種比重のアンギオコンレイ溶液を満したのに対する実験結果で、4mm毎32点の θ 軸走査を 6° の角度で $180^\circ/6^\circ = 30$ 回行ったものである。微小な吸収係数の差が識別可能である。

図2Dは頭蓋骨ファントムの中央部横断面の再生結果である。2mm毎256点の θ 軸走査を 3° の角度で $180^\circ/3^\circ = 60$ 回行ったものである。従来の断層X線撮影と比較すると非常に優れていることがわかる。

6. ビーム走査型断層映像法の実用化・高速化に関する基礎的考察

以上の基礎的検討により、X線ビームを用いる新しい断層映像法は、従来のX線断層撮影に比べ、生体内部の一断面に対する断面前後組織のブレのない鮮明な像再生が可能なこと、組織吸収係数の僅かな差を検知しうることが立証された。

しかし、この方法を実行するには原理上X線ビーム発生源、検出器の精密な平行移動、廻転の位置ぎめの制御が不可欠であり、特に平行移動は、X線源、検出器のマウントされた、かなりの重量のフレームを動かすことを余儀なくされるため、高価なデジタル制御が要求され、しかも達成しうる走査時間には自ずと限界がある。平行移動動作を除去し、データ収集時間を早めるひとつの方法は、多数の平行ビームによる並列データ収集を行うことである。しかし、通

常 30cm ~ 100cm に及ぶ観測面を覆うだけの平行 X 線ビーム群を得ることは、現在の X 線管球製造技術では困難である。

そこでわれわれは、通常容易に実現することができる扇型放射状 X 線ビーム群と、対応する検出器群を用い、放射線源の回転制御のみで、上述の原理による像再生を可能にする方法について検討した。

図 3 は、平行移動なしに、回転制御のみで、高速にスキャン可能な装置のレイアウトを示したもので、線源 X_1 と X_2 、 X_2 と X_3 、 X_3 と X_4 の配置角度は $\pi/2 + \alpha/4$ 、 X_4 と X_1 は $\pi/2 - 3/4\alpha$ である。 X_1 、 X_2 、 X_3 および X_4 の全放射角は β 、 $\beta - \alpha/4$ 、 $\beta - \alpha/2$ 、 $\beta - 3/4\alpha$ である。

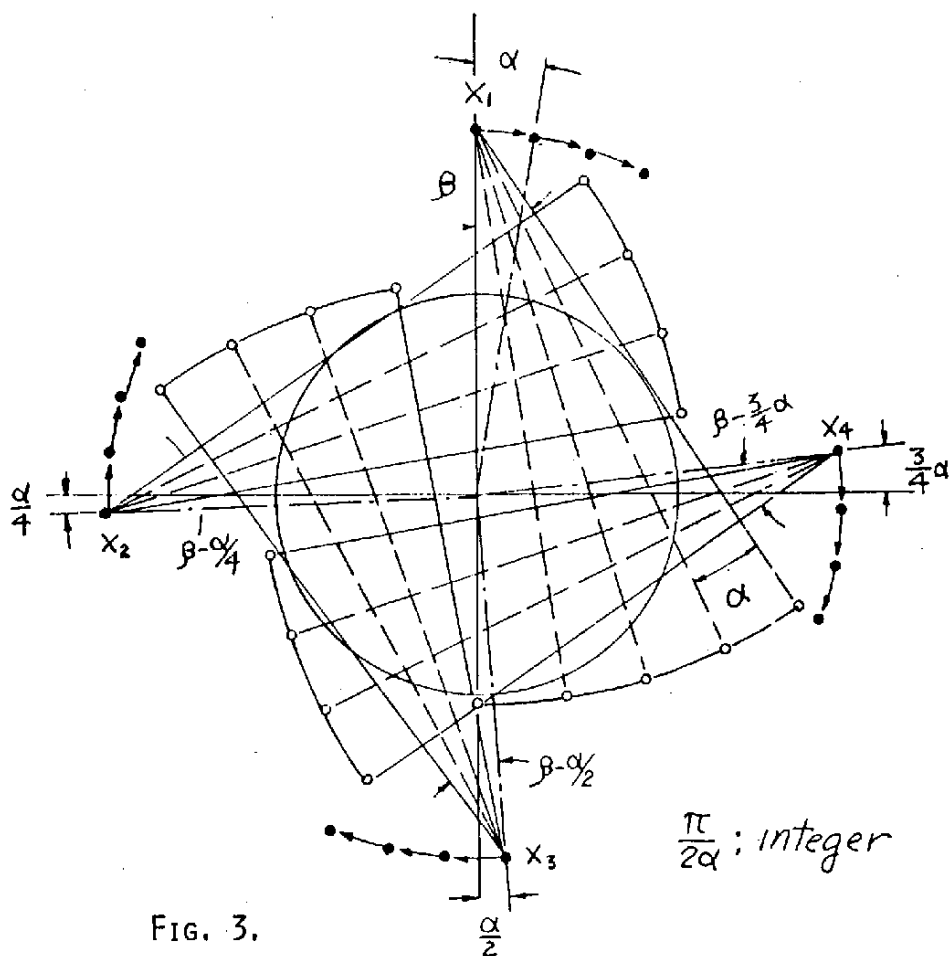


FIG. 3.

7. あとがき

ビーム走査型断層映像法は、従来のX線断層撮影に比べ画期的な解像能をもっており、これによってX線吸収係数そのものの把握が可能になったことがわかった。データ収集を高速化するために考えた扇状ビームによる照射方式は、本断層映像手法に不可決と考えられた平行移動走査を省略可能にするもので、操作メカニズムの簡略化、処理の高速化に有効な手段と考えられるが、この場合は、検出データの並べかえなど、コンピュータでの再生処理を行うまでのデータ前処理の点で少々複雑となるのは止むを得ない。

3. 久山町における成人病の疫学と管理 に関する情報科学的研究（概要）

研究責任者：九州大学医学部教授

尾 前 照 雄 （他 4 名）

は じ め に

医学領域における電子計算機の利用は近年めざましいものがあるが、基礎、臨床医学面での生体シミュレーションのアナログコンピュータや、医学・生物学用のデジタルコンピュータの利用、さらには診療用のオンライン・システムに比べて、社会医学・疫学研究の領域での汎用コンピュータの利用は、標準的なコード化の困難さもあって、本邦では必ずしも普及していない。

私共は、昭和36年以来、13年以上にわたり、福岡県粕屋郡久山町の一般住民を対象として、主として循環器系疾患の疫学的調査と追跡研究を継続する一方、これまでに集積された多量、多岐にわたる各種医療情報を汎用コンピュータを用いて集計、解析処理の迅速化と確実化をはかっている。またこの地域集団中の各個人の健康に関する情報や社会的な生活環境、遺伝学的情報を長期にわたって記録、集積し、データ・バンクの作成の準備をすすめている。

本研究の目標は、1)地域（久山町）住民についてえられた各種医療情報を大型電算機を用いて解析する。2)成人病の成因、進展、予後に関する蓄積された医療情報を、地域住民の健康増進と医療水準の向上を目的として活用する。また成人病の効率的かつ普遍性のある総合的な管理システムのモデルを作製することにある。本稿では、現時点までの作業内容について具体的に述べ、近い将来を展望して概要の報告にかえたい。

1. 久山町研究の概要

昭和36年4月に始められた福岡県粕屋郡久山町の一般住民を対象とした循環器系疾患の疫学的研究（久山町研究¹⁾）は、大別して2期に分けることができる。すなわち昭和36年から昭和46年までの第1期（10年間）と、それ以降の第2期である。第1期における課題は主として脳血管性障害（脳卒中）の発症頻度とその病型分類並びに脳卒中発症要因の分析に関するものであり、第2期のそれは、高血圧および高血圧性心血管系合併症のrisk factorとしての社会・環境要因の分析と降圧療法ないし血圧管理が高血圧者の予後に及ぼす影響を知ることである。研究は一貫して久山方式と呼ばれる一定の方法に従っている。昭和36年4月から6カ月間を費やして、第1回の断面調査と検診を実施した。追跡対象者は昭和36年4月1日現在久山町在住の満40歳以上の男女1,841名中の受診者1,658名（90.1%）から、脳卒中後遺症を有する25名、調査期間に死亡または転出した12名を除く1,621名（第1 cohort）である。昭和36年11月から、この第1 cohortを追跡対象として追跡研究を開始した。追跡の方法は、これらの集団のすべての構成員について、昭和38、40、42、46年の隔年毎（昭和44年を除いて）に、問診、血圧、眼底、検尿、心電図、診察などを含む検診を実施した。また脳卒中発症者については、地域の開業医師の要請をうけて、九大第2内科教室員が地域に出向いて診察を行ない、情報を収集した。死亡例はそのほとんどが、九大病理学教室にて病理剖検を受け、主病変および死因と副病変が検討された。さらに転出者には、訪問、書簡による接触を保ち、何らかの疾病に罹患した場合には、その主治医と連絡をとることにより、情報が収集された。こうした方式に基づいて追跡調査の結果、昭和46年10月31日（10年間）の時点では、生存者1,228名、死亡者333名、うち剖検例271名（81.4%）、転出者の消息（生死）も100%確認された。昭和48年度から49年度にかけて、第2 cohort設定のための断面調査と検診を実施した。昭和48年4月1日現在満

40歳以上の久山町在住者2,631名中2,145名(81.5%)を同期間に検診しえたが、この年度の検診の特徴の1つは、血液サンプルのAutochemistによる分析(JML-Kyushu)で、24項目の血液生化学値に関する情報が新たにえられたことである。現在第1 cohortの追跡調査と第2 cohortのそれとを併行して実施中である。

久山町研究資料、情報は、以上述べてきたことから明らかなように、およそ次の4つに大別される。(1)隔年毎の各個人の検診成績、(2)剖検例の病理解剖所見、(3)各種疾病発病者の病歴、診察記録、入院記録、(4)転出者、死亡者に関する可能なかぎり入手しえた情報などである。これらの資料はそれぞれのフォームに統一されて、九大第2内科資料室に保存されている。このうち検診成績についてまずコンピュータ処理を試みた。九大計数施設の大型電算機センターの汎用デジタルコンピュータにすべて処理し、昭和49年度の検診成績までの入力完了している。次いで病理解剖記録がコンピュータ処理の対象となっている。現在、疾病国際分類(ICD)、SNOPなどを参考にしてコード化の検討がすすめられている。

久山町検診記録の情報が、一般の集団検診のそれと比較して異なる点は、(1)対象集団の移動が比較的少ないため、多くの対象例について死亡に至るまでの連続的な記録が集積されていること、(2)情報内容が比較的多岐、詳細にわたっている点であろう。しかも一地域住民の90%以上を網羅するものであるから、久山町研究は一地域住民についての密度の高い追跡調査を可能にしている。

2. 資料の収集と保存

昭和48、49年度の検診記録の保存項目の一覧を表(1)に示した。以下、入力のためのコード化について略述する。個人識別項目では、昭和36年初回検診時より、一個人につき一番号が付され、この番号(Case No.)は常に入出力の呼び出しに利用されている。他に年号のコード化が行なわれ、現住所、本籍地などは郵便番号により、職業は国際分類に従った。問診記録では、従来の結

表 1 検診記録の保存項目

個人識別項目	問診記録	身体記録	検査記録
1 検診番号	1 家族歴(13項目)	1 身長	1 心電図(ミネソタコード)
2 検診月日	2 生活歴(10項目)	2 体重	2 検尿
3 性	3 社会生活環境(27項目)	3 皮膚厚	3 採尿(カテコールボディー)
4 生年月日	4 既往歴(21項目)	4 握力	4 エンドタクロオーゼ
5 病年齢	5 自覚症(48項目)	5 診察記録(33項目)	5 血液検査(7項目)
6 出生地	6 高血圧病歴(4項目)	6 血圧(6項目)	6 血液生化学(24項目)
7 婚姻		7 眼底	
8 職業			
9 本籍地			
10 現住所			
11 判定			

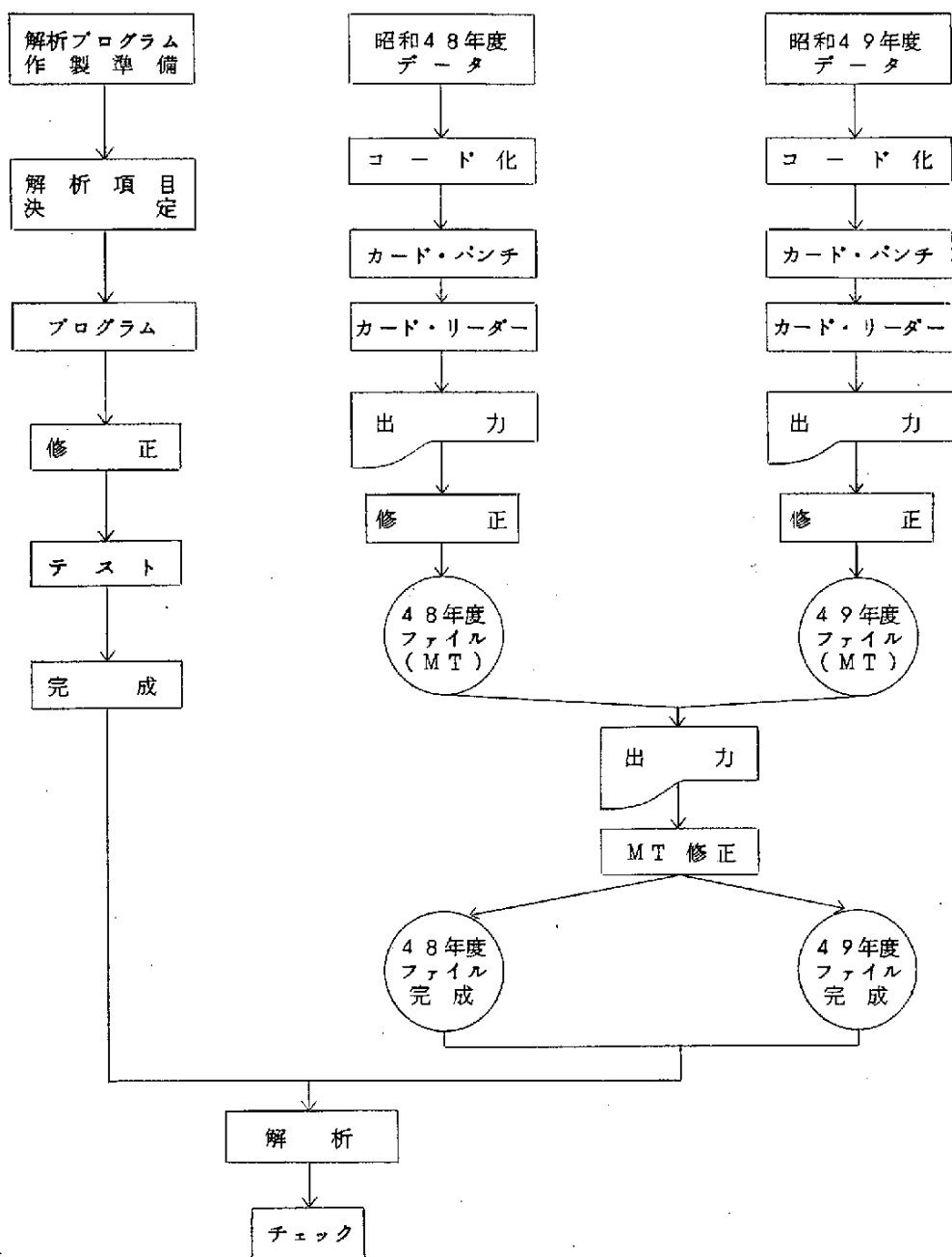
果の分析に基づき、項目をあらかじめ選定した。例えば家族歴では脳卒中、高血圧、心筋硬塞、糖尿病などの13項目の有無について、父母、伯叔父母、兄弟姉妹、子孫の4項目を細分した。生活歴では飲酒、喫煙などの10項目について、量、期間などを組合せた。生活社会環境では学歴、同居人数、年収などの他に、家財道具、クーラー、自家用車の有無など27項目を選んだ。既往歴は循環器疾患に関係があると考えられる21疾病をとくに選んだ。自覚症は循環器、神経疾患の主訴のなかからとくに多い48項目を、私共の臨床記録のなかから選んだ。高血圧病歴については、発見年月、食塩制限の有無、服薬治療の有無、降圧剤の種類をチェックしている。身体記録の項では診察所見のコード化が複雑であった。しかし心雑音、肝脾腫、深部反射などを、それらの有無、程度に従ってすべて数量化し、コード化を試みた。血圧は坐位3回、臥位3回をそれぞれ記録し、あわせて自動血圧計の記録も保存されている。眼底はkw-慶大分類に従った。検査記録は比較的コード化が容易であった。心電図はミネソタコードを用いた。検尿は糖、蛋白、ウロビリノーゲンの定性試験の程度を4段階にコード化した。なおカテコールアミン、クレアチニンの測定も1部に実施している。血液サンプルは採血した後、1部は赤血球数、白血球数、Hb

Ht などの測定用（九大中検アナコン）と血清分離後，JML-Kyushuに送るものとに分けた。この血清は，AG AのAutochemistにより，血清生化学検査24項目（総ビリルビン，直接ビリルビン，GOT，GPT，TTT，ZTT，血清蛋白，アルブミン，ALPH，コレステロール，LAP，LDH，アミラーゼ，ブドウ糖，BUN，クレアチニン，尿酸，Na，K，Ca，Cl，無機リン，総脂質， β -リポ蛋白）について測定がなされた。これらはすべて測定値がそのままコードナンバーとなった。以上の各項目を細項目を1つとして数えると，1個人について保存される資料は280項目の多くにわたった。

入力シートのためのトランスファー・シートは，1枚のトランスファー・シートがカード1枚に対応するように作られた。問診者は検診現場でカラムの下の記入欄に記入しておく。あらかじめコード・ナンバーが決められている項目については，その欄に○印をうつておけば，カラムの記入は容易であり，コーディング・ミスのチェックも容易である。いずれのカード（トランスファー・シート）も76～79カラムはidentificationに用いられ，何回目の検診の何番目に受付けられたかを記入してあり，個人識別のダブル・チェックの役を果たす。80カラムはカード番号である。280項目は7枚のカードにおさめられるようになっており，従って7枚のトランスファー・シート（データ・カード）が1個人のデータのすべてである。コーディングは検診終了後，研究補助員が行なった。

3. 電算機処理の実際

図(1)に電算機処理のフローチャートを示した。コーディングが完了したそれぞれの検診成績用紙（トランスファー・シート）から，ただちにカード・パンチが行なわれた。データは1例につき7枚のカードにおさめられるから，昭和48年度は10,241枚，49年度は4,488枚のカード・パンチが必要となった。これらのパンチはすべて2名の研究補助員によってなされた。常に問題になることは，この段階でのコーディングミス，パンチミスをいかに防止するか



図(1) 電算機処理のフローチャート

という点であった。この点については後述するように、ほぼ3カ所のチェック・ポイントを定めて、データの修正にあたった。

電算機は九大大型計数施設のFACOM230-60を用い、言語はJIS-FORTRAN(水準7000)を使用した。入力はずべてI変換により、出力段階で必要に応じて各種変換を指示した。パンチング終了後、直ちにカード・リーダーから入力し、適当な変換を行なって、データ一覧表をプリント・アウトする。ここで第2のチェックを行う。(第1のチェックはトランスファー・シートの段階)。これには医師が必ず参加して、データ・チェックを行なった。カード・パンチの修正後、280の各項目毎に情報を編集して、磁気テープの所定のフィールドに収納した。隔年度毎に1本の磁気テープを使用し、各年度別のファイルを作成した。将来はデータ・バンクの必要性から、たて割の個人情報と結合したマスター・ファイルを作成しようと考えている。第3のチェック・ポイントではファイル作成後、まず個人識別項目のチェックから行なった。識別番号の原簿(住民登録原簿)との照合、性別の照合、生年月日の照合、それとあわせて生年月日から満年齢を算出させた。その後検診各項目毎にヒストグラムを描かせ、同時に個人識別番号とデータとを印字させた。正規分布に近い度数分布では、当然ながら平均値から隔たる例がチェックの対象となった。これらのチェック後、最終的に磁気テープを修正して各年度別のファイルを完成した。一方これらの作業と平行して、解析のためのプログラムの準備がすすめられている。データの解析には多変量解析を中心とする統計的手法によるが、完成したプログラムは、テスト完了後、可能な限りサブ・ルーチンの形でまとめられ、資料室に登録されるようになっている。

4. 情報科学的解析の1例

現在までは資料の集積、集計に作業の重点がおかれ、ファイルを用いての実際の解析は、まだ開始されて間もなく、今後の作業の重点の1つである。こ
2)
ではその1例として、脳血栓発症要因を久山町における6年間の脳血栓発症者

52例について、検診資料の多変量解析によりえられた成績について述べる。

検診項目のなかから年齢、脳卒中の家族歴、血圧値など13項目を選んだ。発症者と非発症者を判別する線型判別係数を標準化して計算し、各項目の重みづけを試みると、男女とも、年齢と収縮期血圧が判別に関与していた。次いでこの線型判別係数を使用して、脳血栓発症危険度を各個人毎に計算して、発症予測を試みた。次の4年間に発症した22例について、一定期間内に発症すると予測して実際に発症した例数と、発症しないと予測して発症しなかった例数の合計を予測成功例と考え、他の例をすべて失敗例とした。予測成功率を計算すると男子では74.8%、女子では66.7%に予測は成功した。さらに同様の症例を用いて、年齢、収縮期血圧、拡張期血圧の3つの要因に、その他の10個の要因を1つずつ加えた場合の予測率の変化を検討すると、男女とも、最大の予測成功率は年齢、収縮期血圧、拡張期血圧、眼底変化、蛋白尿、心電図上の高R波の組合せでえられる。

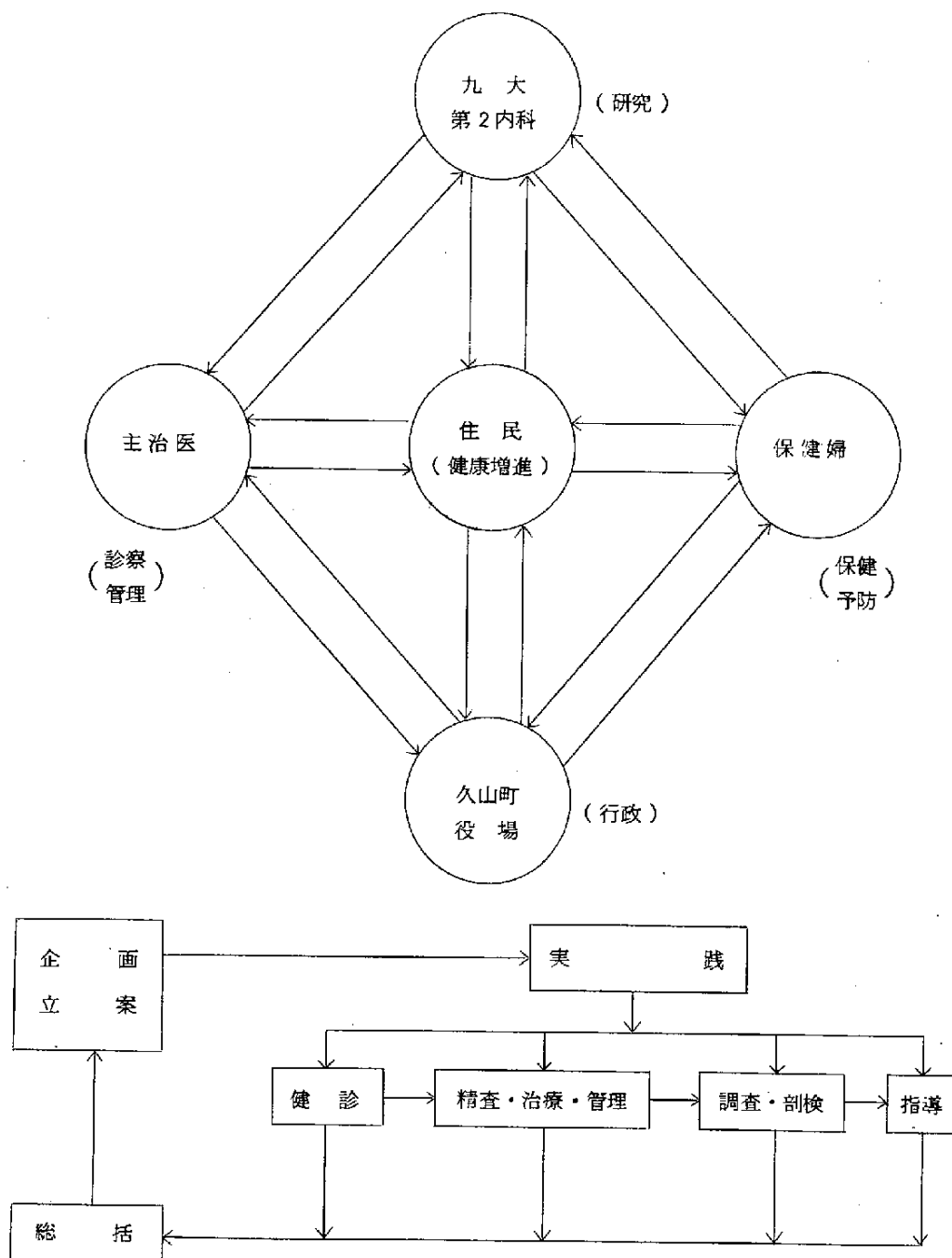
現在、昭和48、49年度の検診成績を用いて、血液生化学値の検討を行っているが、この成績は、今秋の日本老年医学会総会、日本腎臓学会総会に発表の予定である。

5. 久山町成人病管理におけるFeed-back system

本課題を完結するにあたり、基本的に重要なことは、1)地域住民との深い信頼関係を基盤とする。2)信頼性の高い方法で医療情報を長期にわたり集積する。3)大型電算機による多角的分析。4)普遍性のある成果を社会に還元する。(5)健康増進を最終目標とする。の5項目に集約できると考えている。

久山町においては、妊娠中の母親の再教育に始まる一貫性のある健康管理システムの確立を目標に、住民、開業医師、町当局と私共が一体となった、地域住民の健康増進のための協力態勢が確立し、久山町研究によりえられた成果に基づき、住民健康管理および包括医療の実践という形で、地域住民に還元するシステムをとっている点に久山町研究の特色の1つがある。³⁾図(2)に久山町成人病管理におけるFeed-back systemのシェーマを示す。

図(2) 久山町成人病管理における Feed-back System



現在私共は、拡張期性高血圧者の濃厚管理を開始する一方、久山町成人病検診の一環として、循環器検診のみならず、胃集団検診、結核検診時にも血圧測定を実施し、高血圧者をもれなくスクリーニングするように努めている。このシェーマは地域の医療行政、保健婦、開業医師（主治医）、研究陣（九大第2内科）が有機的な連繋のもとに住民（成人）の健康管理にあたっていることを示したものである。今後、成人病に関する信頼性の高い疫学的・臨床病理学的データに基づいて総合的な地域医療計画や医療情報システムの開発にさらに努力を続けねばならないと考えている。

6. 展 望

近い将来情報解析の進展に伴い、疫学的、臨床病理学的側面では、第2 cohortの追跡の過程で、高血圧者の risk factorの検討による成績、血圧管理の心血管合併症予防効果についての評価がえられるであろう。他方個人、家系の record linkage により成人病の遺伝学的解析にとりかかることになろう。また病理剖検所見のファイルを連結することにより、死因のみならず、高血圧性臓器変化、動脈硬化などと生前の各種複合要因との相関性も明らかにしたい。

社会医学、予防医学の側面では、各個人の集積されたデータをデータバンキングし、必要に応じ、迅速に一定のフォーマットで出力し、住民の各個人または当該医療関係者に還元できることになろう。

このような作業の積み重ねにより、community medicineのあるべき姿に、さらに1歩近づくことが可能になると考えている。

お わ り に

一地域住民を対象とした循環器系疾患の疫学的研究の概要と電算機による情報処理の一端を述べ、私共が行なっている成人病の管理に関する Feed-back systemを簡単に紹介した。

文 献

- 1) 勝木司馬之助：久山町研究 日本内科学会雑誌 60：3-7, 1971.
- 2) 広田安夫：Risk factors - 脳血栓 最新医学 29：1336-1342, 1974.
- 3) 尾前照雄，竹下司恭：高血圧，動脈硬化，脳血管性障害 - 早期発見の態勢と管理 - 最新医学 27：2333-2340, 1971.

4. 大気汚染分布の三次元的な多元情報の 実時間計測および高速度処理のための 新しいレーザー・レーダー・システム の開発研究

東北大学電気通信研究所

教授 稲場 文男 (他2名)

1. はじめに

レーザー光をセンサーとして用いるレーザー・レーダーは、大気計測や公害監視などの極めて有力な手段として急速な進歩を遂げ、広い応用分野を開拓してきた。^{1,2)} 特に、レーザー・レーダーは公害監視の場合、従来の一地点でのポイントサンプリングによる化学的測定法と比べて、公害物質や状態の遠隔的かつ三次元的分布の測定が可能であるというユニークな特性を備えている。

現在までレーザー・レーダーによって遠隔測定を試みられている大気情報としては、各種大気汚染物質の同定と定量をはじめとして、湿度や温度、視程、風速、雲の状態、降雨量、スモッグ層の観測など多数挙げられる。ところが、従来これらの大気情報は単一機能のレーザー・レーダー装置を用いて個別的に測定が行なわれているに過ぎない。しかしながら、これらの大気情報の測定法には相互に類似する点が多く、ハードウェア面での共通性を生かすと共に、電子計算機を用いた高度な情報処理を十分に活用するならば、一台のレーザー・レーダー装置で上記のほとんどの大気情報が同時に実時間で測定できることが、本研究者らの基礎研究で明らかにされた。³⁾ しかも、これらの情報を広域に亘って測定することが出来れば、一種類の大気データの測定のみでは従来求められないような新しい大気情報や極めて高精度の測定方式も実現されることが期待される。

本研究はこの様な観点から、電子計算機を高度に利用して広域に亘る大気汚染物質やそれに関連する各種の気象状態を一台の装置で三次元的に実時間測定するためのレーザー・レーダー・システムを開発すると共に、それを実際に動作させて得られる豊富な基礎的データを詳細に検討して、本システムの有用性を明らかにすることを目的としている。

2. レーザー・レーダーによる大気パラメータの測定原理

まず、レーザー・レーダーにより測定可能な大気情報の内で、本研究で目指している大気汚染物質の空間的分布、および湿度や視程を求めるための大気中の光の減衰率、エアロゾルのミ-後方散乱より得られる雲や降雨量、スモッグ層などの三次元分布の情報などの測定の原理について述べる。

はじめに、大気汚染分子の分布状態の測定には、本研究者らが最初に開発したレーザー・ラマン・レーダー方式を利用する。⁴⁾ ラマン散乱は物質を構成するそれぞれの分子が入射光に対し、各分子に固有の波長変換した光を散乱する現象であり、その強度は分子の持つラマン散乱断面積 σ_R を分子密度 N に比例する。レーザーレーダーによる遠隔的測定の場合、受信電力 P_i は

$$P_i = P_0 K l A_r N \sigma_R e^{-2 \int_0^R \sigma dr} / R^2 \quad (1)$$

与えられ、ここで、 P_0 はレーザー光出力、 K は装置の効率、 l はレーザー光パルス空間長の半分の値、 A_r は受信断面積、 R は散乱体の距離、 σ は途中の大気の減衰係数である。したがって、予め各分子のラマン散乱断面積を測定しておけば、各分子のラマン散乱光の強度から、分子密度が求められる。しかし、 σ の値が変動し強度の絶対値を正確に求めることは困難なので、密度が既知である同一地点での窒素分子のラマン散乱光を同時に測定し、その強度比をとることにより精度の高い分子密度の値を求める方法が利用される。筆者らはこの測定方式を最初に提案し、基礎実験を重ねて排煙中の SO_2 、 CO 、 CO_2 などの微量分子の検出に成功したものである。⁴⁾

つぎに、湿度分布の絶対値は、前記の大気汚染分子の検出と同様、レーザー・ラマン・レーダー方式を用いて大気中の水蒸気分子からのラマン散乱光を選択的に検出し、その強度から求めることが可能である。汚染分子に比べ水蒸気分子の密度が通常の大気では大きいので、検出は容易であるが、高い精度で測定するためには高度の情報処理法による測定精度の向上技術が必要となる。

さらに、レーザー光の減衰係数 σ および視程の測定は次のようにして行なわれる。すなわち、(1)式で示されるようにレーザー・レーダーで観測される大気中の窒素分子のラマン散乱光の強度 P_{N_2} は β と途中の窒素分子密度に比例するが、この値は標準大気の情報などからほぼ正確に求められる。そこで、 P_{N_2} の測定値を変動する要因のうち、未知の情報は σ のみとなり、その測定値を電子計算機で処理して σ の空間分布を求めることが可能となる。また、減衰係数の空間的な平均値 $\bar{\sigma}(\text{Km}^{-1})$ と視程 $V(\text{Km})$ との間には波長 $\lambda = 350 \sim 1540 \text{ nm}$ の範囲で、次式の関係が成立することが実験的に確かめられている。

$$\bar{\sigma} = \frac{391}{V} \left\{ \frac{550}{\lambda} \right\} 0.58 V^{1/3} \quad (2)$$

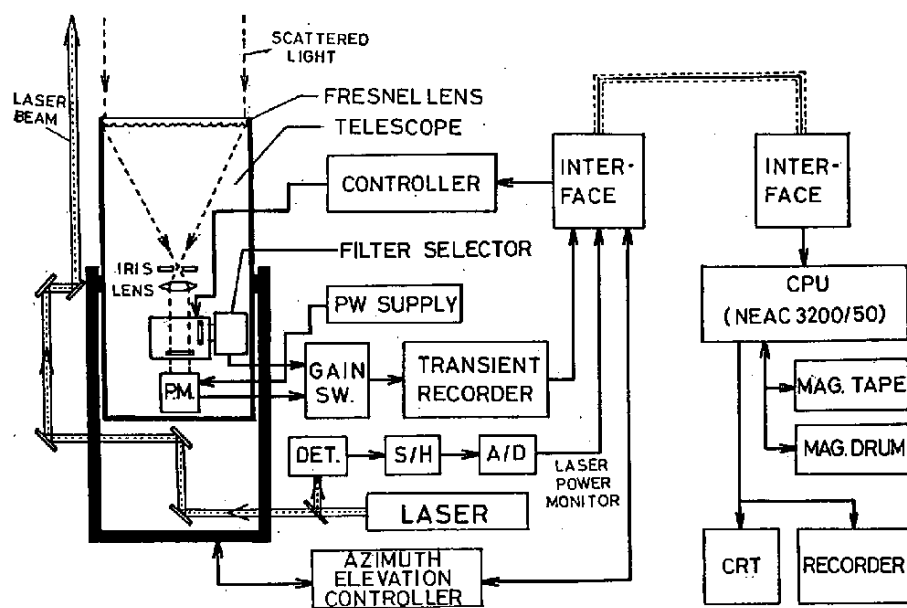
この関係式を用いて $\bar{\sigma}$ の測定値から任意の方向に対する視程 V がレーザー・レーダー方式により導出できる。

さらに、大気中に浮遊するエアロゾルによるミー散乱の強度を決定する体積後方散乱係数 β_{Mie} は、エアロゾルの密度とその種類、屈折率、粒径分布などの性質に依存する量である。レーザー・レーダーでミー散乱光を観測する場合に、その強度 P_{Mie} は β_{Mie} と減衰係数 σ に依存する。本研究においては、 σ は先に述べたレーザー・ラマン・レーダーによる方法で別個に測定が可能なので、 P_{Mie} の値から β_{Mie} が直接導出できる。また、ミー散乱パラメータ K はエアロゾルの全散乱光強度に対する後方散乱光強度の比として定義され、本測定法によれば σ と β_{Mie} の比から導出できる。この K の量からエアロゾルの種類や粒径が判定でき、さらに雲や降雨、スモッグ層の観測においてもその特性についての情報が得られるため、重要な要素である。なお、この K は、本研究で実現され

るような実時間で高速度の測定的法により初めてその空間分布の測定が可能となるパラメータである。

3. 本研究で開発するレーザー・レーダー・システムの概要

前節で述べた各種の大気汚染ならびに大気パラメータ情報の多くは、目的とする散乱光を選択的に受光するための波長選択フィルタを切換え、これらの多重信号光のデータ処理の方法を採用することによって一台のレーザー・レーダー装置で測定することが可能である。我々はこの点に着目し、単一のレーザーおよび受信系を用い、各対象を時間分割して測定するためのシステムの開発に着手した。一般に、大気状態がほぼ一定であると見せるような短時間内に全ての測定が完了できれば、得られるデータの相互相関が大きく、大気多元情報の実時間測定という目的が達成できる。そのためには高速、高精度の測定と高速度のデータ処理法が要求される。



第1図 多元パラメータ計測のためのレーザー・レーダーシステムの構成

第1図にこの目的を実現するために開発しているレーザー・レーダー・システムのブロック図を示す。信号光強度を増大させ、高速度の測定を可能にするため、この装置には種々の考慮が払われている。まずレーザー光源には高出力で高速繰返し可能なNd:YAGレーザーの第2高調波(波長532nm, 最大出力20mJ/pulse, 最大繰返し50pps)を用いている。受信望遠鏡には直径50cmの大口径のフレネルレンズ型屈折望遠鏡を採用した。従来、レーザー・レーダー用の受信望遠鏡としては直径30~50cmの主鏡から成るニュートン型またはカセグレン型の屈折望遠鏡が用いられていたが、これに比べてフレネルレンズは著るしく軽量、かつ安価であり、光学的特性も良好であることなどの特徴を持っている。また、光学系の効率を向上することや量子効率の高い光電子増倍管を選ぶことなどの配慮は通常のレーザー・レーダーと同じである。さらに、高速繰返し動作のレーザー・レーダーで得られるデータの量は膨大であり、これを効率よく解析し表示するために、検出器出力を高速アクセスタイムを持つ中型コンピュータにオンラインで接続してデータ処理を行なわせている。なお、この装置における受信データ量は8ビットを1ワード(1測定値)として、50Kワード/secである。

このレーザー・レーダー装置において、夜間の動作条件を考慮した場合、湿度と減衰係数の測定では約1.5Kmの距離までの高精度のデータを得るための所要時間は約20秒であり、またミー散乱光の測定の場合にはミー体積後方散乱係数がラマン散乱断面積に比較して著るしく大きいために、1秒以下の時間で測定が可能である。なお、この測定時間は大気汚染物質の測定の場合には測定物質の種類や濃度、距離などの条件により大きく異なる。

第1表に、本装置の性能および特性をまとめて示す。測定の方法としてはまず、波長選択フィルタを切り換えることにより各測定対象を選択して、レーザー光を大気中に送出し、種々の散乱体からの散乱光を集光し、光電子増幅管で受信する。受信された信号はトランジェント・レコーダでデジタル化され、直ちにコンピュータに転送されて一担、記憶される。レーザーは繰返し動作を行

LASER — SECOND HARMONIC OF Nd ³⁺ :YAG LASER	
WAVELENGTH	532 nm
MAX. REPETITION RATE	50 pps
MAX. ENERGY	20 mJ/pulse
PULSE DURATION	20 ns
BEAM DIVERGENCE	3 mrad
TELESCOPE — FRESNEL LENS REFRACTING TELESCOPE	
DIAMETER	50 cm
FOCAL LENGTH	80 cm
SPOT SIZE	0.5 mm
TRANSIENT RECORDER — MODEL DL905 (DATA LAB)	
MIN. SAMPLING TIME	200 ns
RANGE RESOLUTION	30 m
BIT NUMBER	8 bit/word
WORDS NUMBER	1024 words
INTERFACE	
CHANNEL NUMBER	14 channel parallel
TRANSFER TIME	30 μ s/word
CABLE LENGTH	200 m
COMPUTER — MODEL NEAC-3200/50 (NEC)	
CORE MEMORY	24 kwords
CYCLE TIME	0.96 μ s
CPU DATA PROCESSING TIME	20 ms/1024 words
TOTAL PROCESSING TIME	50 ms/laser shot

第 1 表 システムの特性の概要

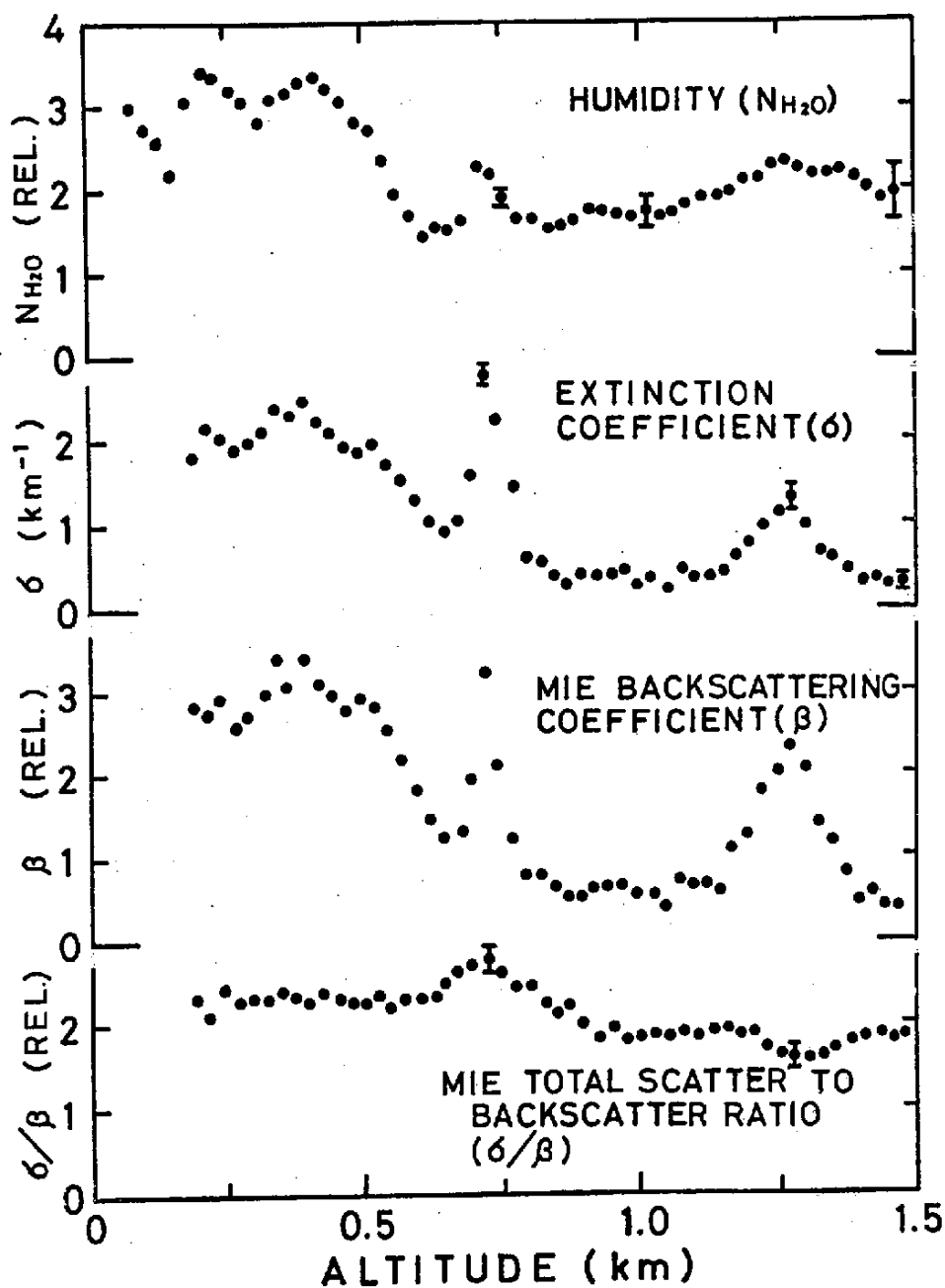
ない、多数回の測定データはコンピュータで加算される。この操作により十分に精度に達した時、測定対象を順次切換えて同様の測定を行なう。この様にして全ての測定が終了した後、各データの距離的分布状態や相関分析などの演算が行なわれ、それらの解析が表示されるようになっている。

4. 基礎的研究の成果と今後の目標

現在までに前節で述べたレーザー・レーダー装置がほぼ完成し、基礎実験が可能な状態になっている。さらに本システムで現在開発を進めている部分としてはまず第1図に示すゲインスイッチ部が挙げられる。これは、信号強度のダイナミックレンジを広げるため、まず信号を対数変換してからトランジェント・レコーダーに記憶させるための演算回路であり、この方式により、測定できる距離範囲を大きく広げることが可能である。つぎに高精度の測定を行なうためにレーザー出力を常にモニターすることが必要であり、そのために、サンプリングホールド回路とA/D変換器の利用を進めている。その他、データ転送部やコンピュータのプログラミングを最適化して、高速度処理を行なわせるために総合的に様々の検討、改良を進めている。

基礎実験としては第2節で述べたような各種の大気情報を同時に測定することを試みている。第2図はその結果の一例を示すもので、測定は距離分解能30m、レーザーの繰返しを20ppmの状態で行なった。実験では大気中の水蒸気および窒素分子のラマン散乱光強度と、エアロゾルによるミー散乱光強度を求めて、その結果から水蒸気量の空間分布とレーザー光の減衰係数、ミー体積後方散乱係数、ミー散乱パラメータおよび視程の5つの大気パラメータを導出した。各大気パラメータの最適な測定に要する時間は異なるが、ここでは各測定とも全て1分の時間で行なった。

第2図に示す測定結果から本システムによる測定法の利点として次の事項が挙げられる。まず、1台のレーザー・レーダー・システムで得られるデータの量が著るしく多量になること、また各測定データの相関分析を行なうことにより測



第2図 大気中の湿度，減衰係数，ミー後方散乱係数およびミー散乱パラメータの高度変化の測定例

定精度が大幅に向上すること、ミー散乱パラメータのような新らしい情報が得られること、さらに高速度の測定により、大気状態の短時間での変化を把握することが可能となったこと等である。

以上のような基礎実験データを基に、今後の研究の目標としては、1) システムの信号処理系の全てを完成させ、定常的な動作による大気観測を可能にすること、2) ミー散乱パラメータに関する理論的解析と基礎的実験を重ね、雲雨やスモッグ層の定量観測のための基礎的資料を得ること、3) 本装置を用いて定常的な大気汚染状態の観測を行ない、他の測定方法によるデータと対比して本遠隔的測定方式の高精度でかつ汎用性を実証し、その有用性を明らかにしたい。

5. む す び

本報告では、大気汚染分布およびそれに影響を与える種々の大気情報の多元的情報を3次元のかつ実時間で測定するための新らしいレーザー・レーダー・システムの構成と基本的特性について述べ、またこの目的のために試作開発しているレーザー・レーダー装置の概要について明らかにした。既に基礎的な動作実験により本システムの動作特性のユニークさが示され、その一部は国際会議にも報告されて³⁾、世界的にも注目されている。さらに、現在より優れた動作特性を得るために多元データの高速度処理法を中心に鋭意改良検討を加えており、本研究計画の終了の時点までに所期の目標が達成される見込である。

文 献

- 1) 稲場, 小林: "レーザーハンドブック" 114章, p.664, 朝倉書店 (1973).
- 2) R.T.H. Collis, *Advances in Geophysics*, 13, p.113, Academic Press (1969).
- 3) H. Shimizu, T. Kobayashi and H. Inaba: 1974 International Laser Radar Conference, Abstracts, I-14, Sendai (1974)
- 4) T. Kobayashi and H. Inaba, *Appl. Phys. Letters*, 17, p.139 (1970)

5. 高速液体クロマトグラフ・プラズマクロマトグラフ・コンピューターシステムの開発と利用

京都大学理学部

教授 波多野博行（他7名）

〔研究の目的と意義〕

本研究の目的は、最近著しい勢いで高速化されてきた液体クロマトグラフと、また最近開発されて斯界の注目を浴びているプラズマクロマトグラフとを連結して自動化し、コンピューター化するシステムを完成して、これによって超微量（ $10^{-12} \sim 10^{-5} g$ ）分析を可能にし、化学のあらゆる分野の基礎研究にはもちろん、最近の公害分析などの応用分野にも強力な武器を提供することにある。

これによって極めて薄い濃度で存在する空気中あるいは水中の微量物質の分析が可能となり、またイオン分子反応や電子捕獲反応の機構の研究にも役立つので、物理化学的基礎研究のみならず大気汚染、とくに光化学スモッグの初期過程の検索、あるいは河川や海水の汚染原因の究明などに資することができ、それによって公害の予報・防止・規制・対策などに大きく貢献することができる。

〔研究の経過〕

液体クロマトグラフィーとは固定相として固体または液体の充填剤を用い移動相として液体を用いるクロマトグラフィーを総称する。試料中の成分の固定相と移動相とへの分布の差を利用して各成分を分離するクロマトグラフィーの一種で、移動相に気体を用いるガスクロマトグラフィーのほかはほとんど液体クロマトグラフィーである。

今世紀の初頭、Twettによって創始された方法であるが、1940年頃、

Martinによって分配クロマトグラフィーが確立され、またガスクロマトグラフィーも創始されるに及んで系統的な分離分析法として確立したものである。これに用いられる装置、クロマトグラフもガスクロマトグラフの著しい進歩と、アミノ酸分析計の画期的発明により完成し、分析法は迅速化、微量化の一途をたどって来た。液体クロマトグラフも最近著しい進歩を遂げ、1970年頃より高速液体クロマトグラフがガスクロマトグラフと同じように便利に利用できるようになった。

波多野らは1961年、分光光電比色検出方式の液体クロマトグラフ^{1,2)}を世界ではじめて完成し、つづいて1962年には2波長検出方式のアミノ酸分析計³⁾を完成し、最近では分光蛍光光度検出方式の高速液体クロマトグラフ⁴⁾を完成した。

プラズマクロマトグラフィーとは微量の気体試料を放射性 ^{63}Ni の β 線でイオン化したイオンとイオン分子反応によってイオン分子に変え、これを電場に導いて常圧で泳動させ、その滞留時間の差を利用して分離しエレクトロメーターで検出する方法である。

この方法は1970年Karasek⁵⁾によって開発された方法でppb(10^{-9})の濃度でよく分離検出することができるので微量分析法として注目されている方法である。

クロマトグラフィーはこのように気体、液体いずれの物質をもよく分離検出同定できるすぐれた分析法であるが、分離された成分の同定は試料がカラムの中に保持される時間(保持時間)、またはその間に流れた移動相の体質(保持体積)の異同のみにたよって行われている点に若干の弱点がある。したがって完全なる同定のためには分離された成分を分光学的方法、磁気共鳴法、質量分析法などによって確実を期さねばならない。このためにはガスクロマトグラフには早くから質量分析計を結合せしめ、ガスクロマトグラフ・質量分析計(GC-MS)として最近著しい進歩をみせている。この結合にはいろいろのインターフェースが用いられて成功しているが、これを液体クロマトグラフに応用

しようとしても必ずしも成功しない。これは 10^{-4} torr もの高い真空度を必要とする電子衝撃形質量分析計が用いられているためである。最近の液体クロマトグラフには化学的イオン化形質量分析計が用いられている。これは $1 \sim 10^{-1}$ torr の真空度しか必要とせず連結が容易なためである。これと同じように、プラズマクロマトグラフは常圧の分離器であるからこれは液体クロマトグラフと連結して成功する可能性が考えられる。事実 Karasek はすでにこのことを示唆している。⁶⁾

一方、液体クロマトグラフィーの高速化に伴ないそのデータ処理は従来のような手操作による方法では到底追付かず、ガスクロマトグラフと同じようにそのコンピューター化が必然的に要求される。さらに液体クロマトグラフとプラズマクロマトグラフとの連結に当っては、そのコンピューター化が必要である。

これらの諸要求が本研究に到らしめた経過である。

[研究の結果]

(1) 分光蛍光光度検出方式高速高压液体クロマトグラフの完成

従来の高速液体クロマトグラフはその殆んどが $70 \sim 100$ 気圧程度の圧力で高速化されていたが、本研究によって高圧力約 300 気圧まで昇圧することができるようになり、一層迅速に分析できるよう高速化された。

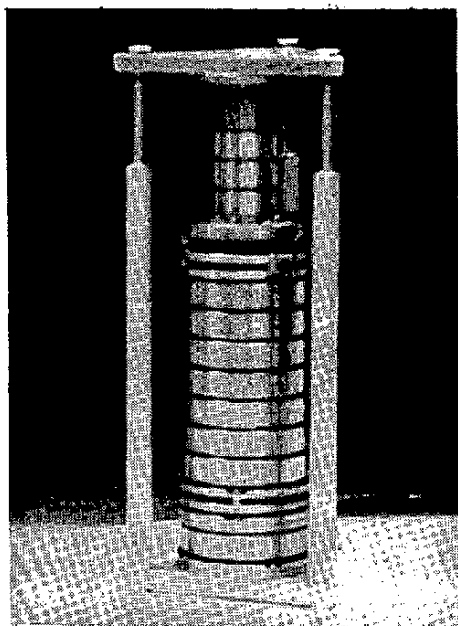
また、従来の検出には殆んど紫外部 254 nm における検出が主であったが、これに分光蛍光光度計を付属せしめ、多目的でしかも高感度 10^{-12} g の検出を可能ならしめた。このものはまた励起、発光の両スペクトルをラビッドスキャン方式で観測できるので、定性的固定における弱点が救われることとなった。

本研究の成果はすでに発表された^{7, 4)}ので資料^①を添付しておく。

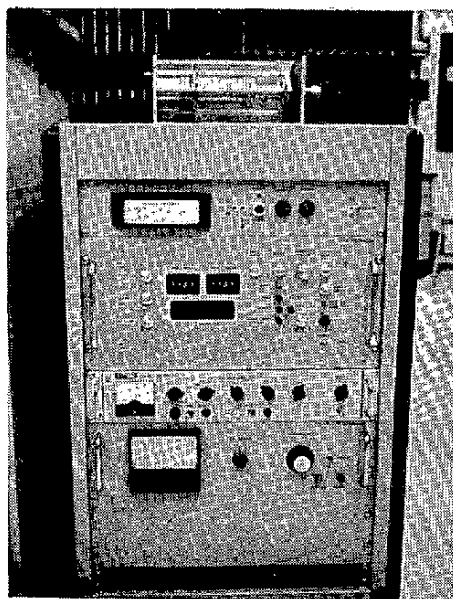
(2) 新小型プラズマクロマトグラフの完成

従来のプラズマクロマトグラフをトランジスター化し、種々の改良を加えて使い易くし、さらに液体クロマトグラフとの連結とコンピューター化を容易にするために、新小型プラズマクロマトグラフチューブを完成した。⁸⁾

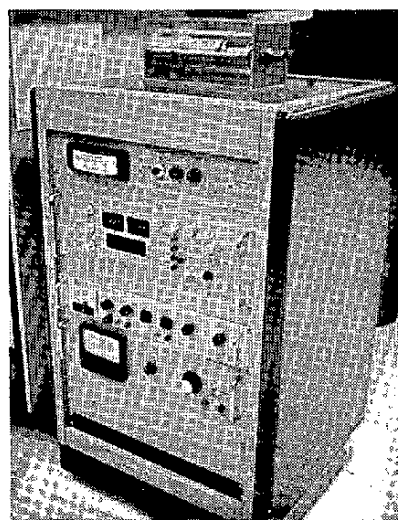
資料^②はプラズマクロマトグラフチューブの内部構造を示す写真である。



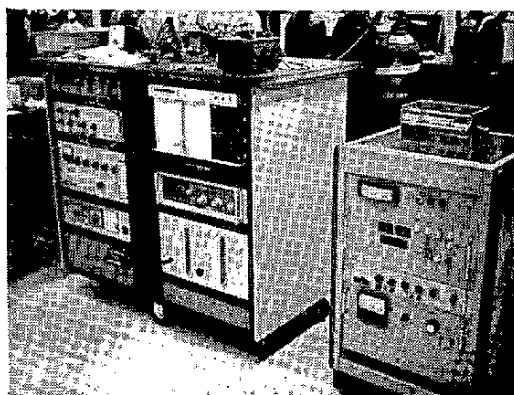
写真① 新小型プラズマクロマトグラフチューブ



写真② 新小型プラズマクロマトグラフ（正面）



写真③ 新小型プラズマクロマトグラフ（斜側面）



写真④ 旧大型プラズマクロマトグラフ（左）と新小型プラズマクロマトグラフ（右）

本研究によって完成した新小型プラズマクロマトグラフチューブを写真①に、これを装備した新小型プラズマクロマトグラフを写真②、③に、そしてこれを従来の旧型と比較して写真④に示しておく。

(3) 高速液体クロマトグラフのコンピューター化

高速液体クロマトグラフ Du Pont 830 型、日本分光 350 型に分光螢光光度検出器 FP-4 型を付属せしめて、Hewlett-Packard 3380A 型コンピューターを接続して、高速液体クロマトグラフのコンピューター化が完成した。

これによって、汚染大気塵中のクロロホルム抽出物中の高沸点成分を分析した。カラムには Permaphare ODS を用い約 20 成分を検出し、これと既知成分、ナフタレン、ビフェニール、フェナンスレン、ピレン、クリセン、ベンツ (a) ピレン等を保持時間によって比較した。

全コンピューター化されたこれらの高速液体クロマトグラフィーの結果を図 1 ～ 3 に掲げる。なお既に発表された要旨を資料③に添付しておく。⁹⁾

図 1. a 汚染大気塵のクロマトグラムコンピューター化

b 同上 (京都) 原図

図 2. a 同上 コンピューター化

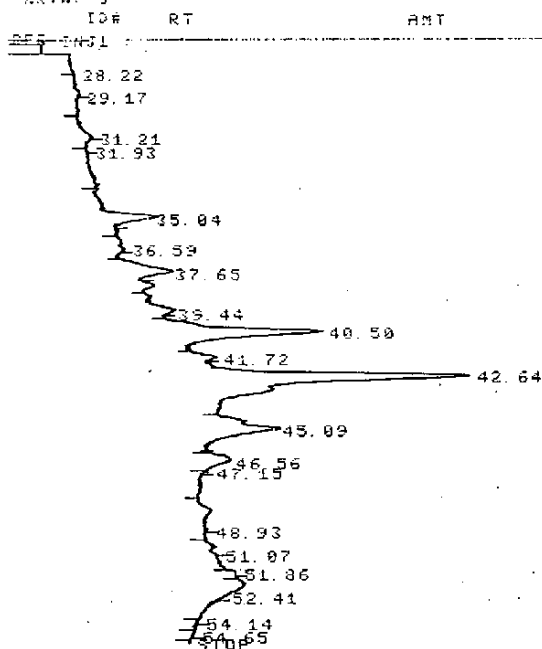
b 同上原図 (ウォータールー)

図 3. a 標準化合物のクロマトグラムコンピューター化

b 同上 原図

NRTH. 5

1a



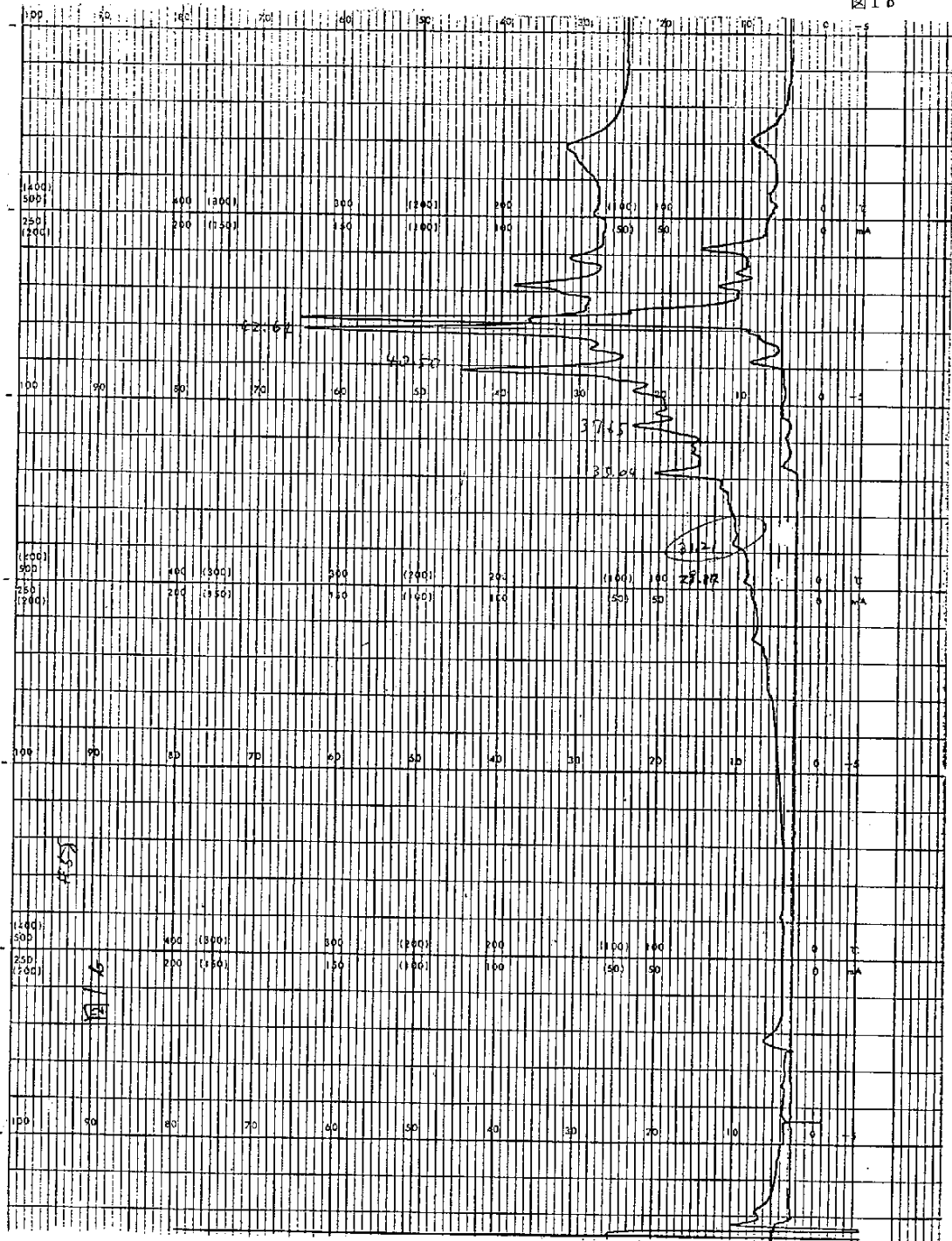
RT	TYPE	AREA	NO CAL	=> AREA %
6.08		62		.207 7
7.61		101		.338 4
10.77		58		.194 3
14.88		499		1.672 5
16.04		67		.224 5
17.07		35		.117 3
18.54		45		.150 8
18.88		137		.459 9
21.18		127		.425 8
21.72		126		.422 1
23.33		216		.722 6
24.51		94		.314 9
25.53		117		.392 2
25.81	M	90		.301 5
26.90	M	161		.539 4
28.22		299		1.002 1
29.17	M	159		.532 7
31.21		37		.124 4
31.93		24		.080 4
35.04		1454		4.871 1
36.59		394		1.318 8
37.65		1893		6.34 7
39.44		402		1.347 7
40.50		5878		19.69 9
41.72	M	323		1.082 2
42.64		10333		34.62 9
45.09	T	3771		12.63 9
46.56	I	1319		4.419 9
47.15	TM	66		.221 1
48.93		392		1.307 7
51.07		161		.539 4
51.86		66		.221 1
52.41		320		2.747 7
54.14		31		.103 3
54.65		72		.241 2

AF 33808
OLV OFF
RUM 30

STOP 53
ATTN 1

REJECT OFF

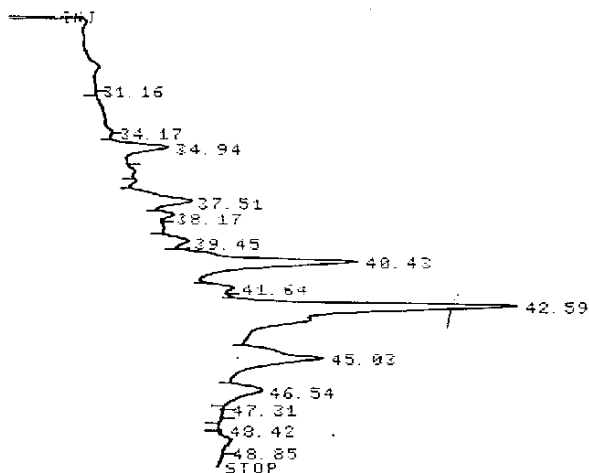
10



2 a

EXPERIMENTAL CONDITIONS

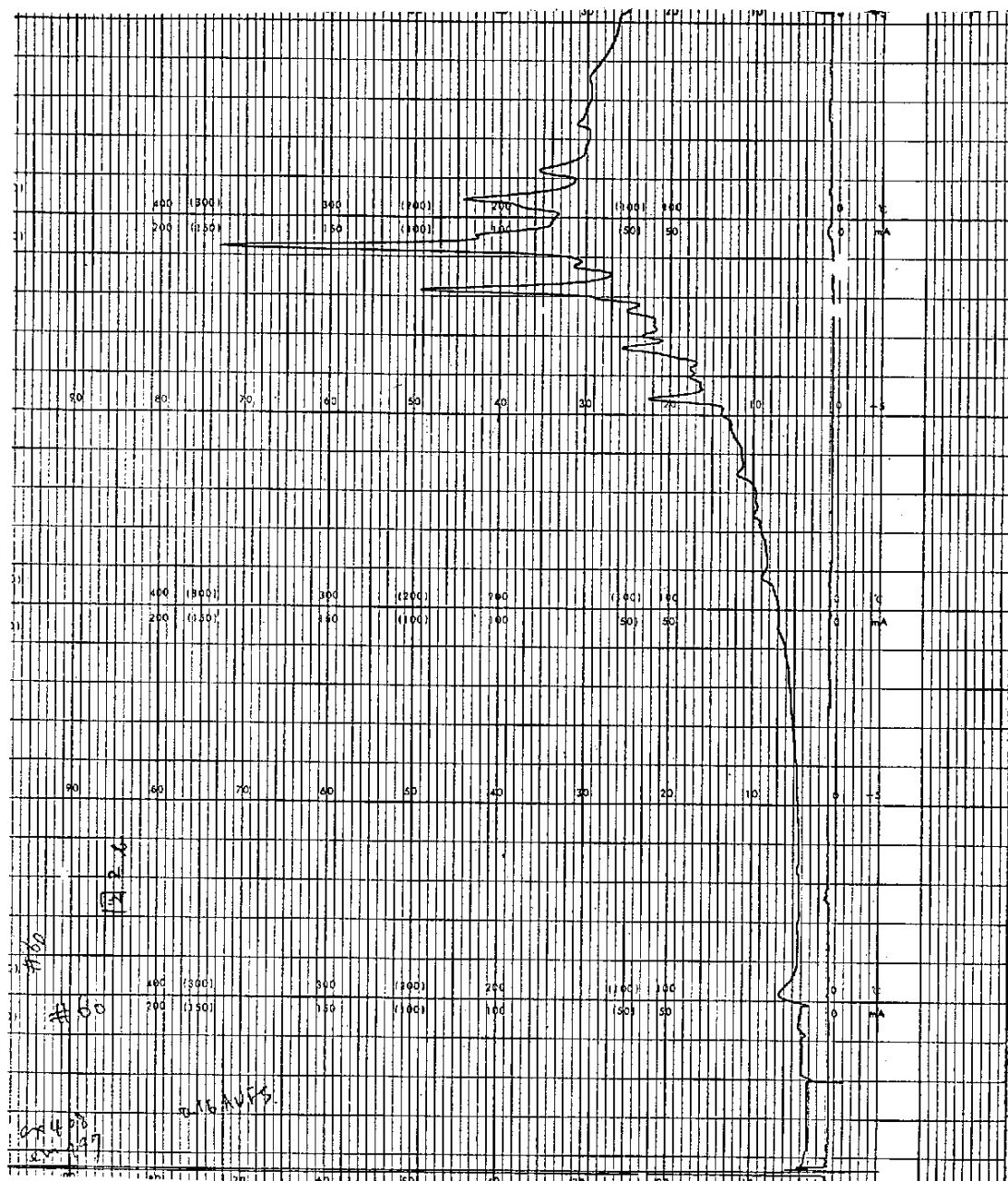
Instrument DuPont 830 Liquid Chromatograph
 Column ODS Permaphase 2.1 mm x 200 cm
 Column Temp. 40 °C
 Pressure 2000 psi
 Eluant Water --- Methanol
 Gradient mode linear
 rate 2% per min
 initial composition 20 % methanol
 final composition 100 % methanol
 Chart speed 5 mm per min
 Detection UV 254 nm 0.16 AUFS(nos. 58,60)
 Fl. ex 290 nm, em 403 nm; no. 58, 62.
 408 nm, 497 nm; no. 60.
 Sample Waterloo's sample was dissolved into an 0.5 ml
 of CHCl₃
 Sample volume 10 µl for nos. 58 and 60.



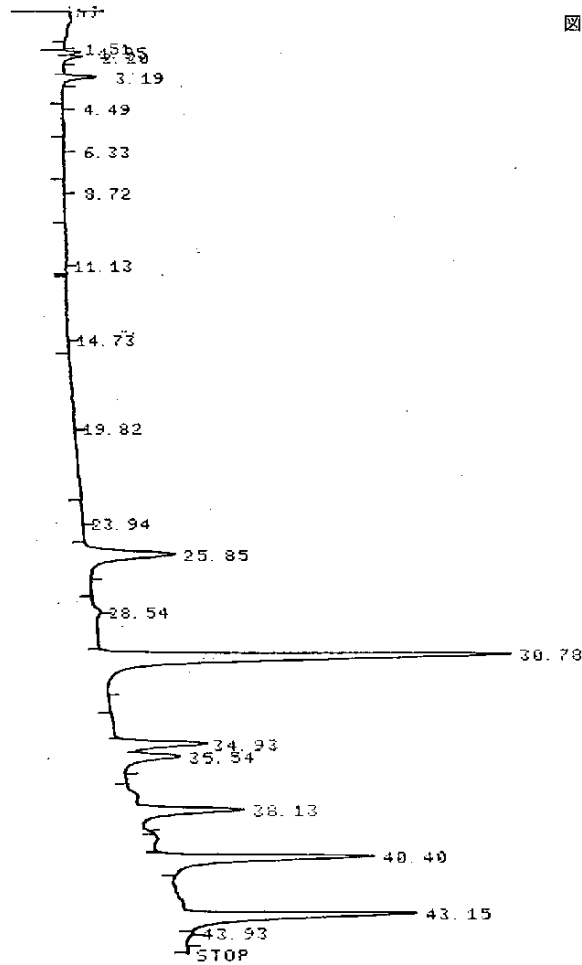
RT	TYPE	AREA	AREA %
31.16		486	1.252
34.17		459	1.183
34.94		1326	3.417
37.51		225	.579 7
38.17		273	.703 4
39.45		181	.466 9
40.43		1813	4.671
41.64		3087	5.377
42.59	M	513	1.322
45.03		976	1.484
46.54		7251	18.63
47.31	M	491	1.233
48.42		16517	42.56
48.85	T	4446	11.46
	TM	1307	4.656
	M	449	1.157

44 3380A
 DEL OFF STOP 40 REJECT 100
 0000 00 000 1

图 2 b



8a



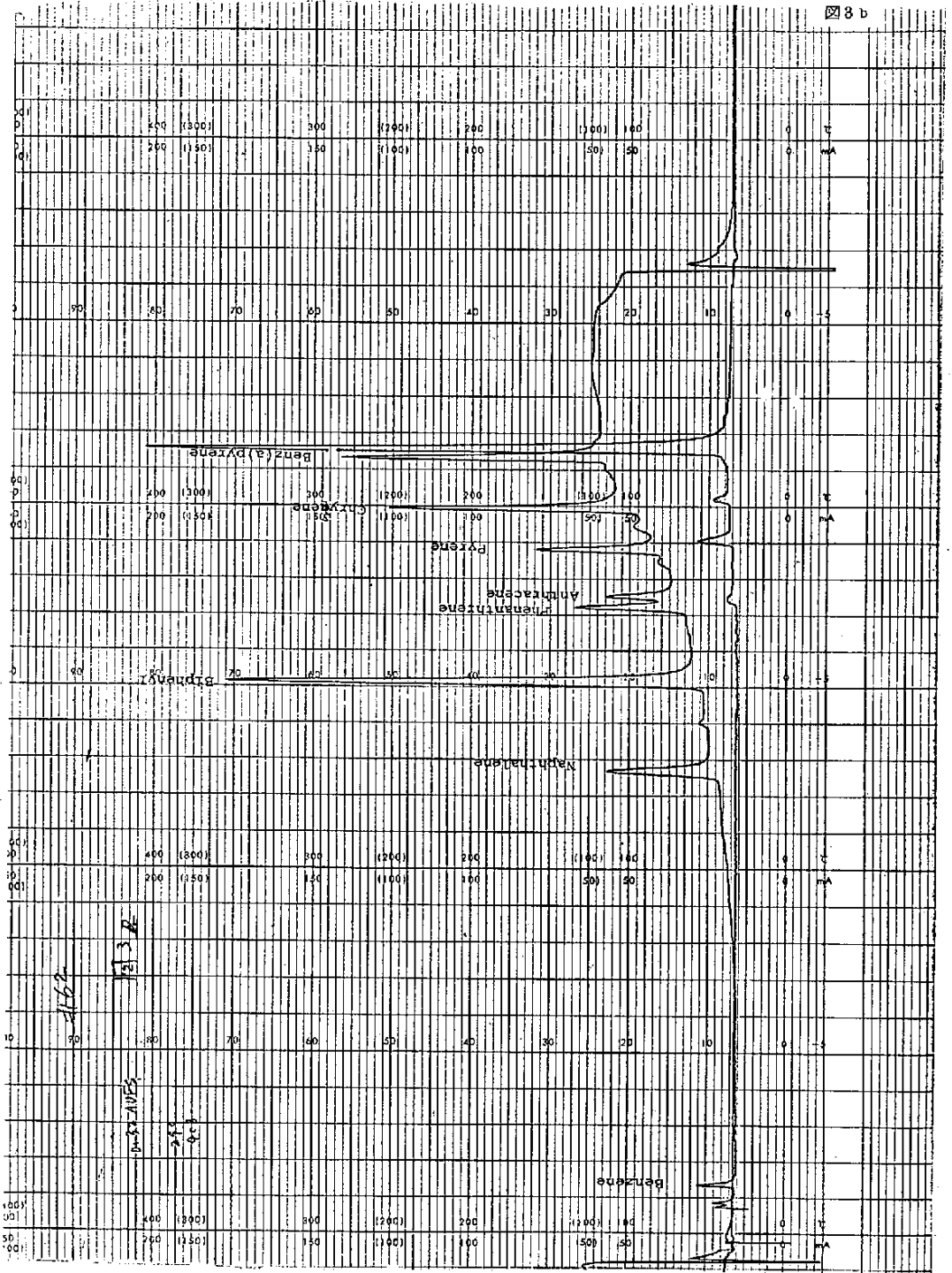
RT	TYPE	AREA	AREA %
1.95		385	.884
2.20		469	1.077
3.19		569	1.307
4.49		105	.241
6.33		139	.319
8.72		241	.553
11.13		303	.696
14.73		4035	9.269
19.82		14108	32.41
23.94		2460	5.651
25.85		1989	4.569
28.54		3407	7.826
30.78		6423	14.75
34.93		9901	20.45
35.54			
38.13			
40.40			
43.15			
43.93			
STOP			

HP 3380A
 DLY OFF
 100

STOP 45
 ATX 1

REJECT 100

3 b



〔参考書〕

- 1) 波多野博行編, 液体クロマトグラフィー, 第1集 南江堂(1964)
- 2) 波多野博行編, 液体クロマトグラフィー, 第2集 南江堂(1965)
- 3) 波多野博行編, 新しい液体クロマトグラフィー 南江堂(1969)
- 4) 波多野博行編, 高速液体クロマトグラフィー 南江堂(1973)
- 5) 波多野博行著, アミノ酸自動分析法 化学同人(1964)
- 6) 波多野博行, 堀正剛, 六混宗治, 村上文子共著, 液体クロマトグラフィーとその応用 講談社(1974)
- 7) 波多野博行著, プラズマクロマトグラフィーその基礎と応用 マネジメント技研(1974)

〔参考文献〕

- 1) 江頭暁, 分析化学, 10, 693(1961)
- 2) 波多野博行ら, 日立評論, 3, 2068(1962)
- 3) H. Hatano, et.al., Hitachi Sci. Instr. News, 5, 141, 161(1962)
- 4) H. Hatano, et. al., J. Chromatography, 83, 373(1973)
- 5) F.W. Karasek, Res./Develop., 21, (3)34;(12)25(1970)
- 6) F.W. Karasek, Proc. Intern. Symp. Column Liquid Chromatogr. (1973) Interlaken
- 7) H. Hatano et. al., Proc. Intern. Symp. Column Liquid Chromatogr. (1973) Interlaken
- 8) 波多野博行, F.W. Karasek ら, 日本分析化学会年会発表(1975) 札幌
- 9) H. Hatano, F.W. Karasek et. al., Proc. Intern. Congress Sci. Human Environment(1975) Kyoto

〔資料〕

- ① 分光蛍光光度検知方式高速高圧液体クロマトグラフの発表論文コピー1部

- ② プラズマクロマトグラフチューブ内部構造を示す写真 1 部
- ③ 高速液体クロマトグラフのコンピューター化された例 - 国際環境保全会議
発表要旨 コピー 1 部

資料①

Reprinted from

Journal of Chromatography, 83 (1973) 373-380

© Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam — Printed in The Netherlands

CHROM. 6864

A HIGH-SPEED LIQUID CHROMATOGRAPH WITH A FLOW-SPECTROFLUORIMETRIC DETECTOR AND THE ULTRAMICRO-DETERMINATION OF AROMATIC COMPOUNDS

HIROYUKI HATANO

Department of Chemistry, Faculty of Science, Kyoto University, Kyoto (Japan)

and

YUKIO YAMAMOTO, MUNEO SAITO, ETSUO MOCHIDA and SHIGEHARU WATANABE

Japan Spectroscopic Company, Ltd., Tokyo (Japan)

SUMMARY

A high-speed liquid chromatograph has been used with a new spectrofluorimetric detector, which is more sensitive than a normal ultraviolet absorption or spectrophotometric detector for fluorescent compounds. The spectrofluorimeter is equipped with double-beam optics and with a flow-cell, 3 μ l in volume, and is used to record the emission and excitation spectra of the separated components during the chromatographic separation by stopping the elution at peak maxima. This technique enables both qualitative identification and quantitative determination of the separated components. Selective recording of chromatograms is possible by varying the wavelengths for emission and excitation.

The technique is demonstrated using mixtures of vitamins B₂, B₃ and B₆, and of naphthalene, anthracene, pyrene, benz(a)anthracene, benz(a)pyrene and benz(e)pyrene have been separated and identified.

INTRODUCTION

Since the development of the first automatic liquid chromatograph in 1961¹, which permitted the separation of many compounds on various types of columns and the detection of the compounds in eluents with a detector selective in the range 220-700 nm (after colour development if necessary) in a manner similar to the automatic fractionation method, the progressive development of automatic liquid chromatographs in Japan has been continued, including applications in high-performance and high-speed liquid chromatography²⁻⁹.

In the development of modern analytical liquid chromatography, a detection system with highly efficient column packing materials, high-pressure delivery pumps and ultramicro-sensitive detectors is important. Spectrofluorimetry permits both the qualitative and the quantitative detection of separated components of fluorescent compounds in ultramicro-amounts.

This paper deals with recent progress with a high-speed liquid chromatograph equipped with a new high-pressure delivery pump of a screw-driven syringe type with a pulse motor, and with a new spectrofluorimetric detector that is more sensitive than an ordinary ultraviolet absorption detector for fluorescent compounds, with characteristic excitation and emission spectra in the ultraviolet and visible region ranging from 220 to 700 nm. The successful application of the new chromatograph to the analysis of vitamins and aromatic hydrocarbons, and to the ultramicro-determination of fluorescent compounds in nanogram or picogram amounts, is described.

INSTRUMENTATION

A high-speed liquid chromatograph equipped with a new high-pressure delivery pump¹⁰ and a flow-spectrofluorimetric detector was designed and constructed*. The effluent delivery system consists of a high-pressure pump, which can deliver 0–200 ml of the effluent liquid at a flow-rate of 0–3 ml/min or 0–0.3 ml/min under a pressure of 0–350 kg/cm² from a carrier eluent reservoir of volume 500 ml. The high-pressure pump is of a motor-driven syringe type with a capacity of 500 ml, which can be filled rapidly from the reservoir within 5 min.

The column system consists of a stainless-steel column tube of I.D. 2.3 mm (alternatively 1.6–6.0 mm) and length 50 cm (alternatively 10–100 cm), and a sample injector, which can be operated under the high pressure.

For the detection system, either an ultraviolet absorption photometer, a differential refractometer or a spectrofluorimeter can be used. The spectrofluorimeter is equipped with double-beam optics and a flow cell of volume 3 μ l, as shown by the schematic diagram of the optical system in Fig. 1.

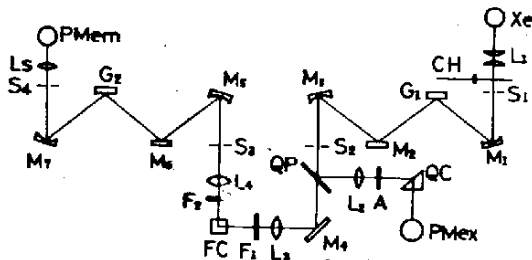


Fig. 1. Schematic diagram of the optical system of the spectrofluorimetric detector for the high-speed liquid chromatograph. Xe, light-source (xenon lamp); PMem, photomultiplier for emission light; PMex, photomultiplier for excitation light; QP, quartz plate; QC, quantum counter; FC, flow cell, 3 μ l in volume; CH, chopper; G₁ and G₂, grating monochromators; M₁–M₅, mirrors; L₁–L₅, lenses; F₁ and F₂, filters; S₁–S₄, slits.

EXPERIMENTAL

Materials

Jascopack CV-02-500 cation-exchange column packing material and Jasco-

* Available commercially as the JASCO FLC-350-FP-4 fast liquid chromatograph from the Japan Spectroscopy Company Ltd., Tokyo, Japan.

pack SV-02 partition (chemical bonded) column packing material were used in the reversed phase on this high-speed column liquid chromatograph.

A 30:70 mixture of water and methanol was used as the eluent for the reversed-phase partition chromatography and a 0.5 *M* KH_2PO_4 solution, pH 7.0, for the cation-exchange chromatography. Vitamins B_2 , B_3 and B_6 , products of Wako Pure Chemicals Co. Ltd., Osaka, Japan, and pyrene, benz(a)pyrene, benz(e)pyrene, anthracene, benz(a)anthracene and naphthalene from Tokyo Kasei Co. Ltd, Japan, were used.

Methods

The operating procedures of the high-speed liquid chromatograph were the usual ones except for the operation of the flow-spectrofluorimeter. For the ultramicro-determination of the separated components with the spectrofluorimeter, it is necessary to select a wavelength at which maximum excitation and emission spectra either over-

TABLE I

SELECTION OF SUITABLE WAVELENGTHS FOR QUALITATIVE AND QUANTITATIVE DETECTION OR THE USUAL AND SPECIFIC DETECTION

A, B, and C, represent the most sensitive detection of the respective components, and a, b, and c represent these components detectable at the wavelengths selected.

Wavelength of emission	Wavelength of excitation		
<i>Qualitative</i>			
	Ex_1	Ex_2	Ex_3
Em_1	a b c	b c	c
Em_2	b c	b c	c
Em_3	c	c	c
<i>Quantitative</i>			
	Ex_a	Ex_b	Ex_c
Em_a	Ab	a b	b
Em_b	ab	a B	b
Em_c	—	b c	b C

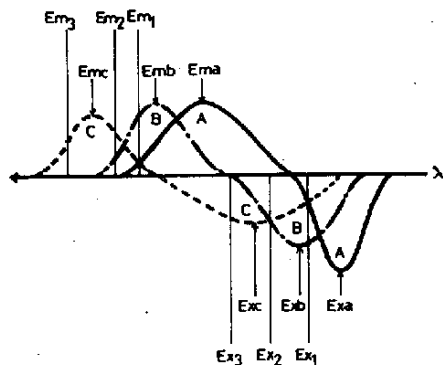


Fig. 2. Schematic diagram of the procedures for spectrofluorimetric detection and measurements of fluorescence excitation and emission spectra. For selection of wavelengths, see text and Table I.

lap or do not overlap. The schematic spectra for the measurements are shown in Fig. 2, and the selection of suitable wavelengths for the detection is presented in Table I.

The usual detections on a chromatogram were carried out at a wavelength (e.g., Em_1 in Fig. 2) in common with the emission spectra of all of the fluorescent components, when all of the components were excited at a wavelength (e.g., Ex_1 in Fig. 2) in common with all of the excitation spectra, as shown in Fig. 2 and Table I. For the specific detection of a characteristic component on the chromatogram, the wavelength (e.g., Em_c in Fig. 2) of the maximum emission of the specific component was used, when the component was excited at the wavelength (e.g., Ex_c in Fig. 2) of its maximum excitation, as shown in Fig. 2 and Table I. This procedure enables one to determine the specific component in ultramicro-amounts both qualitatively and quantitatively. Table I also gives examples of Em_1 , Em_2 and Em_3 suitable for qualitative detection and Em_a , Em_b and Em_c suitable for quantitative detection. Fluorescence excitation and emission spectra were obtained by scanning the chromatographic peak of the component when the elution of the component from the chromatographic column was stopped and the component was in the flow cell.

RESULTS

Spectrofluorimetric detection of vitamins B₂, B₃ and B₆ on chromatograms

Cation-exchange chromatograms of a mixture of vitamins B₂, B₃ and B₆ are shown in Fig. 3. When excitation and emission wavelengths of 330 nm and 505 nm, respectively, were used, three peaks were detected and peaks 1, 2 and 3 were identified

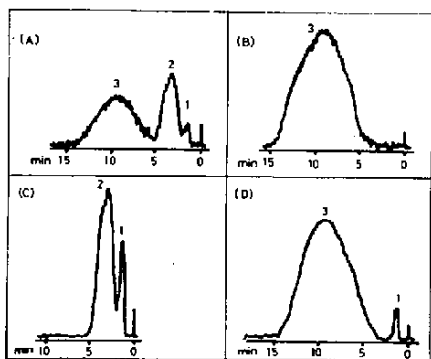


Fig. 3. Cation-exchange chromatograms of a mixture of vitamins B₂, B₃ and B₆. Identifications: peak 1, vitamin B₃; peak 2, vitamin B₂; peak 3, vitamin B₆. (A) Detected at Em 505 nm after excitation at Ex 330 nm. (B) Ex 285 nm and Em 380 nm. (C) Ex 330 nm and Em 425 nm. (D) Ex 345 nm and Em 525 nm.

Fig. 4. Fluorescence excitation (below, solid line) and emission (above) spectra measured on the chromatogram peaks of the aromatic hydrocarbons, and compared with ordinary absorption spectra (below, broken line). Identifications: peak 1, naphthalene excited (Ex) at 275 nm and emitted (Em) at 325 nm; peak 2, anthracene, Ex 320 nm and Em 410 nm; peak 3, pyrene, Ex 320 nm and Em 380 nm; peak 4, benz(a)anthracene, Ex 280 nm and Em 395 nm; peak 5, benz(a)pyrene, Ex 280 nm and Em 430 nm; peak 6, benz(e)pyrene, Ex 285 nm and Em 390 nm.

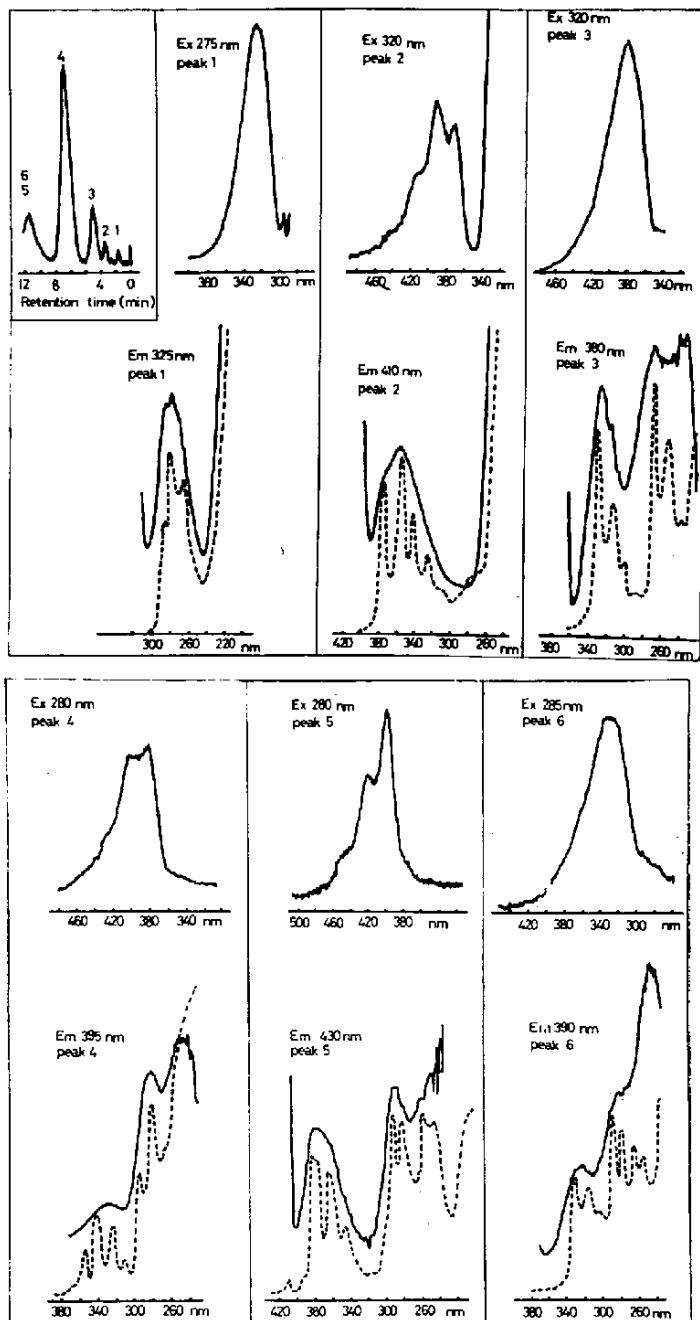


Fig. 4.

as vitamins B₃, B₂ and B₆, respectively, as shown in Fig. 3A. However, when an excitation wavelength of 285 nm and an emission wavelength of 380 nm were used, only the single peak of vitamin B₆ was observed, as shown in Fig. 3B. This effect occurs because vitamin B₃ was not excited at 285 nm although the two peaks of vitamins B₃ and B₆ were detectable at 380 nm. Similarly, when an excitation wavelength of 330 nm and an emission wavelength of 425 nm were used, two peaks of vitamins B₃ and B₆ appeared, as shown in Fig. 3D because there was no emission from vitamin B₂ at 425 nm. When an excitation wavelength of 345 nm and an emission wavelength of 525 nm were used, two peaks of vitamins B₃ and B₂ appeared, as shown in Fig. 3C, because of the negligible emission from vitamin B₆ at 525 nm.

Spectrofluorimetric detection of naphthalene, anthracene, pyrene, benz(a)anthracene, benz(e)pyrene and benz(a)pyrene on chromatograms

The reversed-phase partition chromatogram of a mixture of naphthalene, anthracene, pyrene, benz(a)anthracene, benz(e)pyrene and benz(a)pyrene, and the fluorescence excitation and emission spectra of the separated peaks on the chromatogram, are given in Fig. 4. The fluorescence spectra of naphthalene excited at 275 nm and emitted at 325 nm were measured on the chromatographic peak which appeared first at 2 min retention time on the reversed-phase partition chromatogram, as shown in Fig. 4, peak 1. The fluorescence excitation spectrum of peak 1 was compared with the absorption spectrum of naphthalene, as shown in Fig. 4, peak 1. Similar results were obtained on peak 2 of anthracene, which appeared second at 3 min retention time, excited at 320 nm and emitted at 410 nm; on peak 3 of pyrene, which appeared third at 5 min retention time, excited at 320 nm and emitted at 380 nm; on peak 4 of benz(a)anthracene, which appeared fourth at 8 min retention time, excited at 280 nm and emitted at 395 nm; on peak 5 of benz(e)pyrene, which appeared fifth at 13 min retention time, excited at 280 nm and emitted at 430 nm; and on peak 6 of benz(a)pyrene, which appeared sixth at 14 min retention time, excited at 285 nm and emitted at 390 nm, as shown in Fig. 4. Good coincidence of the fluorescence excitation spectra of the peaks with the absorption spectra of authentic specimens was observed.

Ultramicro-determination of benz(a)pyrene and benz(e)pyrene by spectrofluorimetric detection

Fluorescence emission spectra of benz(a)pyrene and benz(e)pyrene, and the fluorescence excitation spectra which were compared with the absorption spectra, are presented in Figs. 5 and 6. While the absorption spectra of benz(a)pyrene and benz(e)pyrene were recorded on the solutions with a concentration of 10^{-4} g/ml, a fluorescence excitation spectrum of benz(a)pyrene could be recorded on a solution with a concentration as low as 10^{-9} g/ml, and similarly benz(e)pyrene was observed at a concentration as low as 10^{-12} g/ml.

DISCUSSION

The spectrofluorimetric detector of the high-speed chromatograph has several advantages for modern analytical liquid chromatography. Sensitive detection can be achieved and the determination of nanogram and picogram amounts of fluorescent compounds separated on the chromatograph is carried out by measuring both the

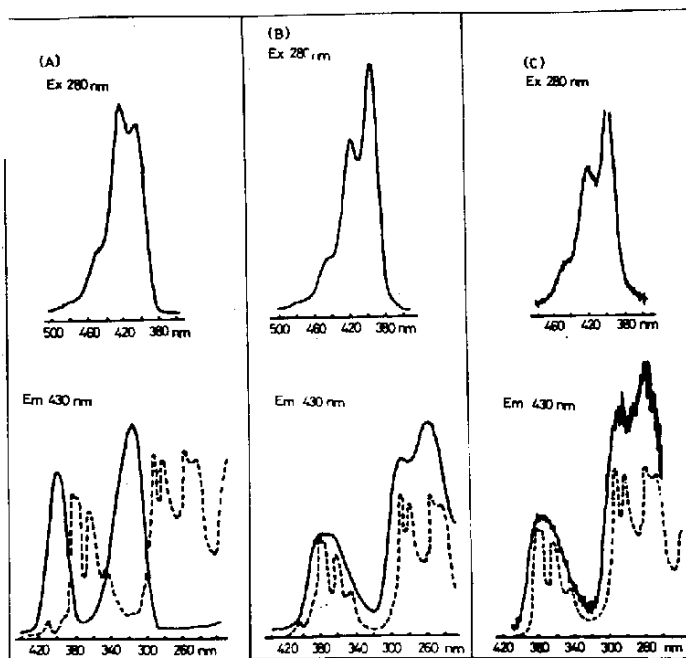


Fig. 5. Fluorescence excitation (below) and emission (above, solid line) spectra of the eluents from the column and compared with ordinary absorption spectra of benz(a)pyrene (below, broken line, 10^{-4} g/ml) for the ultramicro-determination of the chromatogram peaks. (A) Ex 280 nm, Em 430 nm, both 10^{-4} g/ml. (B) 10^{-6} g/ml; absorption 10^{-4} g/ml. (C) 10^{-8} g/ml; absorption 10^{-4} g/ml.

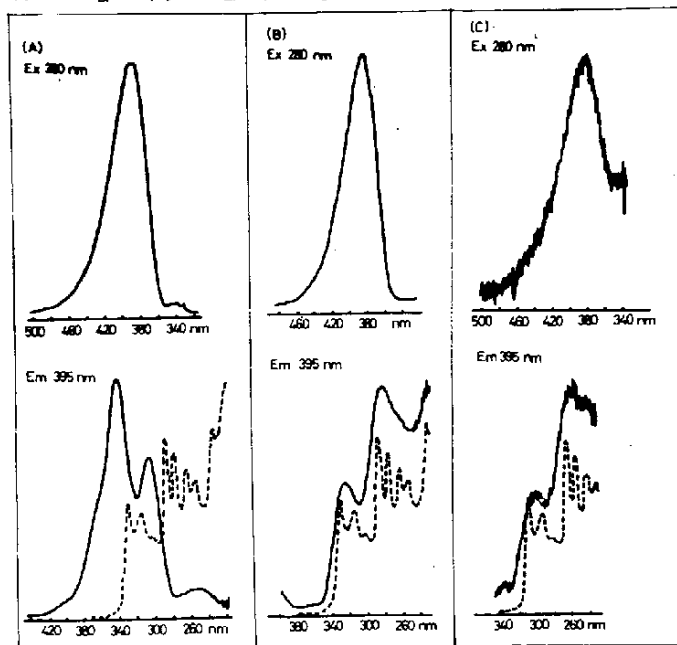


Fig. 6. Fluorescence excitation (below) and emission (above, solid line) spectra of the eluents from the column and compared with ordinary absorption spectra of benz(e)pyrene (below, broken line, 10^{-4} g/ml) for the ultramicro-determination of the chromatogram peaks. (A) Ex 280 nm, Em 395 nm, both 10^{-4} g/ml. (B) 10^{-8} g/ml; absorption 10^{-4} g/ml. (C) 10^{-12} g/ml; absorption 10^{-4} g/ml.

fluorescence emission and excitation spectra of the components at the maximum elution point of the peaks. Selective detection of the peaks of fluorescent compounds on the chromatograms is possible.

Excellent high sensitivity for measuring the fluorescence excitation or emission spectra of minute amounts of the samples was obtained at the wavelength of the maximum emission. The fluorescence excitation spectra were about 10^8 times more sensitive than ordinary absorption spectra. The fluorescence excitation and emission spectra were useful for the qualitative identification of the components. While the gradient elution technique cannot be used for differential refractometric detection on the chromatograph, it is possible to use a gradient elution system with a spectrofluorimetric detector.

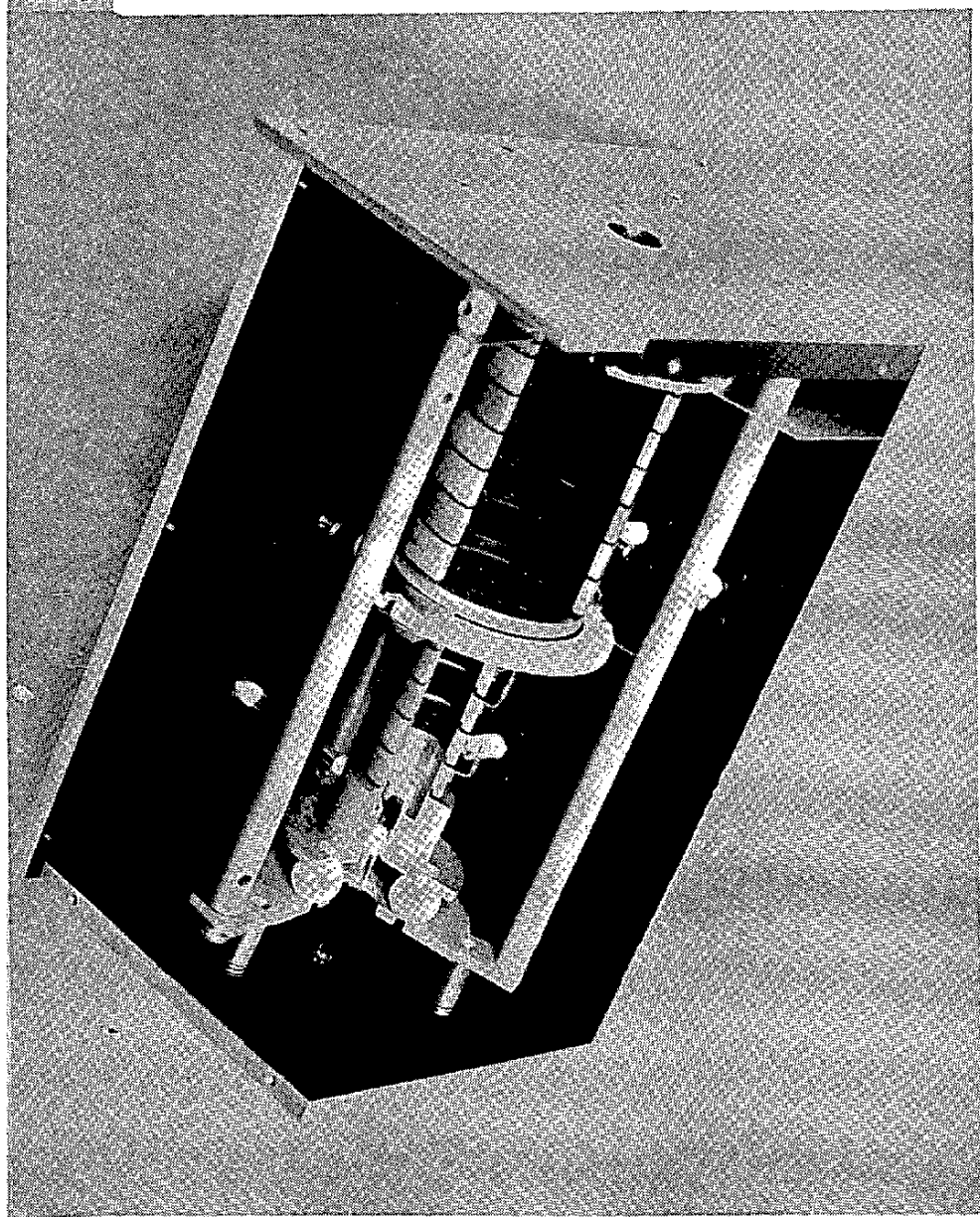
ACKNOWLEDGEMENTS

The authors would like to express their thanks to Mr. N. Miyazaki, President of the Japan Spectroscopy Co. Ltd., for his encouragement throughout this study, and to Mr. S. Rokushika and Miss F. Murakami of Kyoto University for their assistance with the studies. The authors also thank Professor F. W. Karasek of the University of Waterloo for his kindly reviewing the manuscript.

REFERENCES

- 1 S. Egashira, *Bunseki Kagaku (Jap. Anal.)*, 10 (1961) 693.
- 2 H. Hatano, *Hitachi Sci. Instrum. News*, 5, No. 3 (1972) 14.
- 3 H. Hatano, *Hitachi Hyoron*, 44 (1962) 2068.
- 4 H. Hatano, *Bunseki Kagaku (Jap. Anal.)*, 12 (1963) 301.
- 5 H. Hatano, *Automatic Amino Acid Analysis*, Kagakudojin Book Co. Ltd., Kyoto, 1964.
- 6 H. Hatano (Editor), *Automatic Liquid Chromatography*, Vol. I, 1964, and Vol. II, 1965, Nankodo Book Co. Ltd., Tokyo.
- 7 H. Hatano (Editor), *New Liquid Chromatography*, Nankodo Book Co. Ltd., Tokyo, 1969.
- 8 H. Hatano (Editor), *High-Speed Liquid Chromatography*, Nankodo Book Co. Ltd., Tokyo, 1973.
- 9 H. Hatano, *Res. Develop.*, 24, April (1973) 28.
- 10 M. Saito, *Jasco Rep.*, 9, No. 12 (1972) 109.

資料②



資料③

ANALYSIS OF ORGANIC COMPOUNDS ON AIR-BORNE PARTICULATE
MATTER BY HIGH SPEED LIQUID CHROMATOGRAPHY AND GAS
CHROMATOGRAPHY/MASS SPECTROMETRY COMPUTER INSTRUMENTATION

H. HATANO, S. ROKUSHIKA, F. MURAKAMI

Department of Chemistry, Faculty of Science,
Kyoto University, Kyoto, Japan

F. W. KARASEK, D. W. DENNY, H. H. HILL, K. W. CHAN

Department of Chemistry, Faculty of Science,
University of Waterloo, Waterloo, Canada

A program to analyze organic compounds adsorbed on air-borne particulate matter is being carried out cooperatively between Waterloo and Kyoto using multiple instrumental methods. Organic material extracted with solvents from particulates is first quantitatively analyzed with a Hewlett-Packard model 5830A digital gas chromatograph, which gives the value for each component peak directly in micrograms of material. Using a packed column with ultra-thin layers of physically-bonded carbowax phases, about 78 compounds are separated in a sample. A GC/MS analyses has identified carbazole, anthraquinone, anthracene, methylchloranthracene, 2, 3-benzanthracene, primarily through a selected ion chromatogram technique.

Using a Dupont 830 high speed liquid chromatograph equipped with a Hewlett-Packard model 3380A reporting integrator, both of which are combined with a JASCO model 350 spectrophotometer using a FP-4 spectrofluorimetric detector, highly specific qualitative and quantitative information is developed. About 20 peaks were detected in the organic extract sample by LC using a Permaphase ODS column with UV detection, while 10 peaks appear for the same sample from the JASCO FP-4 selective wavelength fluorimetric detector. The retention times of reference samples of naphthalene, biphenyl, phenanthrene, pyrene, chrysene, and benz(a)pyrene were compared with those of the unknown peaks in this system for identification.

6. MDISの開発に関する基礎研究

一橋大学商学部教授

宮川 公男（他5名）

1. MDISの思想と企業経営における意義

MDISはManagement Decision and Information System の略で、ユーザーである意思決定者（企業マネジャー等）に対して、意思決定に有用なデータや決定モデル、データ解析手法のサポートをインタラクティブ（典型的にはオンライン）な形で提供するシステムを意味しており、MDS（Management Decision Support System）とかMMDS（Man Machine Decision System）などともよばれている。特定の問題状況におかれた意思決定者はコンピュータと対話しながら、過去の実績データを眺めたり、それをグラフにプロットしたり、指数に直してみたり、あるいは回帰分析や時系列分析を使って予測をおこなったり、さらには、いろいろな要素（たとえば価格、生産量、賃金率など）を動かした時に結果がどうなるかをシミュレーションして、その結果を予想損益計算書でみたり、あるいは投資決定モデルや線型計画法を用いるなど、意思決定に有用なデータや分析手法を必要に応じて自らの好む順序、形式で得ることができることを可能にするのがMDISの中心的な機能である。このように、MDISには人間、機械（コンピュータおよび人間とコンピュータとの間の対話を可能にする装置）そして意思決定問題（問題状況、情報源を含む）の3つの要素が含まれ、これらの要素が意思決定、つまり問題解決のために相互に関連し合うことになる。

単に、人間が機械を用いて意思決定をおこなっていくということであれば、ほとんどのコンピュータ利用がそうだということになるが、MDISを他のシステムと区別するのは機械との対話の程度、そして意思決定問題の複雑さの程

度である。いま、コンピュータとの対話の程度、問題状況の明確さの程度によって4つの場合を分けてみると次のようになる。左上隅は、たとえば、受注状況および在庫状況をインプット・データとしてバッチ処理され翌日の出荷指示が出荷係へ渡されるといった例にみられるように、バッチ処理を典型とする通常のコンピュータ利用業務である。

		意思決定問題の明確さ	
		構造がはっきりしている (structured)	構造がよく判らない (unstructured)
人間と 対話の 程度	低い	通常のコンピュータ 利用業務 (バッチ処理)	OR, マネジメントサイエンス
	高い	オンライン・システム (情報検索など)	M D I S

それに対して、問題の状況が複雑になり、意思決定のルーチンをプログラムのロジックとして組み込むことができない状況のもとで、各種のOR手法などを用いて大量の計算を含む、主としてバッチ計算によって意思決定問題の分析をおこなっているのが右上隅の分類に入るシステムである。そこでは多くの場合、分析の中心はORの専門家であり、意思決定者の情報要求が十分に反映される保証はない。左下隅は単純な問題状況のもとでのオンライン・システムで情報検索などがその典型的な例である。M D I Sは右下隅の分類、つまりunstructured な問題状況のもとでの意思決定をせまられている意思決定者に対してコンピュータとの高度な対話を通じて各種の意思決定サポートを与えようとするシステムである。企業のマネジャーといった場合、一般的にトップ

・マネジメントにいく程、問題状況は複雑になり、広範囲になり、長期的になり、戦略的になり、したがって図では右隅に位置づけられる問題が中心である。彼等にとって、バッチ計算から与えられる各種の情報は有用ではあるが、彼等の決定システムにおいてはその一部分にすぎず、さらに多くの情報を公式、非公式なその他の情報源に求めざるを得ないし、また自らの試行錯誤的な分析や「こんなところだろう、／」といった「エイヤー、／」的な計算も必要になってくる。そこでこのような問題領域においてコンピュータ利用をさらに進め、意思決定者が意思決定のための身近な道具として、受け身的ではなく、自らコンピュータを利用できるようなシステムを考えていこうとするのは当然で、これを可能にするのがコンピュータとの相互対話にもとづくシステムであり、それは結局、右下隅のM D I Sということになるのである。

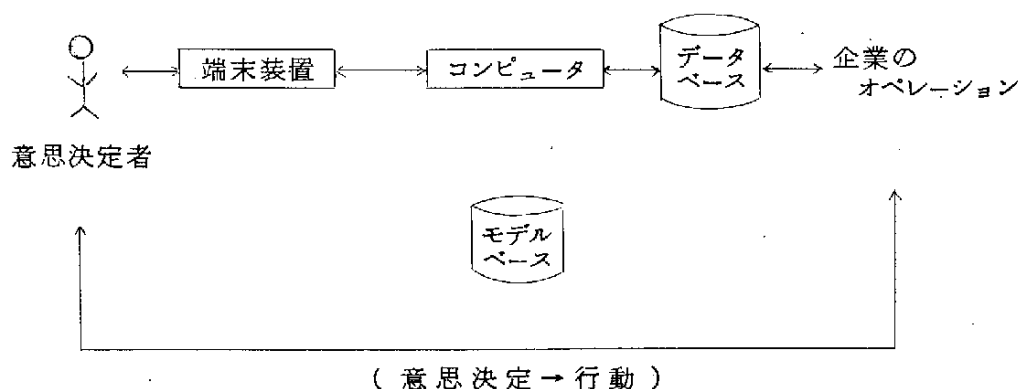
インタラクティブなコンピュータ利用の研究はいわゆるタイムシェアリング・システムを中心として従来からもおこなわれてきた。その当初の目的は高価な機械を多数のユーザーが実質的に共用することによって利用効率を高め、情報処理コストを低減させることが中心であり、そのようなシステムにおける人間の行動の研究は、せいぜいユーザー・コストを評価するために、ユーザーの待ち時間やジョブの平均的な長さを測定することであった。タイムシェアリング・システムにおけるユーザーの利用状況についての各種の統計分析はシステムの設計やジョブのスケジューリング法を開発するための有用な情報を与えることにはなったが、M D I Sに必要な意思決定者であるユーザーの複雑な人間行動の分析の面での貢献はほとんどなかった。最近、インタラクティブなシステムにおいて、人間と機械の間の通信媒体であるディスプレイ装置の諸特性（画面の明るさ、色、鮮明度など）がユーザーの行動にどのような影響を与えるかといった心理学的な研究もおこなわれた例もあるが、それもやはりハードウェア中心の研究である。

このような機械中心のアプローチからもう一步、インタラクティブ・システムにおける人間行動の研究に進んだ例として、データ中心の人間－機械システム

ム、典型的にはオンライン・データ検索システムがある。たとえば各種のデータをストアしたデータファイルないしデータベースに対して、オンライン・リアルタイムベースでユーザーが問い合わせをし、必要なデータあるいは与えた条件を満たすデータを抽出してくるといったシステムである。このようなシステムはM D I Sの重要な一部分にはなり得るが、それはあくまでデータ中心のシステムであって、人間の意思決定プロセスの研究に関しては参考となる部分は少ない。

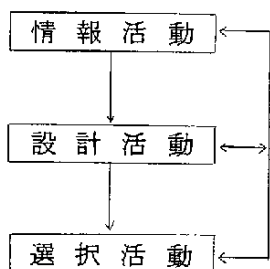
M D I Sの中心的な課題はマネジャーの意思決定機能のパフォーマンスを高めることであり、システムの効果なり、ベイオフはこの面から測られるべきである。システムを構成する機械なりデータについての研究は、意思決定のパフォーマンスに影響を与え、またシステムの全体的なコストに関係するにしても、その影響はあくまで間接的であり、M D I Sにおいてはインタラクティブなシステムにおける人間の意思決定プロセスを直接の対象とした研究が重要になってくるのである。人間の意思決定プロセスを段階的にたどり、それぞれの段階において人間－機械のインタラクティブなシステムがどのようなサポートを与えることができるのかを検討する必要がある。

M D I Sはシステム構成からすると概略、次のように表わすことができよう。外見的には他のオンライン・システムと変わるところはないが、問題は意思決定者の意思決定プロセスに添ってどのような決定サポート、いかなる形で与え



るべきか、またそのバックデータとなる各種のデータをどのように維持していったらよいかといった、システムの機能的側面である。M D I S の具体的なシステム内容は、たとえばボールデン、パッファのPotlatch Forest 社の例にみることができる。

マネジャーによる意思決定は、Simon によれば、情報活動 (Intelligence)、設計活動 (Design)、そして選択活動 (Choice) の3つのプロセスから成る。つまり、企業内外の環境を走査して意思決定の必要な諸問題を見出し (問題発見)、問題解決のための行動案を探索し (探索活動)、そして代替的な行動案の中から最適な行動案を選択し、実行する (意思決定) という一連のステップがふまれるのである。もちろん、探索過程から新しい問題が明らかにされたり、最終的な決定に至らず、ふたたび探索の範囲を広げるなど、各局面の間での往き来はあり得る。さて、意思決定のプロセスをもっとも単純



に、以上の3つの局面において理解するとき、各段階においてコンピュータは意思決定者にどのようなサポートを与えると期待されるだろうか、そしてその中でM D I S に含まれるべき機能はどのようなものであろうか、それらを一般的に考察してみることにしよう。

情報活動においてマネジャーは、内外の環境を検討して機会 (Opportunity) をうかがったり、解決すべき問題を見出そうとする。たとえば売上げを伸ばしたり費用を削減することによって利益を増す機会、多角化や原料の安定供給をはかるなどによるリスク低減の機会、あるいは品質やサービスの向上、環境保全などによって社会との関係改善を図る機会など、常に様々な機会の有無を検討する努力を必要としている。また、解決をせまられる問題も多い。競争企業の新製品なり価格切下げによるシェア低下のおそれ、設備の老朽化による生産効率の低下、原料価格の高騰や供給量削減による生産のリスク増大など、いろいろな問題が日々発生しており、これら

をいち早くキャッチすることが重要となっている。そのため、マネジャーは経済、社会、政治などの環境データ、競争企業の動向などに関する競争データ、生産能力、販売力など企業内部のデータなどを系統的に維持し、走査、検索する能力が特に必要となってくる。

情報活動において、コンピュータがサポートすべき役割の第1は、各種データの収集、メンテナンスであろう。データの多様性とデータの関連づけの必要性からすれば、データベース的な概念が必要となろう。ここではもちろんすべてのデータが、コンピュータのデータベースに維持されなければならないというのではなく、データを系統的に集め、どの部門ないしレベルのマネジャーにとっても必要に応じてアクセスが可能にしておく必要があるということである。場合によっては実際のデータではなく、どこへ行けばデータが入手できるかといったデータ源のリストを維持しておけば十分である場合もあるだろう。情報活動におけるサポートの第2は、機会や問題を見出すための機能である。すなわち、各種データを走査して機会なり問題の可能性を指摘する能力である。このためには、関連する要素が測定され、計画なり目標との比較がなされ、ギャップがあればそれが問題なり機会に値するものなのかどうかを検討されなければならない。このような問題発見のためには、時系列分析、相関分析、弾力性分析などの分析手法が有用になってくる。問題探索は定期的、定型におこなわれる場合、定型的な探索が随時なされる場合、そして随時に自由な探索がおこなわれる場合が考えられる。情報活動におけるサポートの第3は、報告機能である。報告内容には、それが直ちに設計活動におけるプログラムへのインプットとして用いられるもの、設計活動や選択活動に進むべきことを示唆する内容のもの、あるいは単に問題なり機会の可能のみを示唆するものなどがあるだろう。

設計活動において、マネジャーは問題ないし機会を十分に検討し、代替的な行動案を考え出し、そしてそれらの行動案の可能性を評価する必要がある。問題の検討は何がしかのモデルにもとずいておこなわれる。この面でコンピュー

タのモデルベースに含まれるモデルなり各種分析手法が大きな役割を果たすことが期待される。代替案を作り出すことは極めて創造的なことであり、特定の手法は考えられないがモデルの操作結果からいろいろなアイデアも生まれてくるだろうし、あるいはデータベースから関連のありそうなデータなり関係を導く検索能力があれば大きな力となると期待される。代替案の可能性の検討は、その代替案に含まれる各種条件が現実の状況において十分満たされるものかどうかを、実際のデータと比較検討したり、あるいは条件をいろいろ変えてシミュレーションしてみた結果にもとずいておこなわれ、そのためにはデータベースやモデル利用の可能性が前提となる。

選択活動は、最終的には人間がおこなうものではあるが、コンピュータは代替案をランクづけたり、感度分析によって条件が変わった時に、代替案の評価がどうなるかを検討する能力をマネジャーに与える。

M D I S の設計においては、以上のようなマネジャーの意思決定のプロセス全体との関連を常に念頭におかなければならない。

2. M D I S の機能と設計

M D I S は、処理内容として経営計画に適合したものであるべきであるから、その意味で他の分野のシステムとは異なる固有の性質をもつ。しかし、M D I S が他のシステムと異なるのはこの点だけではなく、システムの設計の仕方、システムの利用の仕方にもおよぶ。一般に、経営体における他の業務に対応するシステム、例えば給料計算、請求書の作成等、は処理内容が固定していて、処理結果である出力情報は即時的に利用できる。M D I S は経営計画という業務内容からして、全面的にコンピュータ・システムに代替させる、いいかえれば、そのようなシステムを完成させようという志向は失敗事例が多い。それ故、人間のおこなう意思決定を補助するような情報処理装置としてのシステムを研究の対象としようということになる。特に意思決定サポートシステムというのはこの主張を表現しているためである。

経営計画の担当者は、直面している問題の処理、意思決定に際して、それに関連する情報を調査、分析し参考にする。この場合、意思決定者が参考とした情報はいわゆる客観データのこともあるが、それだけには限らないことが多い。概していえば、ある種のデータの合計値、平均値、分散等、データを全体として表現するために処理加工して得られた情報、時系列分析、回帰分析等、統計的分析をしてみた結果得られる予測値、推定値、その他の統計量、問題を定式化し、モデルを設定して、いくつかの政策変数や環境条件を前提して場合に、そのモデルをシミュレートさせてみた結果得られる情報等がある。

これらの情報がそのまま意思決定に役立つという保証はないのであるが、しかし経営計画に際して、このような分析結果である情報を何等かの意味で利用することは今日一般的になっている。そしてこれらの情報を作り出すための処理はコンピュータに担当させること、それに適合するコンピュータ・ソフトウェアとしてのシステムを開発することが望まれている。

経営計画の立案にあたってしなくてはならない分析や意思決定は問題別に現われる。例えば需要予測、販売見積、生産計画、在庫計画、要因計画、財務計画等々というように。このような各問題を担当する意思決定者はそれぞれ問題を定式化し、代替案を作成し検討する。経営計画はこれら諸問題を個別に取り扱かうわけにはいかない。各問題は相互に関連しているからである。これらの各問題をどのように関連づけ統合するかということ、すなわち、経営計画全体の構造の定式化はかなり複雑であり、一様に定めるわけにはいかない。

個別問題の意思決定に限ってみても、分析手順や必要とする情報は一様に定まらない。経営計画についての意思決定の非定型性として、しばしば指摘されるところであり、前にも触れた。

経営計画の対象であるその経営体自体が常に発展、変化するし、経営計画の作成方法はそれ自体が学習過程であり、変化する。したがって、そのサポート・システムも変化する条件に対応しなくてはならない。

このように、M D I S はいろいろな意味における多様性が要求され、それに

応えるものでなくてはならない。この点で、伝統的なコンピュータ・システムとは設計の前提である要請される機能上の性格が著しく異なるのである。

それに加えて、このシステムの使用者は経営計画の担当者なのであって、コンピュータそのものの専門家ではないと想定しておくべきで、このシステムは操作が容易であり、適時に利用できなくてはならない。

現存するMDISと呼ばれるいくつかのシステムやMDISに類似しているシステムであるいわゆる「企業モデル」（企業の政策、行動等を定式化し、それをシミュレートさせるコンピュータソフトウェアとしてのシステム、という意味でこの語を使うことにする。）によれば、前記のような多様性に応えるために、問題を類別し、各々に対応するようにいくつかのプログラムを備える、パラメータを設定して、その値によって多様性を表現する、処理手順そのものをプログラムとして書く等の方法がとられている。

いずれの場合にも重大な欠陥がある。問題を類別していくつかのプログラムを備えたり、パラメータによって多様な処理内容を表現させるとすると、実際の経営計画で生じる処理内容の要求に応えるには限度がある。処理内容をプログラムとして書くことにすると、容易に必要なとする情報を得るという条件には合わない。

以上の理由で、結局いくつかの問題処理を統合する仕方や各個別問題の分析手順それ自体の規定を使用者によって指定されるもの（users' option）としなくてはならないことがわかる。このことに加えて、システム操作が容易であるという条件を満たしたシステムをどのように設計するか、という研究課題に直面する。

以上のような条件に適合するシステムの設計方針は次のようにするのが妥当であると思われる。

（1）経営計画をサポートするために必要と思われる処理内容を問題別に分割するということとはせずに、機能的に分割する。まずデータの管理、報告書の作成、分析・処理に分離する。したがって各処理に固有のデータ管理や出力を設

計しないで、これらは統一しておこなう。

(2) 分析・処理の部分も問題別に作らない。例えば、需要予測、財務分析のプログラムといったものは作らない。各問題に依存しない分析手法そのものを表現したプログラム、いくつかの問題向けシミュレーション言語（具体的問題ではなくシミュレーションの論理構造としての問題向け言語）、各種関数、演算等を含む一般言語を各々サブシステムとしてもつ。

(3) (1)、(2)での各サブシステムに対して、インプット情報を指定すると一意な処理内容が決まる。どのサブシステムであるかの別と対応するインプット情報を指定し、それらの一つまたはいくつかを順序を明示して指定することを「モデル」を定義するというようにする。システムは「モデル」の定義、削除、変更等「モデル」を管理する機能を持ち、一度定義された「モデル」は記録しておく。

(4) 使用者の必要とするデータ管理、レポートの作成（情報検索を含めて）、分析・処理等をシステムが実行するには、それに対応する情報をシステムに与えなくてはならない。これを主としてディスプレイ装置を利用して対話形式でおこなう。

(5) 以上のようにして、経営計画に必要な情報の作成、記録等を全てカバーする。

このように、問題の内容には全く依存しない分析上のツールやデータ管理、報告書の作成機能だけをシステムに組み込んでおくことにすると、いかなる処理内容にも応じることができる。経営計画の各分野での処理プログラムはそれぞれ固有の内容、処理様式をもっているように見えるが、実はそのほとんどが前記の機能のいくつかを結合させたものである。それにしても使用者が自分の考える処理内容をこれらの諸機能を使って作り出す作業が必要になる。このため、一度作った処理様式はシステムが記録しておき、以後はそれを実行させたり、一部修正して実行させたりできるように「モデル」を管理する機能をシステムに組み込む。さらに対話形式の I/O をすることにし、システム操作の容

易性、適時性を保証するようにする。

このようなシステムを設計するについてはいくつかの技術的問題がある。特に重要と思われることを二つ述べておく。

(1) データ管理を統一しておこなうことにすると、システムは大量のデータを取り扱うことになり、データを組織的に記録しなければならない。この場合、M D I S で取り扱うデータは、収集過程、いろいろな分析ツール、情報検索、報告書等を通じて、表現形式が共通しているのかどうか、またそうだとするとどのような表現形式が適しているかという点を考えなくてはならない。特にデータベースマネジメント・システムにおいて採用されているデータの論理構造はM D I S にとって適したものであるか、ということを考察しておくべきであろう。

これらの問題については、結論的にいうと、M D I S では取り扱うデータの性質からして統一した表現形式にすることはできるが、データベースマネジメント・システムで採用しているデータ構造は適合せず、若干異なるものにすべきだと思われる。

(2) 分析ツールの中で、特に重要なのはシミュレーション言語である。経営計画ではシミュレーションの役割が大きい。既存のシミュレーション言語は、実際の処理手順に比較すると、処理の論理が単純で条件がきつすぎるようである。このため、多くの場合、個別の問題をそれぞれ一般言語を使って処理手順をプログラミングしている。しかし、シミュレーションの論理構造をいくつかに型分けして、各々に対応するプログラムを開発することは可能である。

7. 一貫自動方式結晶解析—プログラム システムについて

大阪大学・自動解析プログラムシステム
開発グループ

代表：大阪大学蛋白質研究所・角戸 正夫

1. その背景

1.1 結晶解析学の現状と将来

X線回折による結晶解析の方法は、その根本問題として重要な位相決定法の最終的結論が出ないままに、最近10余年の電子計算機の普及と平行し、その実行速度だけは実験、計算共に急速に向上してきた。

かつて1962年頃Robertsonが「今や複雑な有機化合物（たとえばアルカロイド類）でも2〜3ヶ月でその分子構造が解明される時代に入った」と述べたことが、世界中の化学系研究者特に有機化学者に大きい刺激を与え、事実その後有機化学研究者の中から多くの人々が新たにX線解析法を学び実行している。

一方この結晶解析学を方法としてその創始から開発と進歩に寄与してきたはずの多くの物理学者にとっては、「結晶解析はなるほどやっかいなものではあるが、一応の筋道が出来た今ではやれば出来るものだろう」と、最早解析学そのものは物理学の研究対象としての興味が無くなってきている。この二つの考え方は極端ではあるが、共に一面の事実ではある。

しかしながら今日結晶解析法がルーチン化したとはいえ、多くの物理学、化学研究者が他の一般的な物理的測定を自ら実行するのと同じくらいの気易ささ

では絶対に実行出来ない高い障壁が今尚存在していることも事実である。たとえば結晶解析の実行の内容の中で、結晶外形から主軸の直感的推定、軸立てから回折像の良否の判断、空間群の知識、回折強度の誤差の判断、各種位相決定法の選択、フーリエやE-mapの極点の選択など、機器操作や、単なる数値計算を除いた、純粹の思考判断部分だけをかんがえても、ちょっとした簡単な勉強だけでは専門外研究者では到底踏み込めない聖域？として残っているからである。

すなわち結晶解析研究者にとって、現在結晶学が置かれているこの極めて特殊な学術的地位をよく自覚した上でこの分野が他の学術分野へ果すべき貢献の方法を考え直す時期であることをまず述べておきたい。

1.2 X線解析の他分野への貢献について

固体中の原子の立体配置や化学物質の分子の立体構造を解明することは物質科学、技術から生命科学に至る全ての学術研究の前提であることはいうまでもないが、問題はその構造解析の要求を、“誰が、いかにして満たしていくか”ということである。

いま仮に日本国内の大学、会社などにおける、有機化学関係だけの研究室がたとえば1,000存在するとして、それらが1年間にわずか5種ずつの化合物の構造を知りたいという潜在的願望があるとしても、1年に5,000件の解析を実行する必要がある。

ところが現在日本国内で有機化合物の結晶解析を専門とする研究室はわずか20内外でありその中で四軸回折計は10台余りである。これでは結晶学者が自分達の固有の研究を全く犠牲にしてもこの潜在要求量の数%も充足できないことになる。

最近J.A.C.S. (1975年4月版)の広告で、Molecular Structure Corporationという“構造解析引き受け会社”が出来たことを知った。これは正に前述の事情を察知した上の事業である。

私共解析グループはもちろんずっと前からこのような事業の出現は予想して

いたので、私共の計画はこの事業の目的よりはその思想においても一歩先を目標としたものであると思っている。

1975年、「化学」1月号の“新春質問箱”の中で“X線解析はルーチン化するか”という題の私の小文中「結晶学者自身のためのルーチン化は既に出てきている、しかし真のルーチン化すなわち全くの非専門者がその物質の化学的知識のみを出発点として四軸回折計から最終構造データまで全く途中出力も判断もなく、スイッチ操作一つで解析を完了する方法こそ今すぐ開発すべきである」と述べておいた。

1.3 一貫自動解析プログラム開発の意義

以上述べたことから、最早自動解析の必要については触れる必要もないと思う。“この分子の構造さえわかればこの仕事は早く片付くのだが”という各方面の多くの研究者達が、赤外や紫外分光を測定するのと同じ気軽さでX線解析によって全構造を自から解明出来るとすれば、現在の化学研究の様相は一変するだろう。

莫大な潜在要求を持つ一般研究者に対して結晶学者が「あなた方が自分で解析をおやりなさい」と言えるような方式を早く作ることが、結果においては結晶学者がより高度な問題に専念できることにもなるのである。

結晶解析を囲碁にたとえてみよう。現在知られている重原子法とか確率法など多くの解析の“定法”を碁の“定石”とすれば、結晶学者とはこの“定石”を多く知った上でその応用布石の直観力が優れている高段者のようなものである。自動解析とはこの定石と応用布石の直観的判断までも含めて、コンピュータアルゴリズムにシステム化したもので、全く碁を知らない人が高段者と同じ力で対戦出来ることである。

しかしながら特にここで強調したいのは、囲碁の場合素人にとっては“碁を打って楽しむ”ことに目的があるので、自分の知らない中に計算機で勝ってもそれは無意味であるが、一方結晶学の非専門学者にとっては、解析すること自体にはなんの楽しみもなく、ただ最終結果だけが欲しいのである。コンピュー

ターで囲碁や将棋の常勝プログラムを作ることにもソフトウェアの論理的開発の面での大きい意義があるが、この一貫自動解析プログラムシステムの開発には上述の学術面における実質的効果の莫大さに加えて、論理演算におけるいわゆるHeuristicのAlgorithm化やアナログ $\longleftrightarrow$ ディジタル相互変換、高度のHybrid機能の開発などコンピューターの高度利用という面でも重要な意義をもつものと信じている。

1.4 一貫自動化への道

前節までに記した思想に沿って私共が考えた当面の自動化への道を要約しておく。すなわちこの自動化の出発点の必要条件は、

- (1) 操作する人は結晶学非専門家であること、
- (2) 解析する物質についての化学的情報があること、
- (3) 四軸型回折計、
- (4) 大型電子計算機、
- (5) 回折計に結晶を装着すれば、次の出力は最終の構造データである。

解析計算の主系列としては、直接実測だけから得られる IFI^2 より出発するパターン関数法と IEI より出発する直接法の2系列からなり、さらにこれら2系列はそれぞれ既知の化学的情報や結晶学的条件によって複系列に分岐するが、最終的には初期入力のみによって全系列が自動的にリンクされ最適解析法が実行される。

現在まだ初期入力としての化学情報の分類や整理はしていないが、我々が過去に有機化学研究者から依頼された物質の多くの経験からみて、全システムが完成したときこのシステムによる構造解析の可能性は、分子量が500程度までの物質では恐らく数10%に達するのではなかろうかと思っている。もしその程度まで完成したとして、この方法で“不可能”という結果が出た時は、格子不整、擬対称その他なんらかの構造上の虫が存在しているはずであるから、この時始めて結晶学専門家が介入することになる。

すなわち別の見方をすれば、解析の難易の判断がこの数10分の間で解決し

たことにもなるだろう。

兎に角、潜在要求量のたとえ10%でも解析出来れば画期的進歩である。これは決して結晶学、化学のS.Fではなく、今すぐ出来るものから誰かがやらなくてはならない現実の要求であると信じている。

第3章には現在までの我々グループの開発結果を具体的に説明するが、その前に我々が称している“分子構造解析装置”の基本構想を次章に述べておく。

2. 分子構造解析装置 (Automatic Molecular Structure Analyzer)

結晶をゴニオメーターヘッドに装置して、スタートさせると、構造モデルを出力してくる機能を備えたものを分子構造解析装置と呼ぶことにする。これは正に分子を見る顕微鏡ともいうべきで、われわれの最終目標である。この過程は、回折測定と構造解析の二つに大別できる。

回折測定の部分では、光学顕微鏡で選んだ結晶を用いて、結晶の良否の判定、晶系・格子型・可能な空間群の決定、強度データの測定を行なう。計算機で制御される自動回折計を用いる通常の実験では、まずX線写真を取り、おおよその格子定数、晶系・消滅則・空間群をきめたのち、回折計に移し、計算機との対話によって精密な格子定数・結晶の方位などをきめ、強度の連続測定を行なう。このなかで写真をとる作業を省略し、また実験者の割り込みをなくして、すべて自動的に行なおうとするものである。

これらの仕事を、あらゆる結晶について完全に行なうことは困難であり、原理的に不可能であると言える。ちょっと考えただけでも双晶・超周期構造などは取扱えないであろう。そういうものではない“通常の”結晶で、頻度の高い晶系・空間群に対処できるシステムであれば充分実用になると考えられる。

このような立場から、理学電機製四軸型自動回折計を用いて、予備的な実験を行なっている。回折計制御のソフトウェアは、理学のものをそのまま使っているが、写真がなくとも晶系・格子定数・可能な空間群を決定することができた。これらを自動化することを目的として、必要なアルゴリズムを作成してい

る。頻度の高い正方晶系以下の結晶では可能であると考えている。回折計の制御はミニコンピュータで行なわれており、プログラム言語としてはアセンブラが用いられているが、このままでは、できないわけではないがソフトウェアの開発に負担がかかりすぎる。FORTRAN レベルの言語で制御できることが望ましく、そうしたシステム構成を想定しながら、予備的な実験およびプログラムの開発を行なっている。

構造解析の自動化は、いくつかのグループでとりあげられており、報告もある (Woolfson ら, Koyama ら)。われわれは、これらの成果をふまえて、一貫解析のプログラムシステムを開発しつつある。これは大型計算機が使えることであるから、阪大の共同利用の計算機を用いて開発を行ない、すでにかなりの成功例を得ている。これらについて、次節に述べる。

3. NEAC 2200-700 における自動解析システムの

構想と現在までの成果

IFI データと結晶データを入力して、位相問題を含む計算を行ない、構造モデルを出力することを自動解析という。位相問題の解決法としては、パターソン法と直接法の2つを採用し、現在のところ、別々に開発している。つぎに両法についての詳細を述べる。

3.1 パターソン法

パターソン関数から構造を解く方法としては、(1) Buerger による最小値関数の利用、(2) Nordman, Nakatsu らによる既知構造を使つてのベクトル・サーチ法、(3) Woolfson, Main らによる縮退したベクトルの利用、などが考えられる。(1)についてはほぼ完成し、(2)、(3)については開発を進めている段階である。ここでは(1)についてその詳細を述べ、(2)、(3)については大まかな考え方を示す。

3.1.1 最小値関数法

重原子の座標がわかったときに、フーリエ法を用いて構造を自動的に解く方

法はすでに発表されているが、我々はパターン関数を利用して重原子のある場合だけでなく、軽原子(C, N, Oなど)のみから成る場合にも、構造を解く目的でこのシステムを開発した。

初期入力データはできるだけ少なくしており、格子定数・空間群・Z IFIデータ、各種の図の計算領域・化学式などである。現在のところ最終出力としては各原子の重みとそれらのパラメーター、ラインプリンターに表示された分子図などである。このシステムのJOBの流れを図1に示す。JOBの流れは、プログラム自身の論理的判断によって行なわれる。たとえば、パターンを先鋭化する程度を、データの量や重原子を含むかどうかで変化させること、構成原子から期待されるピークの高さを求めること、“重原子”と指定できるようなピークがあるかどうか判断すること、最小自乗法による収斂の判断など、構造解析の過程で通常行なわれる判断をプログラムに盛りこんで自動化の機能を高める努力をしている。

パターン関数をdeconvoluteして構造を求める場合の問題点は、偽対称と、non-Harker peakを求像ベクトルとして採用したさいのあいまいさであろう。偽対称については、最小値関数を続行する過程において、たとえばある線や面上に配置するようなピーク群を除去していく方法などによって解決している。それまで重ね合わせに利用したピークの座標を (x_i, y_i, z_i) とし、新たに加えるピークを $(x_{i+1}, y_{i+1}, z_{i+1})$ とするととき $x_{i+1} \approx x_i$,

$y_{i+1} \approx y_i$, $z_{i+1} \approx z_i$ をすべて満たすように工夫した。第2の問題はP2₁などで初期の求像ベクトルとしてnon-Harker peakを採用したときに起るような問題であり、軽原子ばかりから成る構造では正しい構造に至らない。この困難を克服するため最小値関数は空間群の対称性を利用せず、P1として合成しその後空間群を満足する座標を次の方法で探し、原点を移動することとした。我々はこの操作を“Symmetry search”と呼んでいる。

(h_1, k_1, l_1) と等価な反射を (h_m, k_m, l_m) , その位相を α_m とする(α_m は後述のように最小関数をフーリエ変換して求めることができる)。原点を

(x, y, z) に移動して空間群の対称性が満たされるものとする。等価な反射の位相の間には,

$$\alpha_{h_1 k_1 l_1} = S_m + F_m \alpha_{h m k m l m}$$

なる関係が存在する。ここで S_m は $\pm\pi$ や 0 など, F_m は ± 1 などであり, その空間群について定まっている値である。

$$\alpha_{h_1 k_1 l_1}^e = \alpha_1 - 2\pi(h_1 x + k_1 y + l_1 z)$$

$$\alpha_{h m k m l m}^e = \alpha_m - 2\pi(h m x + k m y + l m z)$$

であるから

$$\begin{aligned} \alpha_1 - 2\pi(h_1 x + k_1 y + l_1 z) \\ = S_m + F_m \{ \alpha_m - 2\pi(h m x + k m y + l m z) \} + 2N\pi \end{aligned} \quad (1)$$

が成り立つ。このままでは $2n\pi$ のため扱いにくいので, 次のように変形する。

$$\begin{aligned} \exp i \{ \alpha_1 - 2\pi(h_1 x + k_1 y + l_1 z) \} \\ = \exp i \{ S_m + F_m \{ \alpha_m - 2\pi(h m x + k m y + l m z) \} \} \quad (2) \\ \exp 2\pi i (Hx + Ky + Lz) = \exp i (S_m + F_m \alpha_m - \alpha_1) \quad (3) \end{aligned}$$

ただし, $H = F_m h m - h_1$, $K = F_m k m - k_1$, $L = F_m l m - l_1$

(3)式の右辺は, すべて既知量なので, 指数(H, K, L)でフーリエ変換することにより, 最適値(x, y, z)を求めることができる。対称心が存在する場合には, 位相角が 0 か π であるので,

$$\alpha_1 - 2\pi(h_1 x + k_1 y + l_1 z) = N\pi \quad (4)$$

となり, 同様にして, 次式が導かれる。

$$\exp 2\pi i (Hx + Ky + Lz) = \exp i (2\alpha) \quad (5)$$

ただし, $H = 2h$, $K = 2k$, $L = 2l$

対称心がないときは(3)式を, ある場合には(3)と(5)の両式を用いて(x, y, z)の最適値を求める。この方法の長所はアルゴリズムが簡単で既製のフーリエ合成のプログラムが利用できると, 計算時間が短かくてすむことであろう。

次に精密化の段階について述べる。このシステムには, メッシュで計算された図をフーリエ変換して, 各反射の位相を決めるプログラムがある。最終的に

得られた最小値関数はこのプログラムによってフーリエ変換され、各反射の位相角が決定される。この結果を使って電子密度図を合成すると通常のフーリエ法と同じように、より真に近い $\rho(x, y, z)$ が得られるが、この ρ の 2 乗のフーリエ変換で各反射の位相角の再決定を行なう。これは Sayre の squared Crystal の考えをとり入れたものであり、直接法による精密化と言えよう。このようにして得られた位相角は、前述の "Symmetry search" の入力となり、原点移動量を決めるのであるが、このときに同価な反射の間の関係式 $\alpha_1 = S_m + F_m \alpha_m$ を利用して各々の組の位相角を比較し、ずれの大きい反射を除くこととし、ずれの小さな反射の位相角を平均して用いる（原点移動による精密化）。このようにして得た位相角を用いてフーリエ合成を行ない、えられたピークの高さの比較より有意なピークを受け入れ次の最小自乗法の段階に達する。ここでは $f = \exp(-2 - 4 \sin \theta / \lambda)$ なるユニタリー構造因子を用い、温度因子は固定とし、各ピークの占有率（あるいは原子番号）と座標 (x, y, z) を対角近似で精密化する（最小自乗法による精密化）。最高 4 サイクル繰り返すようにしており、その間に占有率の低くなったピークは順次取り除いている。このシステムを適用して現在までに解析した結晶を表 1 に示す。この方法の欠点は最小値関数に時間がかかることで、将来アッセンブラー言語の採用などにより、早く計算できるようになれば、このシステムは大いに有効になると思われる。

3.1.2. 既知構造を利用するベクトルサーチ法

結晶が、リジッドな既知の原子団を含む場合、これを利用してベクトルサーチするプログラムシステム—— RICS—— が開発された。このシステムを自動化する方向で手直しを行なっている。分子の方向決定はパターン関数と Convolution Molecule の比較で行なう。並進量の決定は自動化のため結晶対称を利用した次の式により行なう。

$$M(Z) = \sum_m I F_0(h) I^2 F_m(h) F_n^*(h) \exp 2\pi i (h \Delta R_{mn} X) dV h$$

F_0 : 観測値,

F_m : 同価点 m で移したときの構造因子,

ΔR_{mn} : 同価点 m と n の間の回転マトリックス

現在の計画では異種の既知構造を2種類まで利用できるようにし、全体として5ヶの既知構造が使えるようにする予定である。

3.1.3 縮退したベクトルの利用

Germain と Woolfson は縮退したベクトルを利用してパターン関数を deconvolution する方法を発表している。現在、最終的なデバッグは完了していないが重原子を含まない場合の解析に有効であろう。

3.2 直接法

直接法のプログラムは、いくつも作られており、各研究グループは、そこでの経験を折りこんでいくぶん修正して使っているもののようである。自動化をはっきり意識して開発しているグループも多い (Woolfson, Koyama)。われわれのグループでも、いくつかのプログラムを使ったり、書いたりして来たが MULTAN (Woolfson) が、多くの成功例を生んできたので、これを基幹としてシステムを作成することとした。

結晶の大きさ、非対称単位中の原子数等を考慮して、必要なデータを適正化してやると Figure of merit の最も大きいセットの E-map が、全原子の位置を明らかにする場合が多い。これは並進の対称操作を含む、対称中心のある空間群の場合に、かなりの確率であらわれ、E-map のピークサーチで簡単に構造モデルが出力できる。しかし、これ以外の場合には、正解に対応するセットを見出し、あるいは正しい構造の一部を見出したのち、部分構造を出発点として tangent formula を用いて、構造モデルに到達するルートを作らなければならない。現在テストとして計算を行なっているのは、対称中心を持つものが多いために、あまり困難を生じていないが、今後、対称中心のない、より困難と思われる結晶についてテストを行なって、システムの改良をはかる方針である。

3.3 お わ り に

以上分子構造自動解析装置およびそのソフトウェアの基本的構想とその実施例などについて述べたが、これらはやっとその緒についたに過ぎず、更に膨大でより完全なシステムにまで達成するには道はまだまだ遠い。

しかしながらここに述べたように、また別の機会にも述べた(角戸, 1975)が、解析の自動化は今こそ緊急だと信じている。学术论文としては出てないかも知れないが、世界のどこかで既にわれわれのシステムより優れたものが作られているかも知れない。数は少ないが、高度の技術をもち、しかも最もよく組織化された日本の結晶解析研究者グループが全力を挙げ、協力して一日も早く完成できればと筆者らは願っている。

最後に本システム開発計画の初期に協力された名大・工・芦田王一教授、研究開発使用を許可された阪大大型計算機センター・センター長高木修二教授、センター運営委員会、さらに研究奨励金を交付された日本情報開発協会らに対し感謝の意を表しておく。

8. 電子計算機による電気機械 エネルギー変換機磁気回路の 解析とその最適設計法の研究

研究責任者 津屋 昇 東北大学電気通信研究所

(他 4 名)

序

本研究の目的はこれまで不可能視されていた電気機械磁気回路の第一原理に基く最適設計法の確立にある。

電気機械特に電気エネルギーと機械エネルギーとの相互変換に伴う損失は電源開発費に換算すれば現在実に膨大なものとなっている。このうちの相当な部分はエネルギー変換機の磁気回路を最も望ましい形状に設計することによって節約することが充分期待される。すなわち現在の電磁エネルギー変換器は最適設計によって製造されているという保証はない。すなわち電気機械の設計はこれまで経験の積上げによってなされてきたのみであり、電磁基礎方程式に基く、磁気履歴現象を、設計には勿論のこと、計算に取り入れる段階にすら内外ともに達していない。上記の発想による方法は最近国内外でようやく磁気メモリー学に応用され始めたが、電気機械への応用は米国でやっと非線形の効果を検討に入れる段階に達したにすぎず、最も本質的重要性をもつ磁気履歴特性の導入には至っていない。

そこで本研究では、発電機、電導機等の電気機械エネルギー変換器について、これまで試みられたことのなかった最も基本的な電磁方程式より出発する電子計算機による諸特性の解明と、この結果に基づくこれらの機器の最適設計法を明らかにしようとすることを目的とした。

われわれの発想になる研究方法の大要は次の通りである。まず静磁気回路を

例にとる。磁速密度 B のベクトルポテンシャル A は電磁方程式より

$$\text{Curl Curl } A = \text{Curl } M$$

で与えられ、この解は左辺のグリーン関数を考慮することにより

$$A(r) = \iiint dv' \text{Curl}(r') / |r - r'|$$

で与えられる。そこでまず問題の磁気回路を占める空間に M の分布を与える。

これには例えば飽和状態に仮定した分布でもよい。このときは $\text{Curl } M$ は磁性体の表面にだけ現われる。上記の積分表示により第一近似の $A(r)$ を計算し、これより $B = \text{Curl } A$ を用いて B が定まる。 B と M の関係を予め電子計算機にメモリーにおき、 B より M を求め、ついでその Curl を求めて次の近似の A を定める。以下結果が収束するまでこの計算を繰返せばよい。この方法の有効性はこれまで充分確かめている。例えばこれまで電磁石の磁極を含む磁気回路全体の最適設計を電子計算機を用いてその形状を求めるプログラムとして定めたが、これに基いて電磁石を設計すると、経験を積んだ技術者の設計の場合の約半の重量で同じ能力を示すことを明らかにした。

本研究では特に次の二点を問題とした。第1点は上記の $B-M$ 関係において如何に正しく且つ能率良く磁気履歴特性を計算機に取りこむかという問題、第2は渦流効果が問題となる電気機械におけるベクトルポテンシャル A が誤差関数類似のグリーン関数とそのフーリエ変換から導かれるというわれわれによる初めての考えを A の実計算の実行により明らかにすることである。

1. 導体磁気回路中の電磁界

導体磁気回路中では、電磁界の方程式は次のようになる。

$$\text{rot } E = - \frac{1}{C} \frac{\partial B}{\partial t} \quad (1)$$

$$\text{rot } H = \frac{4\pi}{C} \sigma E \quad (2)$$

$$\text{div } B = 0, \quad B = \text{rot } A \quad (3)$$

(1)~(3), および $B = H + 4\pi M$ を用いると次式が得られる。

$$\text{rot rot } A = 4\pi \text{rot } M = \frac{4\pi}{C} \sigma \left(-\frac{1}{C} \frac{\partial A}{\partial t} - \text{grad } \varphi \right)$$

デカルト座標を用いれば上式は

$$\Delta A - \frac{4\pi}{c} \sigma \frac{\partial A}{\partial t} + 4\pi \operatorname{rot} M - \operatorname{grad}(\operatorname{div} A + \frac{4\pi}{c} \sigma \varphi) = 0$$

となる。ここで gauge 変換を利用すると

$$\Delta A - \frac{4\pi}{c} \sigma \frac{\partial A}{\partial t} + 4\pi \operatorname{rot} M = 0 \quad (4)$$

となる。但し、ここで

$$\begin{aligned} B &= \operatorname{rot} A & E &= -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t} \\ \operatorname{div} A &= 0 & \varphi &= 0 \end{aligned}$$

である。

2. 回転軸方向における方程式の解法

回転機は近似的に軸方向に一様であるとして取扱うことができる。回転機で最も解析の困難な装置はヒステリシス電動機である。この装置では磁気履歴現象と渦流現象が共存するため、実験的な研究も不充分であるばかりではなく、理論的な取扱いも全くなされていない。もしこの取扱いが可能であれば磁石電動機とか誘導電動機には、この方法の渦流効果の小さい場合とか、磁気履歴ループが小さいが非線形が残った場合という極限の問題として容易にこの方法を応用して解析することが可能である。この事情を考慮に入れここではまず(4)を無限長円筒内部で解く。但し、円筒の軸方向(Z軸方向)に場は一様とする。また磁束密度、磁化のZ成分は考えなくてよいから零とする。すなわち、

$M_z = B_z = 0$, $\partial/\partial z = 0$ とする。そうすると $\operatorname{rot} M$, B は

$$\begin{cases} (\operatorname{rot} M)_x = \frac{\partial M_z}{\partial y} - \frac{\partial M_y}{\partial z} = 0 \\ (\operatorname{rot} M)_y = \frac{\partial M_x}{\partial z} - \frac{\partial M_z}{\partial x} = 0 \\ (\operatorname{rot} M)_z = \frac{\partial M_y}{\partial x} - \frac{\partial M_x}{\partial y} \\ \begin{cases} B_x = \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} = \frac{\partial A_z}{\partial y} \\ B_y = \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} = -\frac{\partial A_z}{\partial x} \\ B_z = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} = 0 \end{cases} \end{cases}$$

で与えられる。ここで $A_x = A_y = 0$ としても $B_z = 0$ を満たし、かつ B_x ,

B_y の表式は変化しないから、 A のうち A_z だけを考える。すると(4)は

$$k^2 \Delta_t A_z - \frac{\partial A_z}{\partial t} = -\frac{4\pi}{c} k^2 j_z \quad (5)$$

となる。ここに

$$\text{rot } \mathbf{M} = \frac{j}{c}$$

$$\frac{c^2}{4\pi\sigma} = k^2 \quad (>0)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \Delta_t$$

とおいた。

導体内外に安定電流が流れている場合には、(5)の右辺の j_z にそれを加えればよい。

(5)の特解は次のようにして求まる。

$$(k^2 \Delta_t - \frac{\partial}{\partial t}) G(xy t | \xi \eta \tau) = -\delta(xy t | \xi \eta \tau) \quad (6)$$

を満たす Green function $G(xy t | \xi \eta \tau)$ がわかれば A_z は

$$A_z(x, y, t) = \int_{\xi=x_0}^{x_1} d\xi \int_{\eta=y_0}^{y_1} d\eta \int_{\tau=-\infty}^t d\tau G(xy t | \xi \eta \tau) \frac{4\pi}{c} k^2 j_z(\xi, \eta, \tau) \quad (7)$$

で表わされる。Green function を求めるために

$$(k^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial}{\partial t}) G(xy t | \xi \eta \tau) = -\delta(x-\xi) \delta(y-\eta) \delta(t-\tau) \quad (8)$$

のように書く。上式右辺の δ -function は次のように展開できる。

$$\left. \begin{aligned} \delta(x-\xi) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_1(x-\xi)} dk_1 \\ \delta(y-\eta) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_2(y-\eta)} dk_2 \\ \delta(t-\tau) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(t-\tau)} d\omega \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

$$G(xy t | \xi \eta \tau) \text{ を}$$

$$G(xy t | \xi \eta \tau) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iint g(k_1, k_2, \omega) e^{i\{k_1(x-\xi) + k_2(y-\eta) - \omega(t-\tau)\}} dk_1 dk_2 d\omega$$

と置いて、これと(9)を(8)に代入すれば $g(k_1, k_2, \omega)$ が求まり、これを上式に代入して k_1, k_2, ω についての積分を実行すると

$$G(x y t | \xi \eta \tau) = \begin{cases} 0 & t < \tau \\ \frac{e^{-\frac{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2}{4k^2(t-\tau)}}}{4k^2\pi(t-\tau)} & \tau < t \end{cases} \quad (10)$$

が得られる。(10)を(7)に代入すると

$$A_z(x, y, t) = \frac{1}{C} \int d\xi \int d\eta \int d\tau \frac{e^{-\frac{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2}{4k^2(t-\tau)}}}{t-\tau} j_z(\xi, \eta, \tau) \quad (11)$$

3. 積層磁心あるいは絶縁性磁気回路中の電磁界

以上の取扱いにおいて $\sigma \rightarrow 0$ ととれば渦流効果の影響を小さくすることができる。そこで、 $\sigma = 0$ であれば(5)のかわりに

$$\Delta t A_z = -\frac{4\pi}{C} j_z$$

が得られる。この A_z の解は

$$\Delta t G(x y t | \xi \eta \tau) = -\delta(x y t | \xi \eta \tau) \quad (12)$$

を満たす $G(x y t | \xi \eta \tau)$ がわかれば

$$A_z(x, y, t) = \int d\xi \int d\eta \int d\tau G(x y t | \xi \eta \tau) \frac{4\pi}{C} j_z(\xi, \eta, \tau) \quad (13)$$

として求まる。(12)を解くと

$$G(x, y, t | \xi \eta \tau) = -\frac{1}{2\pi} \delta(t-\tau) \ln r$$

となる。但し $r = \sqrt{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2}$

である。従って、

$$\begin{aligned} A_z(x, y, t) &= -\int d\xi \int d\eta \int d\tau \frac{1}{2\pi} \delta(t-\tau) \frac{4\pi}{C} j_z(\xi, \eta, \tau) \ln r \\ &= -\frac{2}{C} \int d\xi \int d\eta \int d\tau \delta(t-\tau) j_z(\xi, \eta, \tau) \ln r \\ &= -\frac{2}{C} \iint j_z(\xi, \eta, t) \ln r d\xi d\eta \end{aligned} \quad (14)$$

が求める解である。

(11)と(14)との関係を調べる。まず

$$\frac{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2}{4k^2} \equiv a$$

とおくと(11)の時間積分の部分は

$$\int_{-\infty}^t d\tau \frac{e^{-\frac{a}{t-\tau}}}{t-\tau} j_z(\xi, \eta, \tau) \quad (15)$$

となる。さらに $j_z(\xi, \eta, \tau)$ が τ によらず一定だとすれば、これは時間積分の外に出すことができる。(15)で $j_z(\xi, \eta, \tau)$ を除き、 $t-\tau=x$ とおくと

$$\int_{-\infty}^t d\tau \frac{e^{-\frac{a}{t-\tau}}}{t-\tau} = -\int_{\infty}^0 dx \frac{e^{-\frac{a}{x}}}{x}$$

$1/x = y$ とおくと

$$= \int_0^{\infty} \frac{e^{-ay}}{y} dy$$

$$= \lim_{x \rightarrow 0} \int_x^{\infty} \frac{e^{-ay}}{y} dy$$

$$= \lim_{x \rightarrow 0} \int_{ax}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt$$

$$= \lim_{x \rightarrow 0} \left\{ -E_i(-ax) \right\}$$

$$= \lim_{x \rightarrow 0} \left\{ -\ln ax - \gamma + ax - \frac{(ax)^2}{2 \cdot 2!} + \dots + \frac{(-ax)^r}{r \cdot r!} + \dots \right\}$$

ここで、 $E_i(ax)$ は積分指数関数、 γ は Euler の定数である。上式は結局

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^t d\tau \frac{e^{-\frac{a}{t-\tau}}}{t-\tau} &= -\lim_{x \rightarrow 0} \ln ax - \gamma \\ &= -\ln a - \lim_{x \rightarrow 0} \ln x - \gamma \\ &= -\ln \{ (x-\xi)^2 + (y-\eta)^2 \} + \ln 4k^2 - \lim_{x \rightarrow 0} \ln \lambda - \gamma \end{aligned}$$

potential の基準点を

$$\ln 4k^2 - \lim_{x \rightarrow 0} \ln x - r = 0$$

にすれば

$$A_z(x, y) = -\frac{1}{C} \int d\xi \int d\psi j_z(\xi, \psi) \ln \{(x-\xi)^2 + (y-\psi)^2\} \quad (16)$$

となる。すなわち、 $\sigma = 0$ ならば(14)と(16)は一致し、 $\sigma \neq 0$ でも j_z が時間に依存しなければ(14)は成立する。

4. $B = \mu H$ ($\mu = \text{const}$) が成立つ導体磁気回路中の電磁界

この場合は(4)の代りに

$$\Delta A - \frac{4\pi\mu\sigma}{C^2} \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{4\pi}{C} \mu j = 0 \quad (17)$$

が成立つ。但し、 j は定電流である。

$M_z = B_z = 0$, $\frac{\partial}{\partial z} = 0$ であれば

$$k'^2 \Delta_t A_z - \frac{\partial A_z}{\partial t} = -\frac{4\pi\mu}{C} k'^2 j_z$$

となる。但し

$$\frac{C^2}{4\pi\mu\sigma} = k'^2$$

とおいた。上式の解は

$$\begin{aligned} A_z(x, y, t) &= \int d\xi \int d\psi \int d\tau \frac{e^{-\frac{(x-\xi)^2 + (y-\psi)^2}{4k'^2(t-\tau)}}}{4k'^2\pi(t-\tau)} \cdot \frac{4\pi\mu}{C} k'^2 j_z(\xi, \psi, \tau) \\ &= \frac{\mu}{C} \int d\xi \int d\psi \int d\tau \frac{e^{-\frac{(x-\xi)^2 + (y-\psi)^2}{4k'^2(t-\tau)}}}{t-\tau} j_z(\xi, \psi, \tau) \end{aligned} \quad (18)$$

となる。今、

$$j_z(\xi, y, \tau) = \sum_i \delta(\xi y | x_i y_i) I_i(\tau)$$

であれば(18)は

$$A_z(x, y, t) = \frac{\mu}{C} \sum_i d\tau \frac{e^{-\frac{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2}{4k^2(t-\tau)}}}{t-\tau} I_i(\tau) \quad (19)$$

となる。これは Induction Motor の基本式といえる。

つきに(4)と(17)との関係を調べてみる。

定電流 j があるとすれば(4)の代りに次式となる。

$$\Delta A - \frac{4\pi\sigma}{C^2} \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{4\pi}{C} (C \operatorname{rot} M + j) = 0$$

上式を変形すると

$$\Delta A - \frac{4\pi\mu\sigma}{C^2} \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{4\pi\sigma}{C^2} (\mu-1) \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{4\pi}{C} (C \operatorname{rot} M + j) = 0 \quad (20)$$

となる。ここで

$$B = H + 4\pi M = \mu H$$

の両辺の rot をとれば次のようになる。

$$\operatorname{rot} H + 4\pi \operatorname{rot} M = \mu \operatorname{rot} H$$

ここで

$$\operatorname{rot} H = \frac{4\pi\sigma}{C} H + \frac{4\pi}{C} j, \quad H = -\frac{1}{C} \frac{\partial A}{\partial t}$$

を上式に代入すれば

$$\frac{4\pi\sigma}{C^2} (\mu-1) \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{4\pi}{C} (C \operatorname{rot} M + j) = \frac{4\pi\mu}{C} j$$

上式を(20)に代入すると(17)が得られる。

5. 回転子の導電率が零の Hysteresis motor の

電子計算機による解析

5.1 Self-consistent field の方法

計算手順をまとめると次の如くなる。

第 1 段 M を仮定

第 2 段 $\text{Crot } M = j$ により j を求める。

第 3 段 (14) によって A_z を求める。

第 4 段 $B = \text{rot } A$ を用いて B を求める。

第 5 段 $B-M$ curve によって M' を求める。

第 6 段 M' と M を比較して判定

$$\begin{aligned} \text{条件} \quad & |M'_x - M_x| < a \\ & |M'_y - M_y| < a \quad (a: \text{const.}) \end{aligned}$$

を満たさなければ

満たせば

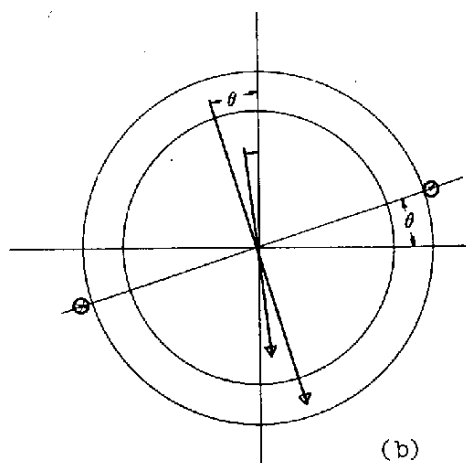
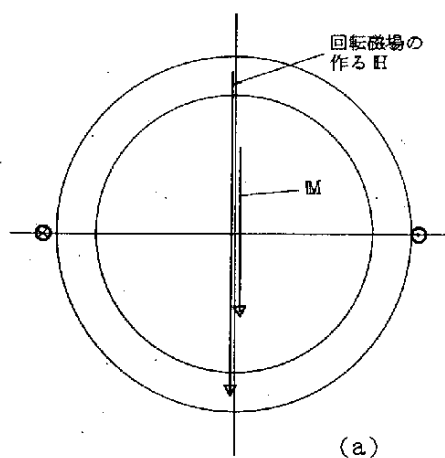
M' が Maxwell eq. を満す磁化である。

$M' + \beta (M' - M)$
を M とする。
(β は収束係数)

5.2 2 極の Hysteresis motor の解析

実際の多極の Hysteresis motor の取扱いの前に次のような 2 極の磁気回路を考える。これは定性的に多極の Hysteresis motor と原理的に同一である。まず、固定子を単なる 2 本銅線で置き換え、固定子鉄心は真空とする。これは実計算を簡単にするばかりでなく、その形状の決定の仕方による影響と、固定子磁心の μ の影響を共に受けないので、回転子の直接の励磁の様子が表われるので都合がよい。そこで図 a の構造について以下に考察する。回転子に H が加わり、 M に磁化されたとする。

H が θ だけ回転すると回転子の磁化が ϕ だけ回転する (Fig. (b))。その



結果、 H と M との間に力が働き、回転子が $(\theta - \varphi)$ だけ回転する。

回転磁場が1回転する間に回転子は

$$\frac{\theta}{2\pi} = \frac{\theta - \varphi}{\Phi}$$

$$\therefore \Phi = (\theta - \varphi) \cdot \frac{2\pi}{\theta}$$

だけ回る。すなわち

$$\frac{\Phi}{2\pi} = \frac{\theta - \varphi}{\theta} \text{ 回}$$

回転する。回転磁場が n 回回転すれば、回転子は

$$n \cdot \frac{\theta - \varphi}{\theta} \text{ 回}$$

回転する。

すべり s は従ってつぎのようになる。

$$s = \frac{n - n \frac{\theta - \varphi}{\theta}}{n} = \frac{\varphi}{\theta}$$

5.3 実際の計算について

まず媒質，空間を格子にわけ，

$$x = I t \quad (\text{or } K t)$$

$$y = J t \quad (\text{or } L t)$$

とおく。 t は格子の1辺の長さである。 I, J, K, L は1, 2, 3……である。

次に，微分を差分に，積分を和に直す。

$$j_z(x, y) = C \left(\frac{\partial M_y}{\partial x} - \frac{\partial M_x}{\partial y} \right)$$

は次のようになる。

$$j_z(K, L) = C \left\{ \frac{M_y(K+1, L) - M_y(K, L)}{t} - \frac{M_x(K, L+1) - M_x(K, L-1)}{t} \right\}$$

対称性を考えて

$$= \frac{C}{\delta} \left\{ \frac{M_y(K+1, L) - M_y(K-1, L)}{t} - \frac{M_x(K, L+1) - M_x(K, L-1)}{t} \right\}$$

とする。

$$A_z(x, y) = -\frac{2}{C} \iint j_z(\xi, \eta) \ln r d\xi d\eta$$

は

$$A_z(I, J) = -\frac{2}{C} \sum_{K, L} j_z(K, L) t^2 \ln \sqrt{(I-K+0.5)^2 t^2 + (J-L+0.5)^2 t^2}$$

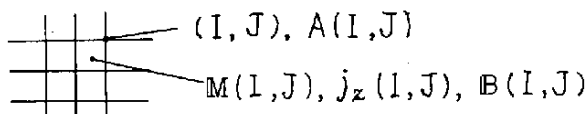
$$B_x(x, y) = \frac{\partial A_z}{\partial y} \quad B_y(x, y) = -\frac{\partial A_z}{\partial x}$$

は対称性を考えて

$$B_x(I+1, J+1) = \frac{A(I, J+1) - A(I, J) + A(I+1, J+1) - A(I+1, J)}{2t}$$

$$B_y(I+1, J+1) = \frac{A(I, J) - A(J+1, J) + A(I, J+1) - A(I+1, J+1)}{2t}$$

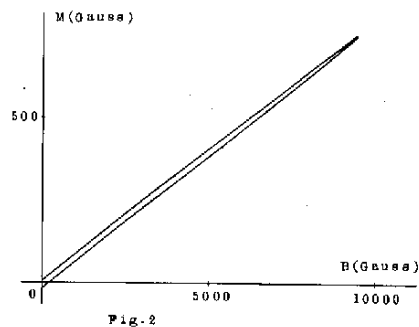
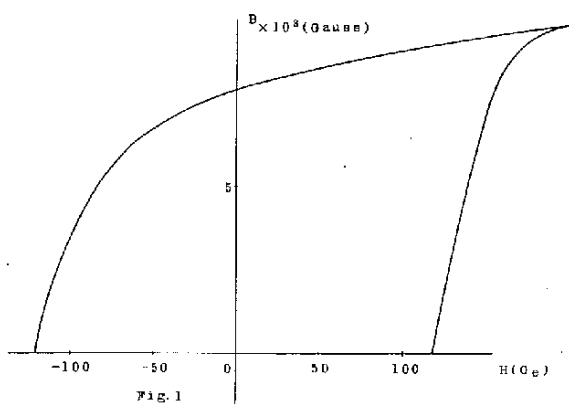
$j_z(I, J)$, $A_z(I, J)$, $M(I, J)$, $B(I, J)$ は下図の点



次に, B-M curve について. B-H curve が Fig. 1 のようであれば, B-M curve は Fig. 2 のようになる. 簡単のために Fig. 2 を Fig. 3 で近似する. Fig. 3 を用いて B より M を求めるには次のようにする. $M = |M| \equiv m_1$ を仮定して, $B = |M| = b_1$ が求まったとする.

$$\text{IF}(b_1 \geq \frac{m_1 + a_2}{a_1}) \Rightarrow M = a_1 b_1 - a_2$$

$$\text{IF}(b_1 \leq \frac{m_1 - a_2}{a_1}) \Rightarrow M = a_1 b_1 + a_2$$



これら以外るとき (すなわち $\frac{m_1 - a_2}{a_1} < b_1 < \frac{m_1 + a_2}{a_1}$ のとき)

$$M = m_1$$

M の方向については B-M curve により M を求め、この M が前回に仮定した M' よりも大きいときは B と M の方向は同じとし、M が M' よりも小さいか等しいときは前回の方向のままとする。すなわち

$$M > M' \text{ のとき } M_x = B_x M / B, \quad M_y = B_y M / B$$

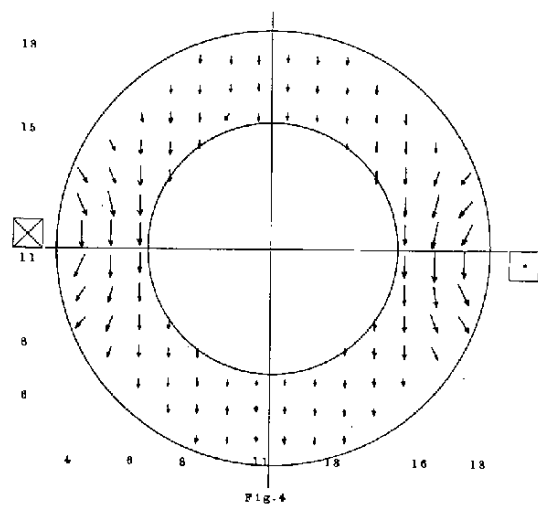
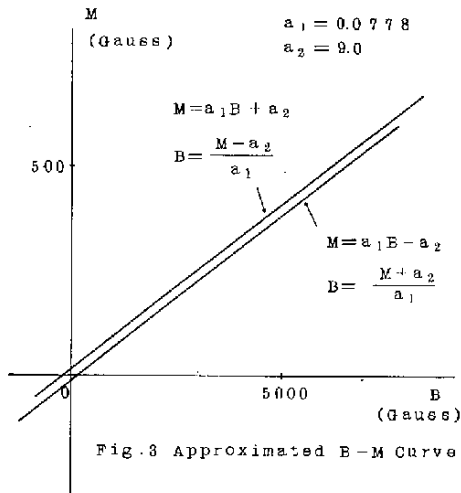
$$M \leq M' \text{ のとき } M_x = M'_x M / M', \quad M_y = M'_y M / M'$$

$$(M'^2 = M_x'^2 + M_y'^2)$$

収束係数について。M₁ を仮定して M₂ を求め

$$|M_{1x} - M_{2x}| < a \quad (a: \text{const.})$$

$$|M_{1y} - M_{2y}| < a$$



を満たされなければ

$$M_2 + \beta (M_2 + M_1)$$

を新しい M_3 として仮定し M_4 を求める。実際に計算した結果 $\beta = 0.1 \sim 0.2$ のとき、最も収束が速かった。

電子計算機で実際に計算した結果を Fig. 5 に示す。

回転磁界の回転は次のように考える。Fig. 4 の M を初期条件として計算機に入れ、定電流を Fig. 4 の状態から少し回転させて、上述の方法を繰り返す。計算結果を Fig. 5 に示す。

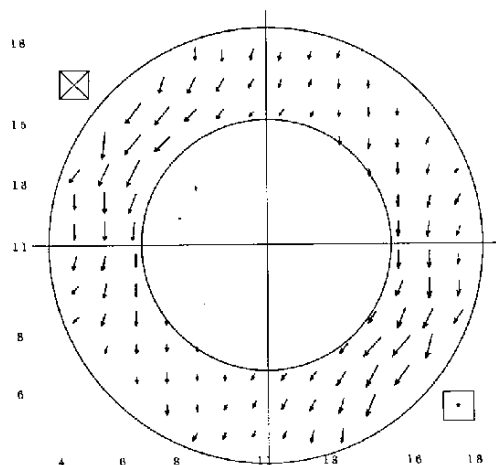


Fig. 5

Fig. 5 の状態から回転磁界を
45°回転させた状態

9. 制癌性有機化合物に関する電算機の 高次利用研究

慶応義塾大学医学部

稲山 誠一 (他4名)

本研究の目的は電算機の高次利用により制癌性有機化合物の化学構造と生物活性並にその相関について得られる情報の基礎の上に制癌機構の解析と新規制癌物質の開発を行うにある。

本研究を開始するに至った契機は特定の天然物の構造研究であった。アメリカインディアンの民間薬として知られる北米原産の菊科植物てんてんぎく (*Gaillardia pulchella*) の成分に興味を持ち、下記の各種タイプの新規セスキテルペンラクトン類を単離して夫々、全立体構造を確定することが出来た。即ち、プソイドグアイアン型のセスキテルペノリッド *pulchellin* (1a) 及び *neopulchellin* (1b, 8 α H), グアイアン型の *gaillardin* (2a) 及び *neogaillardin* (2b, 8 α H), 更にオイデスマン型の *pulchellinB* (3a, R=Ac, R'=H), C (3b, R=R'=H), E (3c, R=H, R'=Ac) 及び F (3d, R=Angeroyl, R'=H) である。これ以外に重要な化合物は従来にないタイプのユニークなセスキテルペンアルカロイドの *pulchellidine* (4a) 及び *neopulchellidine* (4b, 11 α H, 8 α H) であり、化学的には 1a 及び 1b のビペリジン *michael* 付加体を構成するのみならず、生物学的には 1a 及び 1b の陰蔽種と看做し得る。これらセスキテルペノイドはいづれも副鼻腔癌由来の KB-cell に対し増殖抑制効果を示した。因に、原植物は生産地によって上記主成分セスキテルペンの基本骨格型を異にする点、化学分類学的に興味深い。

さて、これらの化学構造から明らかな様に α -methylene- γ -lactone 又はそ

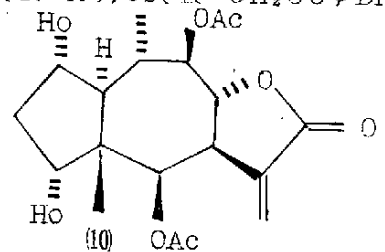
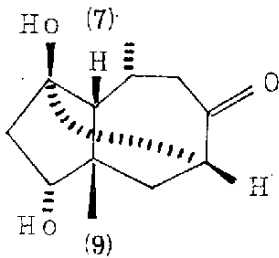
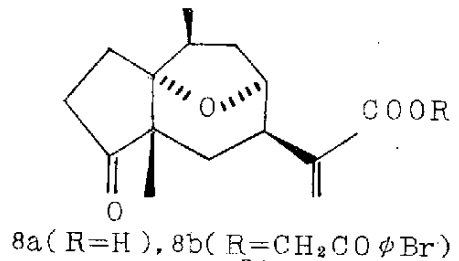
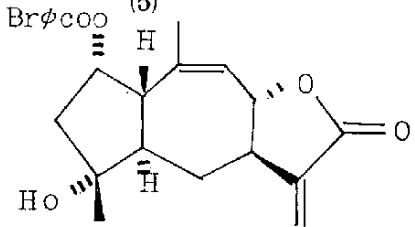
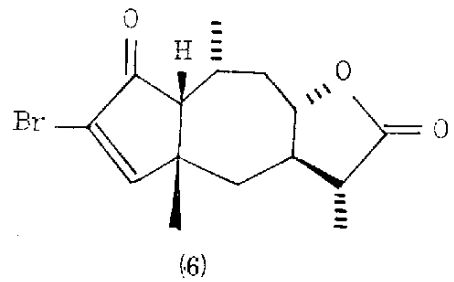
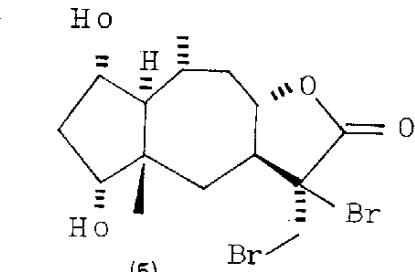
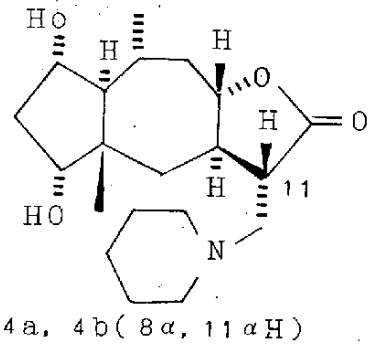
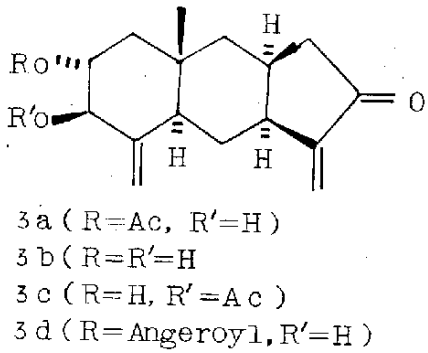
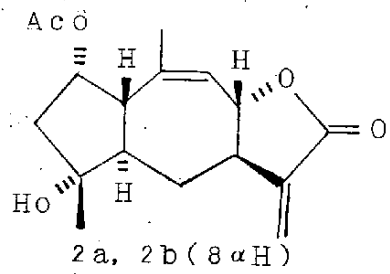
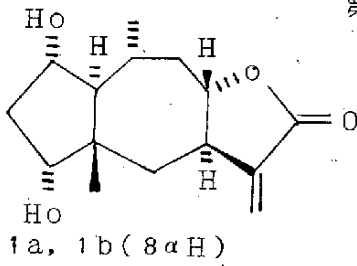
のmodification は一つの共通した化学的装いの特徴であり、後述の様に生物学的活性発現に不可欠の要素といえる。即ち、各セスキテルペンラクトンを還元したジヒドロ体の α -methyl- γ -lactone 類は、凡て分子中に他の活性官能基の存在しない限り一般に生物活性を呈しない。又、エステルサイドチェーンを加水分解すると活性は低下するに反し、エポキシド、 α 、 β -不飽和ケトン等の共存は活性を高め、これら官能基は従って α -methylene- γ -lactone による主作用を助長すると考えて差支えない。更に、上記セスキテルペノリッドを含め α -methylene- γ -lacton 類はチオール及びアミン類と反応性に富むことが知られている。この様な事実に基づいて、これら化合物群の多分、細胞毒性に由来する抗腫瘍効果は、例えば核酸やDNA等生体系の親核性反応中心のアルキル化作用に関連するか、又はその結果と考える得る。

絶対配位を含む薬物の立体構造がその生理作用と密接にかかありあいをもつことは今更いうまでもない。化学的並にスペクトル的手法により帰結された前記セスキテルペノリッド類が予期の通り正しい絶対配位を含む立体構造であることを確認することが先決であり、そのため三次元X線結晶構造解析法を用いることとした。

先ずpulchellin(1a)について調製された2, 3の重原子含有誘導体のうち最適の11, 13-dibromopulchellin(5)の単結晶(空間群 $P2_1$)を用いX線回析を行った。Cu α 線により観測された18450の反射強度について数回フーリエ解析を行い、異方性温度因子を用いて最小自乗法により各原子の座標を決め最終的R因子は11.8%であった。非対称単位中の独立する2分子は7員環部がやゝ捻れた同一のコンホメーションをもち、1aに図示された絶対配位をもつ立体構造が明らかにされ、同時に、ボルケリデン(4a)の主立体構造にも解明された。

殆どこれと前後して1aの含臭素誘導体のcis-bromodehydroanhydrodihydro pulchellin(6)の単結晶(空間群 $P2_1 2_1 2_1$)についてもX線解析を施行した。三次元パターン函数からブロムの位置を決め、最初のフーリエ電子密

第 1 圖



度図が計算され、残りの構造は異方性 full-matrix 最小自乗法で精度を上げ R 値は 6.6% となった。明らかにされた立体構造は(6)に示された通りである。

同様にして Gaillardin(2a) はその C_{10} -アセトキシル基をパラグラム安息酸エステルとして置換したハロゲン誘導体(7)の単結晶(空間群 $P2_12_12_1$, 単位格子中は 4 分子を含む)について X 線回析を行い, $MoK\alpha$ 線について得られた 1032 コの反射から計算後, 最終 R 値は 9.4% となり図示の絶対構造をもつことが明らかにされた。

因に, 上記てんにんぎくに類縁の花粉症の元凶として悪名高いぶたくさ (*Ambrosia Arthemissifolia*) の花粉成分 Ambrosic acid の絶対構造(8a)もそのパラブロムフェナチルエステル誘導体(8b)についての X 線結晶構造解析によって明らかにされた。この場合, 単純な重原子法によらずブロムの異常分散を併用する重原子法により単斜晶系に属する単結晶(空間群 $p2_1$)について $MoK\alpha$ 線 (Zr フィルター) による 741 コの反射強度からブロムと軽原子 142 コの位相を決め, ついで, $CuK\alpha$ 線による 1186 コの反射強度を併用してフーリエ合成を行い絶対配置を併せ全原子の座標を浮び上がらせた。異方性熱振動因子と考慮に入れブロック最小自乗法で座標の精密化すると最終 R 値は 7.3% となった。この様にして得られた電子密度図から原子間距離, 原子間角度が算定され, プソイドグアイアン骨格の 7 員環部はボート型をとり, 又, C_{10} -及び C_{10} -メチル基が異常に接近 (3.23 Å) している点が注目される。

最近, てんにんぎくの上記主成分セスキテルペノリッド以外にフロリダ採集品から微量副成分として pulchellon (9) を単離し立体構造を決定したが, 絶対配位は不明のため目下, 直接法により X 線的に確定しつつある。更に, ごく類縁のおおてんにんぎく (*Gaillardia grandiflora*) (*G. pulchella* と *G. aristata* の hybride) から pulchellin(1a) より高次に酸化をうけたセスキテルペノリッド, grandiflorin(10) を単離し化学的に図示の立体構造を提出したが, これも, 目下 X 線的に絶対構造まで確定すべく X 線回析を直

接法により実施中である。又、このものはpulchellin(1a)と同等以上の制癌性が期待されるので生物試験を予定している。

以上、主としててんにんぎくの制癌性セスキテルペノリッドについて全立体構造と絶対配位の決定にX線結晶構造解析の有効なことを例示説明したので、以下に今少し具体的に回析の手順と電子計算機の活用について触れたい。

X線回析計(最近ではphillipsの4-circle自動回析計)に回析に適した単結晶の試料をとりつけ、一般に2,000~3,000コのブラッグ反射の強度を自動的に計数管で測定する。測定結果はオンライン計算機で処理され、更にタイプライターで印字され、同時に紙テープに穿孔されて出てくる。その情報は各反射について面指数(hkl)、種々の測定条件、アテヌエータの有無、走査回数、走査幅、バックグラウンド測定時間、測定結果、低角度側及び高角度側でのバックグラウンドの計数値、反射の積分計数値である。

次に、穿孔されたテープを大型計算機(HITAC 8,800~8,700又はIBM 360~375)にかけて各反射について上記情報を読みとり、種々の補正を施し反射の積分計数値からバックグラウンド全計数値を引き、正味の積分計数値にする。走査速度が異なるとき、あるいは走査回数が異なるときには、それらを標準値にしたときの積分計数値に換算する。強度の積分計数値に対しローレンツ因子や偏光因子の補正を施し、平方根を求める結晶構造因子($1F_{01}$)に変換するなど、多数のブラッグ反射の面指数(hkl)、結晶構造因子($1F_{01}$) (相対値)及び $1F_{01}$ の標準偏差を求めて、カードに穿孔して出したりディスクファイルに収めたりする。その際、同じ反射あるいは同価の反射については、それらの平均値をとり独立な反射のデータだけに整理する。

次に当該結晶中で各原子が統計的にランダムに分布していると仮定したときに予期される平均強度(各反射について)と、上記の様にして実際に観測された反射強度との比較を行い、規格化構造因子($1E_{01}$)を各反射について算出し、磁気テープ、ディスクなどに入れられる。

$1E_{01}$ の大きな方から数十コの反射を選び、

$$\varphi_{hkl} = \varphi_{h,k,l} + \varphi_{h-h_0, k-k_0, l-l_0}$$

のような3つの反射($hkl, h_0k_0l_0, h-h_0, k-k_0, l-l_0$)の構造因子の位相角を結びつける関係式をつかって、出来るだけ多くの反射の位相角を決定する。その際、始めに数コの反射の位相角を仮定しておく。

得られた1EoI, φ の値を使いフーリエ合成を行ってE-mapを計算する。これはすべての原子を点原子と看做してその点の中心に原子番号Zに比例した原子密度があると仮定したときの電子密度分布図にあたる。

E-map上で原子の存在を確認、合理的な構造を示しているか否かを検討する。合理的でなければ再び前記1EoIの大きい方から反射の位相角を決定するところから手順を繰返す。

この様にして多くの原子の所在が分れば、それらの座標を読みとり、その構造モデルについて各反射の結晶構造因子(Fc)を計算し1FoIおよび φ_c を求める。

次に、1FoIに φ_c をつけてフーリエ合成を行い、電子密度分布図を作製して真実の構造であるか否かを検討し、今迄に見出せなかった原子があればそれらの原子の所在を決める。

以上、2つの手順を繰返し、全原子の座標を確定する。

最小自乗法によりかくして得られた各原子の座標および温度因子のパラメーターをより精密化する。この計算を数サイクル繰返し、精密化の度合は、R因子 = $\sum_{hkl} |1EoI - 1Fci| / \sum_{hkl} 1FoI$ の値がどの位小さくなったか等で判定される。

水素原子の所在は上記の精密化されたパラメーターを使い、再びFcを計算し差フーリエ合成(フーリエ合成における1FoIの代わりに1FoI-1Fciを使ったもの)を行って求める。これは真実の構造と現在考えている構造との差の構造を示すので、現在水素原子を考えていなければその差フーリエ合成図には水素原子が現れる。

水素原子のパラメーターを加えて先程の様に最小自乗法を用い計算を繰返し

すべてのパラメーターの精密化を行う。

最後に再び差フーリエ合成を行い、もはやとり残した原子がないことを確認し、異常がなければ精密化を終了する。

原子間距離や原子間角度の計算、プロッターによる構造の図示などを行う。

更に、絶対配置の決定をするためには、強度測定の際に測定座標系のhandednessをきめて、 hkl 反射に対しフリーデル反射の関係にある $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ 反射もしくは、 $\bar{h}k\bar{l}$ と同価の反射の強度を精密しておく。既に測定済みのデータでは精度不十分と判断されたときはここで再び測定を行う。尤も再測定は以下の計算の結果をみて $|Fc(hkl)|^2$ と $|Fc(\bar{h}\bar{k}\bar{l})|^2$ の差の大きなものだけに限ってもよい。

使用するX線の波長を考慮し、構造中の異常分散効果の著しい原子散乱因子の異常分散補正項 $\Delta f'$ 、 $\Delta f''$ を加え、 hkl および $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ 反射に対する $|Fc(hkl)|^2$ および $|Fc(\bar{h}\bar{k}\bar{l})|^2$ を計算する。例えば、Cuk α 線に対する酸素原子の $\Delta f' = 0.047$ 、 $\Delta f'' = 0.032$ が使われる。

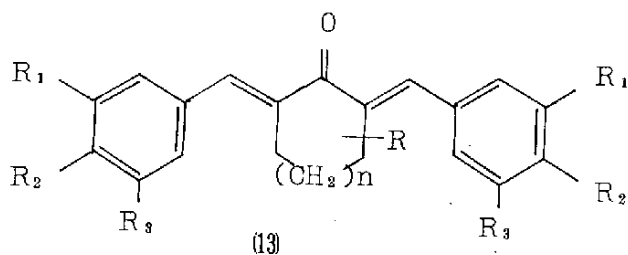
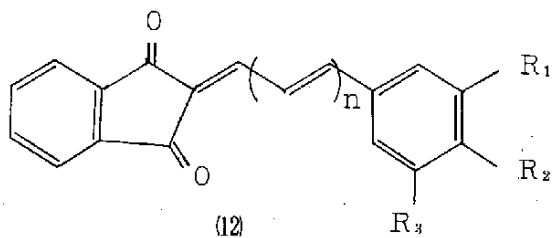
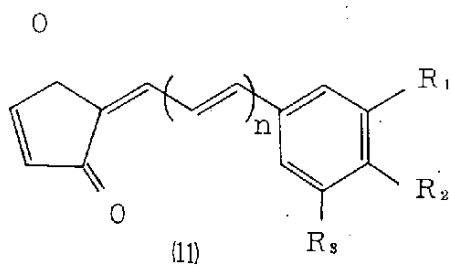
$|Fc(hkl)|^2$ 、 $|Fc(\bar{h}\bar{k}\bar{l})|^2$ と $|Fo(hkl)|^2$ 、 $|Fo(\bar{h}\bar{k}\bar{l})|^2$ とを比べ、 hkl と $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ とで大小関係を示すような測定座標系のhandednessをきめ、その系で最終座標をあらわすことにより絶対配置が求められる。

以上のようにして、てんにんぎく並にその類縁種の抗腫瘍性セスキテルペノリッドの完全な立体構造はすべて明らかにされた。又、これらセスキテルペン中に占める α -methylene- γ -lactone部の存在は細胞毒性発現のため不可欠の要素であり、一方、その同族体の α -methylene- δ -lactoneの存在は活性に直接寄与しないことが判った。更に、高次に不飽和の γ -lactoneである γ -methylene- $\Delta^{\alpha,\beta}$ - γ -lacton類は、例えば、patulin, protoanemoninのように抗菌性の抗生物質で代表される。今 α -methylene-cyclopentanoneを α -methylene- γ -lactoneの炭素環状代置構造と看做するとき、両者とも親電子体として同じ α -methylene-carbonyl基をもっているのも、核酸のような生物的親核種に対するアルキル化剤として一つの重要な役割を演ずるものと考えられる。この比較から α -methylene-cyclopentanoneのあ

る誘導体は一般に抗腫瘍活性を示すに違いないと思った。事実、抗腫瘍性の抗生物質 sarkomycine A, 即ち, $(-)\beta$ -hydroxycarbonyl- α -methylene cyclopentanone はその好例であろう。然し, これらの比較的 low molecular weight の α -methylene-cyclopentanone 類は生物系における脂溶性と安定性に欠けているので, 上記の推論の基礎の上に, 又その推論の正当性を裏付ける意味において, arylidene cyclopentanone の電子構造に着目した。実際の化合物として α -methylene 基より脂溶性の高い α -arylidene 基をもち, 母核には cyclopentanone や cyclopentandione より電子親和性の高い cyclopenten-1, 3-dione のあるものを選んだ。

以上のドラッグデザインの基礎の上に, 各種置換 benzaldehyde と cyclopenten-1, 3-dione および indan-1, 3-dione を夫々, 酸又は均基触媒の存在下, 適当な溶媒中, 加熱縮合させ, 多数の 2-arylidene-cyclopenten-1, 3-dione (11) 並に 2-arylidene-indan-1, 3-dione (12) 誘導体を合成した。又, 比較のため bis- および mono-arylidene cycloalkanone (13) 類も合成した。これら合成化合物について腹水癌担癌マウス (S-180) を用い抗腫瘍性スクリーニングを行った。その結果, 合成したすべての 2-arylidene-4-cyclopenten-1, 3-dione 誘導体 (11) は 10 mg/kg/day の dose で著しい腫瘍増殖の抑制効果を示した。就中, $(4'\text{-hydroxy-3'-methoxybenzylidene})$ -4-cyclopenten-1, 3-dione は最も活性が強く 3 mg/kg/day で有効である。これに対し, 類似の 2-arylidene-indan-1, 3-dione (12) 類では $4'\text{-hydroxy-3'-methoxybenzylidene}$ 体のみが活性を示したが (100 mg/kg/day), 対立する前記 cyclopentendione 類似体に比べると効力は僅か 3 分の 1 に過ぎない。ここで注目すべきことは抗腫瘍活性発現のためには benzylidene 部の para および meta 位の両方が hydroxy 基又は methoxy 基で置換されていなければならない。又, cyclopentendione 部及び arylidene 部の何れも carbonyl 基に共扼する endo 又は exo の二重結合を除去すると失活する。更に, 単純な arylidene-cycloalkanone 類, 例えば,

第 2 図



R_1 : H, OCH_3

R_2 : OH, OCH_3 , $OCH_2\phi$

R_3 : H, OH, OCH_3

R : H, m- CH_3 , p- CH_3

n : 0, 1

mono-及びbisarylidene cyclopentanone は勿論, cyclohexanone analogue すべて抗腫瘍性を示さなかったことは興味深い。

以上, 2-arylidene-4-cyclopenten-1, 3-dione (11) 合成化合物は, 前記天然より得られた α -methylene- γ -lactone より, より脂溶性の炭素環状同族体と考えられると共に, それらと同等又は類似の抗腫瘍活性を有すること

とが明らかにされた。そこで、これら活性化合物について活性に關与する構造上の物性として脂溶性 (lipophilicity) および電子親和性 (electrophilicity) の定量化研究に着手した。

制癌性合成化合物の生物活性を $\log(1/C_{50})$ で表し、受容体隔壁に到達する投与量部分の指標として脂溶性を n -オクタノール-水系の分配係数幅の対数で表し、両者の相関を

$$\log(1/C_{50}) = a \cdot \log p + b$$

近似のグループ別に最小自乗法分析により求めた。その解析は未だ完全でないが、少くとも分配係数 p の高い化合物群は活性が高いが、逆に、活性の高いものの分配係数は必ずしも大きくないことが判った。

次に、活性合成化合物の基本構造として、2-benzylidene-4-cyclopenten-1, 3-dione について分子の電子親和力 (A) およびイオン化電位 (I) を求めるため、アニオンラジカルおよびカチオンラジカルの全エネルギー、 E_A および E_B を非制限 HINDO/2 法で計算したところ、すべての化合物について収束した結果は得られなかった。そこで正常分子の最高被占準位軌道 (HOMO) および最低空準位軌道 (LUMO) の軌道エネルギーに負の符号をかけたもので代用した。同様に、2-benzylidene-indan-1, 3-dione について計算した結果を比較するとき、前者の方が後者よりイオン化電位は大きく、又、電子親和性も高い。このことは cyclopentendione 誘導体が indandione 誘導体より制癌効果の秀れている丁実を支持するものであり、前記ドラッグデザインにおける推論の正当性を裏付けるものと思われる。目下、その他の誘導体について同様に電子密度計算を実施中であり、制癌性合成化合物の活性と電子親和性との相関が一層明確化されるであろう。

10. Flowchart Languageの処理系 の開発とその応用

早稲田大学理工学部

教授 門倉 敏夫 (他3名)

1. 研究の目的と社会的意義

プログラミング言語は、できるだけ、言語そのものの規則や使用計算機の特性にとらわれず、アルゴリズムを素直に表現できるものであることが望ましい。そして、アルゴリズムは、それが適用される応用分野ごとに、最適の記法で記述する方がよい。アルゴリズムは関数と述語の順序づけられた組であり、その順序づけの表現はフローチャートの方法によるものが見やすいであろう。

Flowchart Language (以下、FLと略称する)はこのような考察のもとに開発された。すなわち、使用する関数と述語の組をabilityと呼び、abilityは応用分野ごとに容易に変更できるようにし、順序表現はフローチャートによることにした。

現在、ソフトウェアの危機が叫ばれ、ソフトウェアの製作、保守の難しさが指摘されている。この難関を突破するためには、ソフトウェアの製造、保守に積極的に計算機を利用するとともに、それに適したプログラミング言語を開発することから始めることも一方法である。FLはそのような動機から開発された言語であり、ソフトウェアの製作、保守の現状を変え、大きく前進させるものであると考える。

情報処理技術の社会への急速な浸透によってますます高度に情報化されようとしている現在社会において、情報処理技術の最大の難問題に1つの解決を与え、ソフトウェア製作、保守の生産性を大きく向上させることは、はかり知れない恩恵を社会にもたらすことになると思う。

2. 研究の内容と成果

FLをプログラミング言語とするため、つぎのような方法をとった。

(i) FLの記述と方法がある程度制限する。

(ii) (i)で定める方法で記述されたFLプログラム (PFL) を、それに対応する記号列 (SFL) に変換する方法を与える。

(iii) SFLを適当な言語に変換するトランスレータを作成する。

このとき、一番問題になると思われたのは(ii)であるが、われわれがこれまでに行った実験によれば、キーバンチャーを高々数時間教育することにより、PFLを見ながらSFLをバンチすることが可能である。

FLのプロトタイプとしてability をFORTRANに求めたFFL (FORTRAN-Oriented Flowchart Language) を設計し、その処理系を開発していくつかの応用を試みた。

FLの理論的考察については発表論文1), 2) を参照されたい。

2.1 FFLによる記述

FFLによるコーディングの基本単位は句である。句はFL記号と単語からなる。FL記号は句の機能を表わし、単語は句の機能を詳細に記述している。いくつかの句によって1つの文が構成される。文にはただ1つの始端子句と1つ以上の終端子句がなければならない。FFLプログラムは1つ以上の文からなる。FFLプログラムが2つ以上の文からなるときは、1つは主文と呼ばれ、残りは副文と呼ばれる。FL記号の一覧表を表1に示す。

FFLではつぎの14種類の句が許される。すでに述べたように、FFLはabilityをFORTRANに求めたFLであり、abilityは単語の記述に影響するだけである。

(1) 代入句

右辺の式の値を左辺の変数に代入する。

(2) 入力句

入力装置上のデータを読み込む。

(3) 出力句

出力装置にデータを書き出す。

(4) コール句

副文を呼び出す。

(5) 宣言句

変数、定数の属性や値に関する宣言を行なう。

(6) コネクタ句

ジャンプコネクタ句とラベルコネクタ句があり、前者はプログラム制御権を強制的に特定のラベルコネクタ句に移すことを指令し、後者はその受け口を表わす。

(7) 判断句

論理式の値（真もしくは偽）によって2方向の分岐を生じさせる。

(8) スイッチ句

1つ以上の論理式からなり、1つ以上の方向への分岐を生じさせる。通常、ジャンプコネクタ句と組んで用いる。

(9) リピート(Repeat)句

反復領域の先頭であること、反復の条件を表わす。ターパ句と対にして用いる。

(10) ターパ(Taeper)句

反復領域の終りを表わす。リピート

F L 記号		名称	機能
pFL	sFL		
	≡ (+)	代 入	代入が行なわれることを示す。
	% (+)	始 端 子	文の入口を示す。
	% (-)	終 端 子	文の出口を示す。
---{	@ (S)	注 釈	注釈であることを示す。
	≡ (+)	入 力	外部装置からデータを読むことを示す。
	≡ (-)	出 力	外部装置にデータを書き出すことを示す。
	! (/)	宣 言	変数の属性や値を宣言することを示す。
	? (-)	判 断	判断が行なわれることを示す。
	?? ---	ス イ ッ チ	2方向以上への分岐を行なわれることを示す。
	*	コネクタ	無条件分岐、および、分岐の入口点を示す。
	≡	コ ー ル	サブルーチンを呼ぶ、callすることを示す。
≡	≡	エ ン ド	文の終りを示す。
≡	≡	終 結	直前のカードからの継続であることを示す。

表1 F L記号一覧表

句と対にして用いる。

(11) 始端子句

文の先頭を表わす。

(12) 終端子句

その文の外にプログラム制御権が返されることを表わす。

(13) 注釈句

プログラム中に注釈を記入するために用いる。

(14) エンド句

文の（物理的な）終りを表わす。

PFL記号と単語からなる句をフローラインで結んでつくったフローチャート形式のプログラムをPFLプログラムという。このようなFLコーディングは後に述べる記号列としてのFL，すなわちSFLと区別するためにPFLコーディングと呼ぶ。コーディングシートはPFLのためにだけ用意されており，SFLのためのコーディングシートはとくにない。

PFLコーディングの例を図1に示す。コーディングシートは1ページ4レーンである。左から順に第1レーン，第2レーン，第3レーン，第4レーンと呼ばれ，あるページの第4レーンの右には次のページの第1レーンが続くと考えられる。コーディングは第1ページの第1レーンの上から下へ書きはじめ，レーン内に書き込めなくなったときは，コネクタ句を用いてあいているレーンに移る。判断句において下方に進む以外のフローラインは隣接するレーン中のコネクタ句でもよいし，それ以外のレーン中のコネクタ句でもよいが，後者の場合はフローラインの傍にジャンプコネクタ句を書かなければならない。

2.2 FLの処理系

PFLコーディングは計算機への入力のために，一定の規則にしたがってキーパンチャーによりカードに穿孔される。このようにしてできたコーディングをSFLという。PFLとSFLは1対1に対応しており，いずれの方向への変換も機械的に正しく行なうことができる。

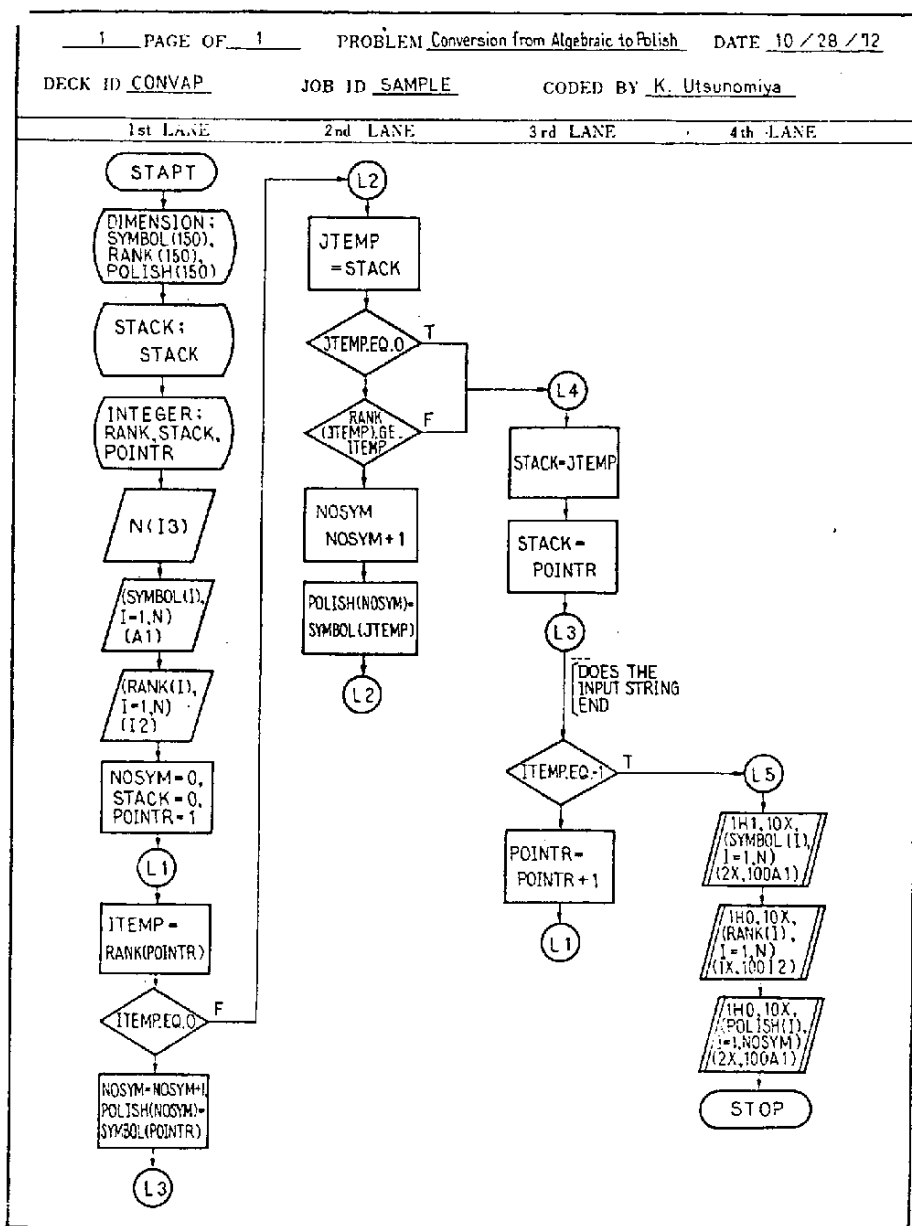


図1 PFLコーディングの例

このようにしてつくられた SFL コーディング (カードデッキ) は処理系に
入力される。F L の処理系は F L コンパイラとオートチャータからなっており、
F L コンパイラはシンタックスアナライザとジェネレータに分かれている。

シンタックスアナライザは、SFL コーディングのシンタックスをチェック、
解析して、単語テーブルと属性テーブルをつくる。ラベルの定義と引用に関す
る情報は CR テーブルに記入され、編集されて Cross Reference Table と
して出力される。シンタックスアナライザのもう 1 つの重要な作業はコネクタ
句を機能に応じて細分類することである。

ジェネレータは、シンタックスアナライザから渡されるテーブルをもとに、
FORTRAN コーディングを生成する (F F L では目的言語を FORTRAN と
考えているが、シンタックスアナライザ、ジェネレータの一部を変更すること
により目的言語を適当に選ぶことができる。

一方、オートチャータは、シンタックスアナライザによってつくられたテー
ブルから、PFL コーディング、すなわち、フローチャートを生成する。した
がって、ユーザにとって、オートチャータ出力は PFL コーディングのソース
リストと考えるべきものである。オートチャータは 3 つのフェイズからなっ
ている。フェイズ 1 では、単語を書き入れる箱 (すなわち、PFL 記号) と、そ
の箱をレーン中のどの位置に書くかを決定する。このとき、反復ブロックはで
きるだけ同一レーンに納める、ジャンプもできるだけ隣接するレーンを行なう
ようにすることを配慮している。フェイズ 2 では、隣接レーンを結ぶフローラ
インを書くために使用するレーン間チャンネルを決定する。これらの結果を用い
て、フェイズ 3 で SFL コーディングと等価な PFL コーディング、すなわち、
フローチャートを書く。オートチャータで生成したフローチャートの例を図 2
に示す。

2.3 FL の応用

FL の応用もいくつか実験した。まず、プログラミング言語としての実験の
ため、多数の学生に FFL でプログラムを書いてもらい処理系で処理してみた。

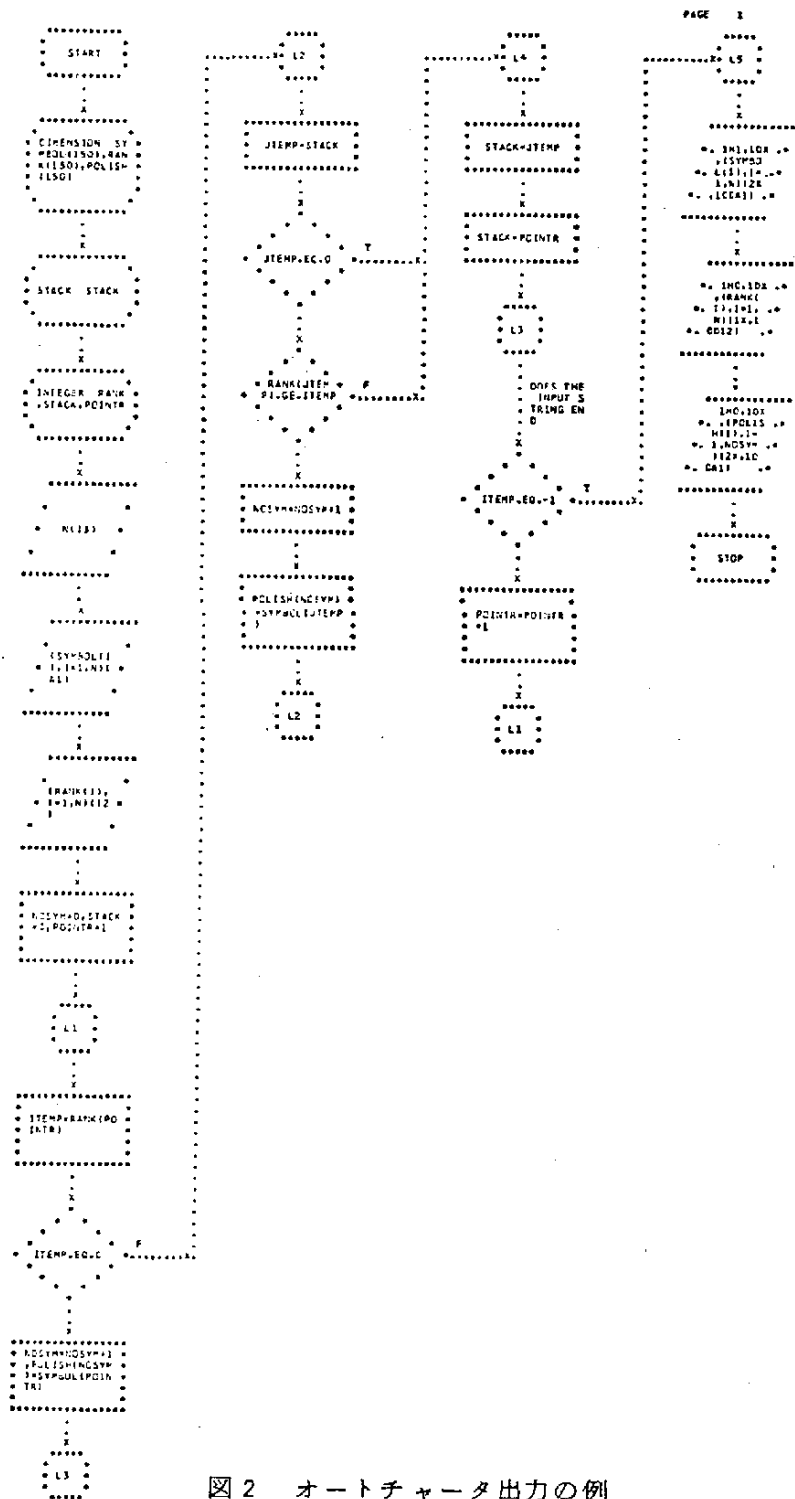


図2 オートチャータ出力の例

充分実用できることが確認されたが、図をかくため多くのコーディングシートを必要とすることが指摘された。一方では、オートチャータによるフローチャートを参照しながらSFLレベルでデバギングできること、ドキュメンテーションが楽、すなわち、最終的なフローチャートが自動生成されることなどが長所として指摘された。

FLをシステムプログラム言語として使ってみる実験もした。たとえば、数式のコンピレーションなどは、FLがスタック変数进行处理できるため、他の言語に比べてコーディングが楽だし、記述性がよいことも確かめられた。

また、デバギングを完了した時点のフローチャート、技術変更や保守によって変更されたプログラムのフローチャートが自動生成されることは、保守管理が難しいシステムプログラムに対しては、とくに大きな省力化につながるということが認められた。

FLが簡単なプログラムの等価性や同等性のチェックにどの程度有効かも実験してみた。現時点では簡単にチェック可能なクラスはかなり小さいことが判った。この問題は今後に残された研究課題の1つである。

他のプログラミング言語で書かれたプログラムのフローチャートをオートチャータに生成させる実験をした。具体的には、(任意の)プログラミング言語のプログラムをMFL (Modified FL) という言語に変換し、そのフローチャートをオートチャータに書かせるようにした。すなわち、MFLをインタフェイスにし、MFLへの変換プログラムをつくることにした。たとえば、COBOLプログラムはCOBOLからMFLへの変換プログラムでMFLに変換したのち、オートチャータを用いる。また、別途開発中の汎用マクロ言語AML (A Macro-programming Language) では、ドキュメンテーション・モードをもうけ、マクロ原型ステートメント、注釈ステートメント、注釈フィールドにMFLによる記述ができるようにした。したがって、AMLプログラムのフローチャートをオートチャータで生成することができる。とくにAMLプログラムがすべてマクロ命令で書かれているときは、その結果は抜群である。

3. 研究の独創性

2 から明らかなように本研究は以下のような独創性を有している。

(1) FL では CRT ディスプレーやグラフィックディスプレイを使わず、PFL コーディングを SFL コーディングに変換してカードで入力するので、大量の情報を安価に入力することができる。

(2) FL ではアルゴリズムを関数や述語の順序づけられた組と考え、その順序づけの表現にフローチャートの手法を用いているだけであるから、関数や述語を応用ごとに決めることができるという順応性を有している。

(3) オートチャータによりソースリストと考えられる PFL コーディングが随時得られ、それを参照しながらデバギングすることができる。また、デバギングなどを完了して、最終的なドキュメンテーションとしてフローチャートを使うときは、ドキュメンテーション・モードを指定することによって編集された読み易いフローチャートが得られる。すなわち、人間のパターン認識力に直接訴える 2 次元図形であるフローチャートをコーディング用言語としている。と同時に、ドキュメンテーション用のフローチャートを他の言語でコーディングする必要がない。

4. 考察と今後の計画

FL の処理系を開発し、FL によるコーディングを処理してみて、その使いどころに一応満足している。今回は、ability をほとんど FORTRAN からとったので、FORTRAN を長所、短所をそのまま持ち越しているので、このことは同時に、関数や述語を応用ごとに上手に選べることの重要性を物語っている。また、2 次元的なフローチャートをコーディング用言語とすることのメリット、最終的なドキュメンテーションを自動生成することによる省力化もじゅうぶん確かめることができた。その他、プログラムの等価性のチェックに用いることは期待外れで今後の研究を待たなければならないが、オートチャータ

の汎用性が確かめられたことは大きな成果であった。

つぎに、問題点を指摘し、その解決策を中心に今後の計画を述べる。

まず、ソフトウェア作りに計算機を利用するなら、プログラミングのための問題解析からドキュメンテーションまで一貫して計算機を利用するようにしなければ効果は少ない。これは最近云々されているTopdown Programmingとも方向を一にしている。いくつかのレベルの関数や述語を用意しておき、アルゴリズムを高いレベルの関数や述語の順序づけられた組として表わす。そして、その関数や述語の表現をだんだん近いレベルの関数や述語による表現に変換して行き、最終的には計算機が実行できるレベルまで落とせばよい。人手による変換もグラフィック・ディスプレイやCRTディスプレイを介して計算機の助けを借りながら対話形式で行なう方がよい。関数や述語を適当に選べるFLはそのための言語として最適であると考えられる。無限に広い紙面を想定し、その上にフローチャートを書く。表現のレベルが下がる(詳しくなる)にしたがって、フローチャートの1つの箱が複雑なフローチャートで置き換えられる。このような過程を繰返しながらフローチャートは成長し、計算機で直接実行できるようになる。プログラマが、グラフィック・ディスプレイを通じて、この無限に広い紙面のどの点も任意のレベルで見ることができるようグラフィック・ディスプレイを(ソフトウェアもふくめて)改良する。

コンパイラをやめてインタプリタにする。ソフトウェアの生産性を考えるとテストランによる計算機利用、人件費、開発の遅れによる損失などデバギングのための直接的、間接的な費用が占める割合は非常に大きい。デバギングを計算機でサポートするには、バッチ利用によるコンパイラではなく、会話利用によるインタプリタであることが本質的に要求される。マイクロプログラミング技術の発達によって言語指向型の計算機の試作も盛んになっているので実行速度に神経質になることもあるまい。処理系のうち、コンパイラをインタプリタに変えた実験を今後やってみたい。

オートチャータでつくられるフローチャートは通常のラインプリンタに出力

されるため見にくい。できればCOM (Computer Output Microfilm)
を使うとよい。

処理系を生成方式、もしくはパラメータ処理方式にすることも今後の課題である。関数や述語の組ごとに多くの処理系を用意することは現実には不可能である。かといって、関数や述語の組を固定したのでは意味がない。できれば、生成方式でこの問題を解決したい。

最後に、言語仕様に関する問題点とその具体的解決策についてふれておく。

第1に、フローチャートは手続き的なアルゴリズムの記述には向くが、非手続き的なアルゴリズムの記述には向かない点である。これは決定表(Decision Table)のような表を導入することによって解決する。

つぎに帰納呼出し (Recursive Call) を使えるようにする。これはコール句に文の名前と引数を書くことにし、それに応じて処理系を改良する。

共通に用いる基本関数の組を豊富にすることによって、反復記述を簡略化し、コネクタ句の個数を減らすようにする、入出力を代入句で記述できるように宣言句を工夫するなどして、FLコーディングをすっきりした、見やすいものにする。

注釈句をシステム注釈句とプログラム注釈句に分け、システム注釈句で解釈実行の指示を処理系に与えることができるようにする。

プログラムの部分的フローチャートが生成できるように注釈句でオートチャータへの指示が可能なようにする。

以上のほかにもいくつかの改良点があり、これらの考察をもとに改良型システムの設計に着手しようとしている。

5. 本研究に関する研究発表

- 1) K.Hirose and et al : Some Results in General Theory of Flowcharts, Proc. of 1st USA-Japan Computer Conference, 1972, PP. 367~371

2) K.Hirose and et al : General Theory of Flowcharts,
Comm. Math. St. Pauli, Vol. 21, No. 2, 1972, PP. 55~71

3) 門倉, 宇都宮, 廣瀬他 : Flowchart Languageについて, 昭和48年
電気学会全国大会講演論文集, 1973

4) 廣瀬, 宇都宮他 : FORTRAN 型フローチャート言語 FFL の設計と試
作, 情報処理, Vol. 14, No. 7, 1972, PP. 502~511

5) K.Hirose, K.Utsunomiya and et al : Design of FORTRAN-
Oriented Flowchart Language and its Implementation, Infor-
mation Processing in Japan, Vol. 14, 1974

6) 門倉, 宇都宮他 : 汎用マクロ言語 AML について, 第15回情報処理学
会大会講演論文集, 1974

1 1. コムトラック

(新幹線運転管理システム)

日本国有鉄道 電気局 稲田 伸一

(他 3 名)

1. まえがき

東海道メガロポリスに登場した新幹線は、この10年間に大きく成長し、本年3月10日に待望の岡山・博多間を開業した。その結果、1000キロを超える日本の大動脈が達成された。

開業時からの輸送実績の推移は爆発的な上昇をつづけ、それに伴って列車ダイヤの高密化、編成両数の16両化等の輸送力増強策をこうじてきた。

一方、旅客需要の多様化に伴い列車運転管理としての指令業務は益々弾力性、即応性を要請されることとなった。従って、従来の人手のみによる指令方式ではその要請に応えることが難しく、これらの指令業務を向上するために、ポイントの操作のような面倒な作業を自動化し、運転指令員は列車運転に関係した情報収集、判断、運転整理など指令本来の業務に専念させることを目的として、コムトラック（新幹線運転管理システム）を開発した。

まず、岡山開業に対応して昭和39年3月に第1期システムを完成し、第2期システムはその使用経験を生かし、機能の拡張、深度化をはかって本年3月に使用開始し、新幹線の運転にとって一段と重要な任務を担うことになった。

本システムの導入により、列車ダイヤが平常な場合、運転指令員が手ばなしでもコムトラックにより、各駅のポイントを正確に操作できるようになった。

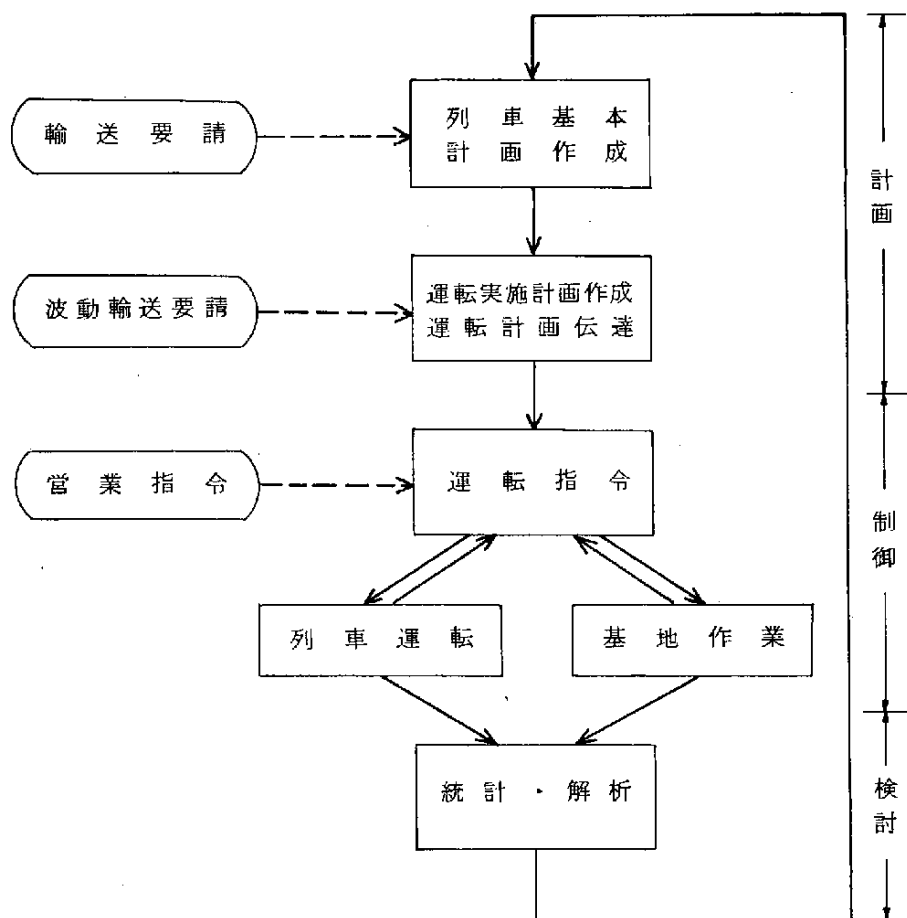
一方、列車ダイヤが異常の場合は、コンピュータが把握している各種情報を基にして、人間とコンピュータの対話により迅速且つ的確な判断と制御が出来

るようになり当初の目的が達成された。

コムトラックの特徴は、運転保安、運用（マン・マシン）の上で種々の新技術を採用しており、鉄道に応用した世界にも類を見ないコマンド・アンド・コントロール・システムと言える。

2. 列車運転の概念

列車運転は主として「計画」と「制御」の2つの機能から成り立っているが、これを概念的にサブシステムとして分解したものが図－1である。



図－1 列車運転の概念

(1) 列車基本計画

ある程度の季節変動も考慮して年間の輸送需要に対して作る計画で工場の年間生産計画にあたる。

最終的には顧客に対する商品カタログ（時刻表）を作成することになる。

(2) 運転実施計画作成，運転計画伝達

季節変動のほか，注文生産にあたる団体予約などの変更を考慮した日別の運転実施計画を作成する。

その計画内容を地理的に分散された業務機関（駅，基地等）に伝達する。

(3) 運転指令

事故や外乱等で列車運転の乱れた場合，平常ダイヤに収束すべく，修正ダイヤを作成し，この計画変更を関係する業務機関に指令する。

(4) 列車運転

運転実施計画・運転指令に従って，列車種別（ひかり・こだま）に対応した列車の進路が設定され，乗務員により定時運転（時刻表通りに出発・到着すること）が実施される。

列車制御の方法としては，この定時運転の機械化が進んだものが列車の自動運転となる。

(5) 基地作業

車両の検査・整備・小規模な修繕および乗務員に対する乗務上の各種の指示等をおこなう。

(6) 統計・解析

運転実績から，各種の統計資料を作成・分析し，次の基本計画に反映させる。

3. コムトラックの目標

コムトラックを導入する場合の最終目的は，図-1における各サブシステムを自動化することであるが，現在のところは経費，工期等の関係から「制御」のうち「列車運転」と「運転指令」を中心に開発された。これらを踏まえたコ

ムトラックの目標は以下のとおりである。

- (1) 基本ダイヤと総局報から、運転実施ダイヤを作成する。
- (2) 列車の進路を自動設定する。
- (3) ダイヤが乱れた際の監視・運転整理案の提示・ダイヤ予測などを行なうとともに運転指令員の指定した運転整理を実行する。
- (4) 列車運転実績に基づく各種の統計資料を作成する。
- (5) ダイヤの変更、車両運用の変更などの指令を関係箇所に伝達し、受領確認を行なう。
- (6) 列車の遅延時分を関係箇所に伝達する。
- (7) 旅客誘導案内情報を関係箇所に伝達する。

4. コムトラックの機能

コムトラックは、次の6つのサブシステムから構成されており、図-2にその関連を示す。

- 実施計画
- 運転整理
- 進路制御
- 情報伝達
- 旅客誘導案内
- 統計処理

各サブシステムの機能は以下の通りである。

(1) 実施計画

列車の運転に対応して、進路を制御したり、運転整理の各種の判断をコンピュータにおこなわせるために当日の列車および車両運用の計画を記憶しておく必要があり、これを実施ダイヤとよんでいる。

この実施ダイヤはダイヤ改正時に入力される基本計画と祝日、休日、季節、団体など旅客需要の変動を加味した臨時計画から数日分作成される。

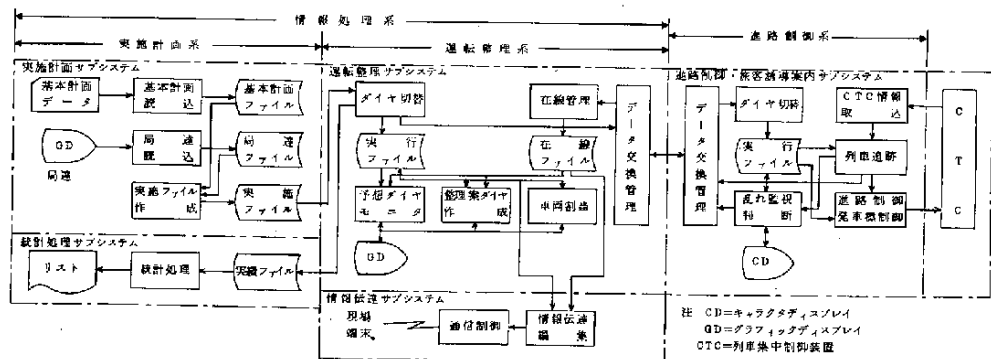


図-2 コムトラックの機能関連（ソフトウェア構成）

実施ダイヤは実施計画系のコンピュータで作成され当日の午前0時以降の列車数の少ない時間帯に運転整理系のコンピュータで読出され、読出された列車ダイヤと前日の列車で運転の終了していない列車と矛盾なく接続され、その結果の実行ダイヤが運転整理系および進路制御系のコンピュータに記憶される。

(2) 運転整理

事故、天候等で列車運転が乱れた場合、「ひかり」が「こだま」を追い越す駅を変更したり、着発線、出発順序を変更したり、場合によっては運転休止をおこなって平常な運転に復帰させる必要があり運転整理がおこなわれる。

これを大別すると

- 乱れ監視判断
- 予想ダイヤモニタ
- 整理案ダイヤ作成

に分けられる。

ア. 乱れ監視判断

これは、局所的な列車乱れを監視して、変更等をおこなう機能で、例えば「ひかり」と「こだま」の时隔から判断して追い越す駅を変更するようにC D（キャラクタディスプレイ装置）を介して指令員に知らせたり、一定時分以上遅れている列車を検知したら、指令員に警報を出したり、列車乱れが大きくならないように未然に処理する機能である。

この機能は性格上、進路制御系のコンピュータで動作させている。

イ. 予想ダイヤモニタ

乱れ監視判断機能は局所的な乱れに対する処理であるが、これらの局所的な乱れが端末駅（例えば、東京、新大阪、博多駅）に大きな影響を及ぼす場合がある。

予想ダイヤモニタはこれに対処するための機能で一定周期（約10分）ごとに数時間先までの列車運転を予想して列車運転状況とともに列車運転上の矛盾点、例えば、使用番線の競合、出発順序の逆転等をG D（グラフィックディスプレイ装置）に表示し、運転指令員に知らせる。これに対し、運転指令員は適当な運転計画の変更をコンピュータに入力することにより、列車運転を確保することになる。

ウ. 整理案ダイヤ作成

列車運転が大幅に乱れた場合、運転指令員が全て変更入力することは量的にも時間的にも大変な作業となる。このため、指令員はG Dを利用して幾つかの条件を与えることにより、数時間先までダイヤの予測をおこない、整理案ダイヤを作成することが出来る。

この整理案ダイヤは、待避変更や回送列車の着発線変更など自動的におこなう。

ただし、列車の運休や臨時列車の設定などはコンピュータの共同作業、いわゆるマン・マシンシステム的方式をとっている。

(3) 進路制御

進路制御系のコンピュータはCTC装置から列車運転上の情報、例えば列車番号、列車位置等を取込み、運転整理系から渡された実行ダイヤを参照し、列車の走行状態を管理する。

(これを列車追跡という)。

このように列車の位置を把握しておき、進路をとるべき時刻、順序等の条件がそろったとき、コンピュータは進路出力情報をCTC装置に送出する。

進路出力情報は入場進路(「ひかり」のホームにするか、「こだま」のホームにするかのポイントの切替指令)と出発進路(「ひかり」のホームから出発するか、「こだま」のホームから出発するかの指令)であり、この情報はCTC駅装置で受信され、該当進路が設定される。

(4) その他

ア. 情報伝達

運転指令員がCD、GDから入力した運転計画の変更または整理案ダイヤ作成により得た運転整理案に対する承認操作に基づく運転計画の変更に対し、その変更内容を整理して、指令文(これを指令情報という)が自動的に作成され、通信回線を経由してオンラインで関係業務機関(駅、運転所、車掌所等)に設置された端末装置(タイプライタ)に送出し印字される。

関係業務機関はこの運転計画の変更に基づき各種の手配をとることになる。

また、コンピュータが把握している列車運転状況から遅延時分(これを遅延情報という)を算出して、同様に関係業務機関に伝達して、旅客への案内に役立てている。

イ. 旅客誘導案内

駅のホームおよび改札口に設置されている旅客案内用表示装置(発車標という)にCTC装置を介して列車の順序、列車番号、発車時刻、行先、遅れ時分などを送出、表示し、旅客案内をおこなう。

同時に、この情報を利用して自動的に案内放送もおこなっている。

ウ. 統計処理

1日の列車運転が終了すると、コンピュータが記憶している運転実績から、列車実運転キロ、編成別走行キロ、列車遅延時分等の統計資料を作成して運転指令員の業務を軽減している。

5. コムトラックのシステム構成

前記の各機能をシステムとして構成する場合、各機能に要求される信頼度とともにその特殊性を十分に考慮して設計した。

進路制御サブシステムは、直接に列車の運転に関連する部分であり、いわゆるプロセスコントロールのシステムである。

継電連動装置、ATC、CTC装置などの各種の保安装置の上位に位置するとともに、コムトラックの最終段の出力部でもあり、高信頼度が要求される。

そのため、進路制御系としては3台のプロセスコントロール専用のコンピュータを設置して、常時は2重系同期運転をおこない、万一、1系が故障した場

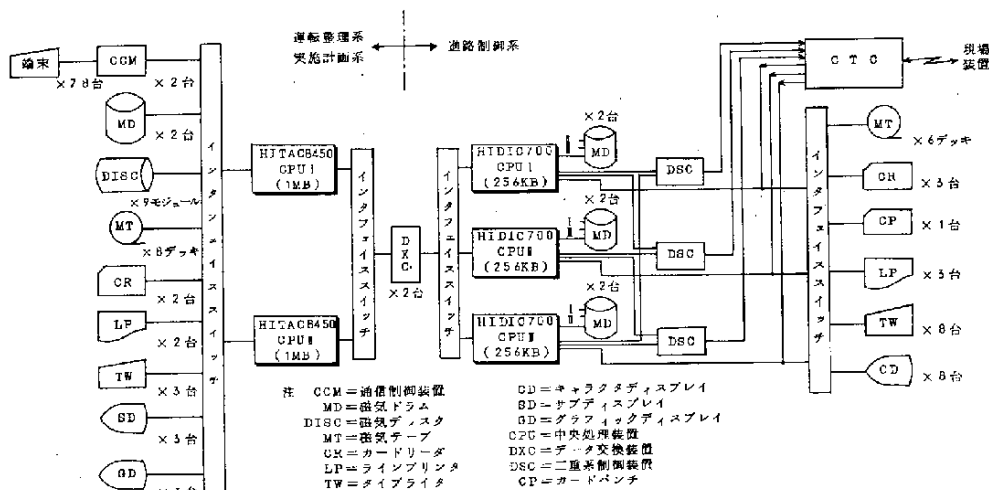


図-3 コムトラックのハードウェア構成

合は自動的に待機系のコンピュータを用いて2重系同期運転を再編成する方式を採用している。

一方、実施計画、運転整理等のサブシステムについては、進路制御系の上位に位置するもので、特定の時間の計画作業ないしは列車運転の乱れが発生した時に有効に動作する機能であり、信頼性の問題よりはむしろ、主体は運転指令員とコンピュータのマン・マシンであり、レスポンスタイムの短縮、人間工学的な見地からの操作性の向上等が必要な分野である。

その構成としては2台の大型汎用コンピュータを用いて相互予備のDuplex運転方式を採用している。

図-3に、コムトラックのハードウェア構成を示す。

6. むすび

本年3月10日の新幹線博多開業に対応して開業したシステムは約5ヶ月の実運転を経験したが、当初の予想どおり順調に稼動している。

使用開始されてからの約5ヶ月の稼動率は99.98%の実績が得られ、ほぼ設計目標値を満足している。

今後は、将来の全幹線網対応として、益々、大規模化し、かつ、線区のネットワーク化に伴い新たに生じる技術的な問題、運用上の問題に対して積極的に取りくむとともに、新幹線のもつ社会的な影響を考慮した高信頼度なシステムを開発する必要がある。

12. IBM-3270-CICSを使用した オンライン・サポートシステムの開発

久保田鉄工㈱ 電算センター

井上拓一郎 (他)

はじめに

久保田鉄工㈱は、ルート販売情報システムと呼ぶ、オンライン・リアルタイム処理システムを開発し、昭和49年4月より本格的に稼動を開始した。

このシステムは、製品の販売、及び、物流を対象とし、当社の製品種類の40%、売上高の60%(2000億円/年)をカバーするものである。

当システムの開発には、直接参加だけでも300人/月のマンパワーと、約1年6ヶ月を費した。当社は、従来、製品毎の多数のバッチ処理システムしか経験がなく、当プロジェクトを進捗させて行く上で、数々の困難を打破して推進して行かねばならなかった。

その為に、第1に、適切なハード、ソフトの選定が必要であった。

開発容易性、使用可能性等から、端末として、IBM3270 情報表示装置を用いることとし、汎用ソフトウェアパッケージとして、CICS を採用した。

第2に、これらハード、ソフト双方のツールを充分生かした、効率の良い設計、プログラム標準を確立する必要があった。

当システムは、適用業務が複雑、大規模である割合に、少数の人員と、短い開発期間で完成したが、この主因は、CICS とルート販売情報システムとの間に、「援助システム」(以下「サポートシステム」と呼ぶ)を作り介在させたことによるものである。

このサポートシステムは、設計、プログラム開発に対する標準化、汎用化の手段であると同時に、開発過程のみならず、導入後の運用、維持管理、将来の

拡張等に対する容易性、簡略性、省力化を期したものである。

本論文は、久保田鉄工ルート販売情報システムを簡単に紹介し、当システムの開発導入に不可欠であった種々の技術的工夫を集大成し、サポートシステムとして以下に詳述する。

I ルート販売情報システム

サポートシステム開発の契機となった、ルート販売情報システムの概要を、次に示す。

1. 目 的

- (1) 受注情報の即時処理による出荷手配。
- (2) シェア拡大の支援。
- (3) 受注増に対処し、しかも、増員を抑制する。
- (4) 事業部の共同利用による電算処理費の節減。

2. システムの範囲

(1) 対象業務

販売、在庫、物流と広範囲に亘る。

図1に、リアルタイムシステムの業務内容を示す。

(2) 対象製品

農業機械本体、及びその部品、ビニールパイプ、住宅機器、住宅建材。

受注出荷指示 ○ 一般受注 ○ 特殊受注 ○ 輸出部品受注 ○ 未納コントロール ○ 割当枠変更 ○ 積送品出荷指示	出荷処理 ○ 出荷計上 ○ 出倉庫変更 ○ 出荷指示取消 ○ 出荷連絡 ○ 出荷取消
積送処理 ○ 積送要求 ○ 積送品着荷報告	生産処理 ○ 生産予定変更 ○ 納品連絡 ○ 在庫移動
棚卸処理 ○ 棚卸差異分インプット	実販処理 ○ 得意先在庫報告
照会応答 顧末照会 ○ 受付店による顧末照会 ○ 出荷連絡店による顧末照会 ○ 未指示明細照会 ○ 品番別倉庫別在庫照会 ○ 倉庫別品番別在庫照会 ○ 売上在庫照会 ○ 生産予定状況照会 ○ 割当枠予実照会 ○ 輸出部品受注顧末照会 マスター照会／メンテナンス ○ 得意先マスター ○ 納所マスター ○ 品番インデックス ○ 部品マスター ○ 価格マスター 実績照会 ○ 営業所別出荷実績照会 ○ 営業所機種別出荷実績照会 ○ 機種別出荷実績照会 ○ 府県別出荷実績照会 ○ 府県機種別出荷実績照会 ○ 得意先別出荷実績照会 ○ 得意先機種別出荷実績照会 ○ 割当充足度一覧 ○ 倉庫引当順位変更 ○ 元請業者マスター	

図1. ルート販売情報システムの業務内容

3. システムの手段と規模

図2にシステムの手段と規模を示す。又図3に、回線網を示す。

コントロール・プログラム	IBMプログラム・プロダクト CICS OSMFT
CPU及びDASD	IBM S/370 M158 3330 10スピンドル
端末装置及び設置台数	IBM 3270 情報表示システム 131台
回線	BSC 1200BPS 20回線
端末設置場所	37ヶ所
データ量(トランザクション数)	30,000件/日
ファイル数	35コ
タスク数	131コ
画面数	140コ
リアルプログラム本数	300本(ASM 60,000ステップ)
バッチプログラム本数	500本(PL/1 90,000ステップ)

図2. ルート販売情報システムの手段と規模

端末設置場所：37ヶ所
 端末台数：計131台
 通信回線：BSC 1,200 BPS 20回線

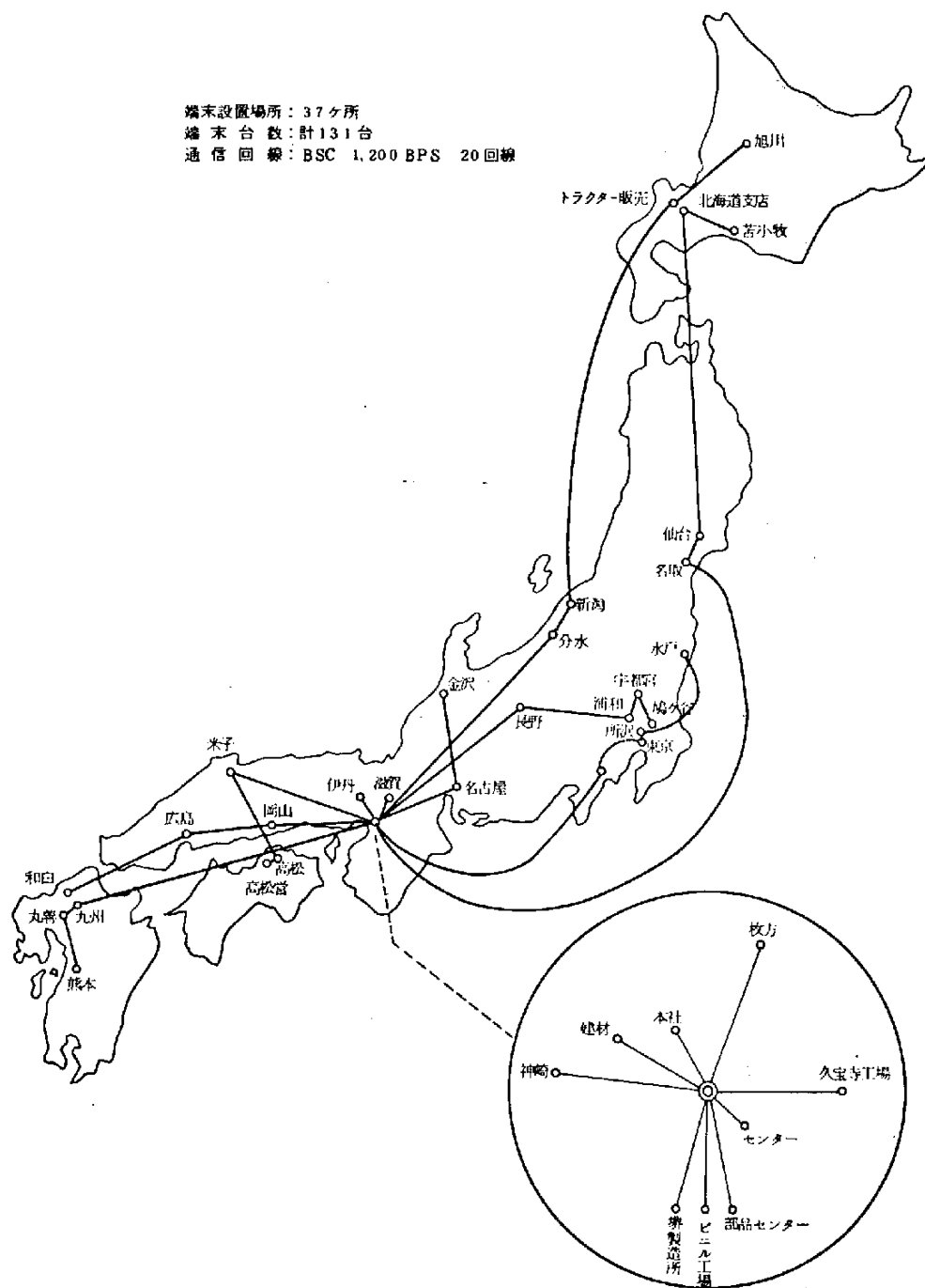


図3 回線ネットワーク

4. 開発期間と工数

図4に示す。

基 本 構 想	S.46.12~S.47.10 (11ヶ月) 3 ~ 4 名
プロジェクトチーム	S.47.11~S.49.4 (18ヶ月) 300人/月

図4. ルート販売情報システムの開発期間と工数

5. 効 果

- (1) 省力効果。
- (2) 即納率の向上。
- (3) 販売戦略のツール。

6. システムの特徴

- (1) 各製品事業部の枠を越えた、統合システムである。
- (2) 販売業務の殆んど全てを、完全リアルタイム処理でカバーしている。
- (3) ディスプレイ端末による、完全会話型処理である。

II サポートシステムの目的

1. サポートシステムの目的

前述したルート販売情報システムを開発して行く為に、解決すべき課題として、図5に示す項目があげられた。

1. システム設計の進め方。
2. オペレーションは、どのように進めて行くべきか。
3. 3270 の機能を生かす画面の使い方、設計の仕方は。
4. 3270 のファンクションキーの利用法とアプリケーションプログラムの関連。
5. CICSと3270 の関連づけ。
6. プログラムの作成はどのように標準化し、進めたらよいか。
7. テストはいかに行うか。
8. メインテナンスのしやすいシステムは、どうすれば出来るか。

図5. アプリケーションシステム開発の為の課題

一般的に、システムの設計からプログラム開発までは、図6の開発手順に示すように、5つの工程をふむことになる。これらの作業は、特に大きなシステム開発において、より効率の高いことが要求され、作業分担の必要が生じる。従って、その結果、情報の一元化、及び各作業の管理はより困難となり、同図の必要条件に示すような項目によって解決を図って行かねばならない。この為には、設計自体の標準化、汎用プログラム、あるいは、マクロ等の開発が大きな助けとなるが、それだけでは、あくまでも設計やプログラムテクニック上の断片的問題解決にすぎない。

そこで、前記の課題を、開発手順の中に組み込み、体系的に解決することをねらって開発したシステムが、サポートシステムである。

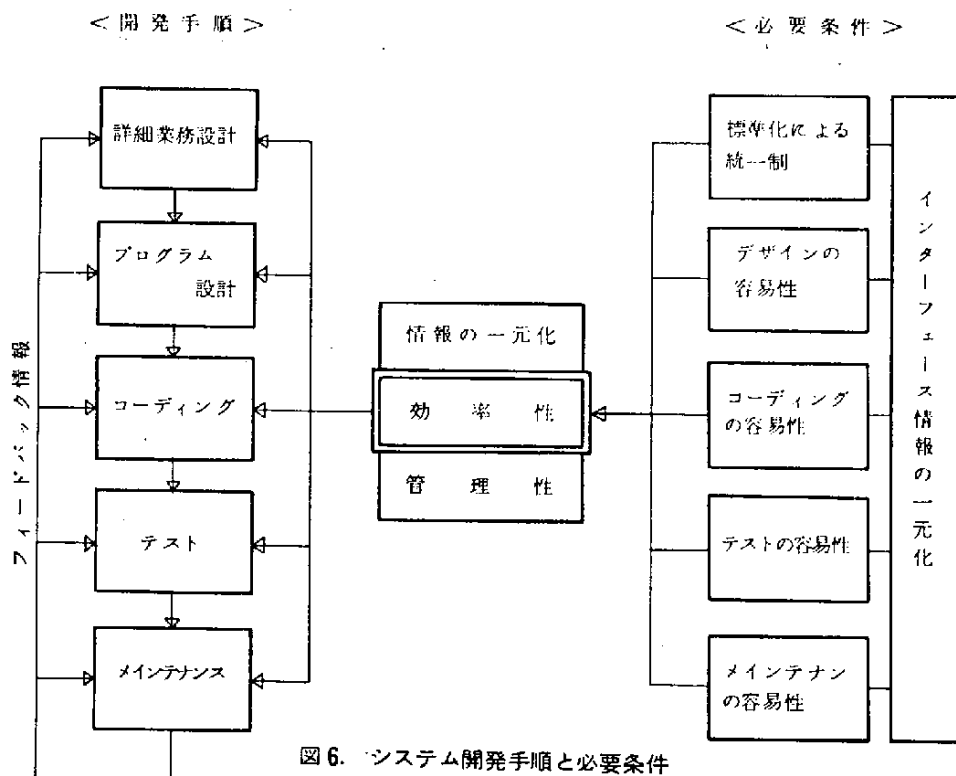


図6. システム開発手順と必要条件

図7は、システム開発に対する従来のアプローチと、サポートシステムのアプローチを、対比させて示したものである。

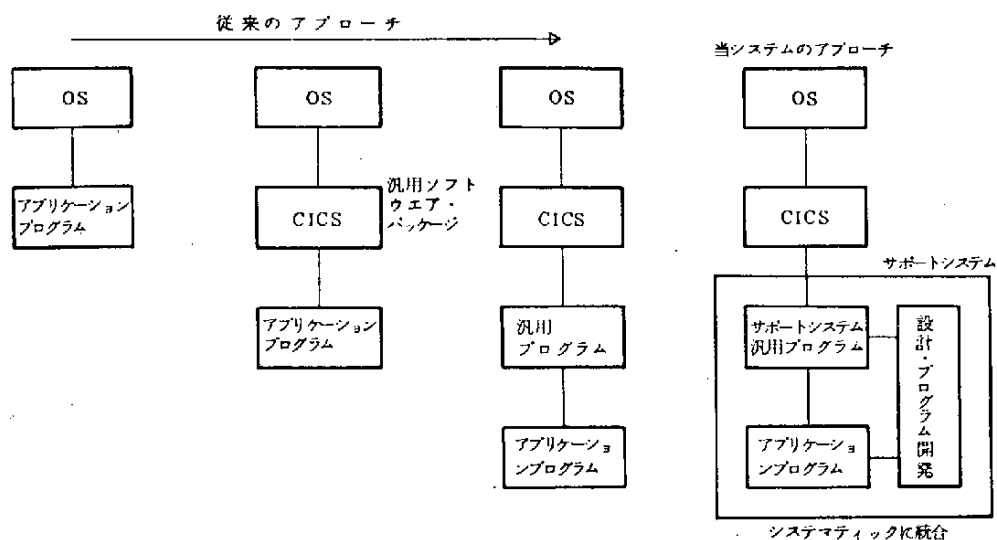


図7. システム開発における従来のアプローチと当サポートシステムのアプローチの対比

2. サポートシステムの構成

図8は、当サポートシステムの構成要素を示したものである。この図に示すように、オンラインシステムの、システム開発から運用にいたる一連の業務に亘って、援助を行うものである。これらは、

- (1) 設計標準。
- (2) プログラム開発及びテストツール。
- (3) 汎用コントロールプログラム。
- (4) オペレーション標準。
- (5) サポートバッチ。

の、5つに大別される。

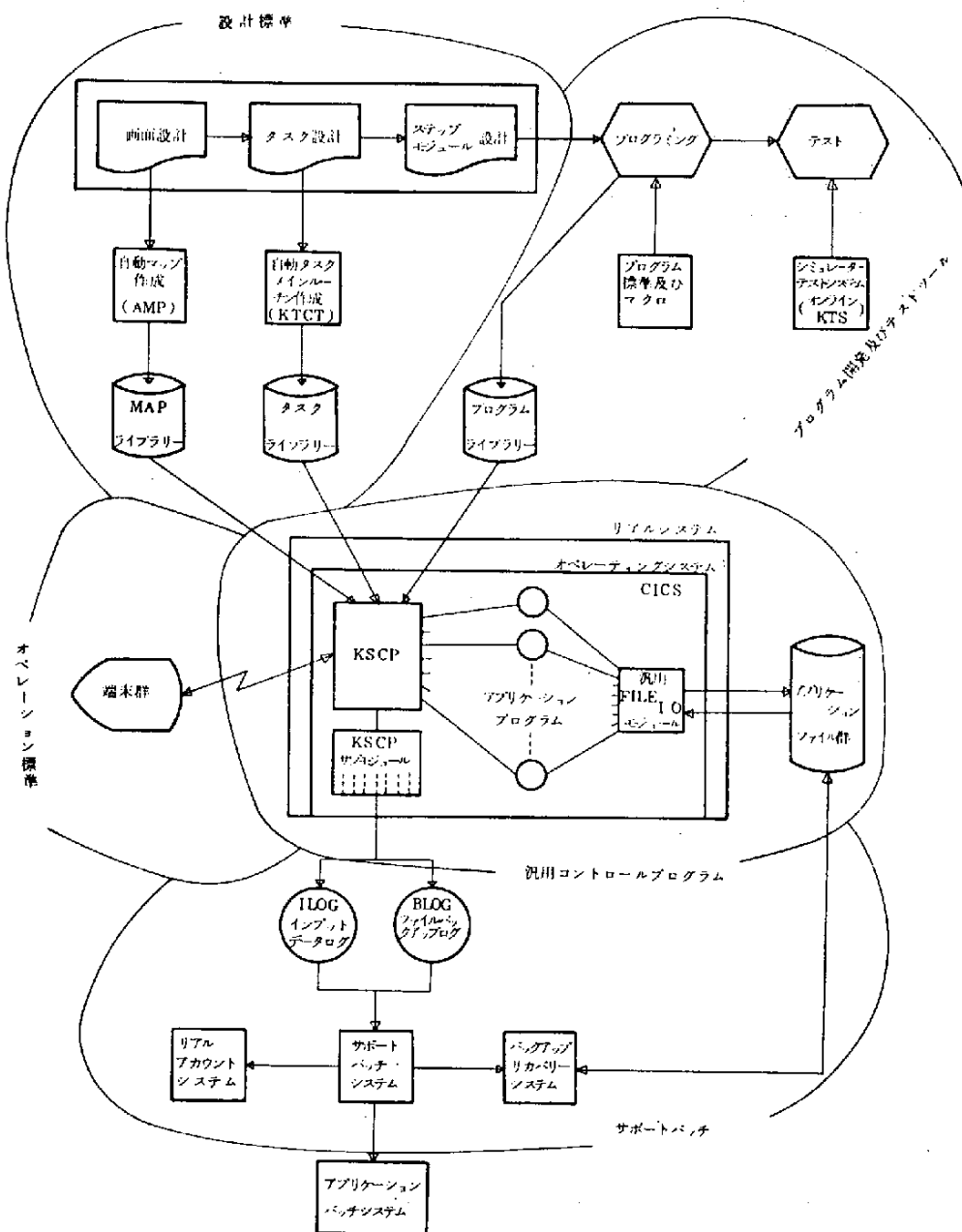


図 8. サポートシステムの構成

3. サポートシステムの機能と特徴

サポートシステムを設計を中心として展開すると、図9のようになる。このように、設計作業がシステマティックに進められると同時に、設計の各段階において、

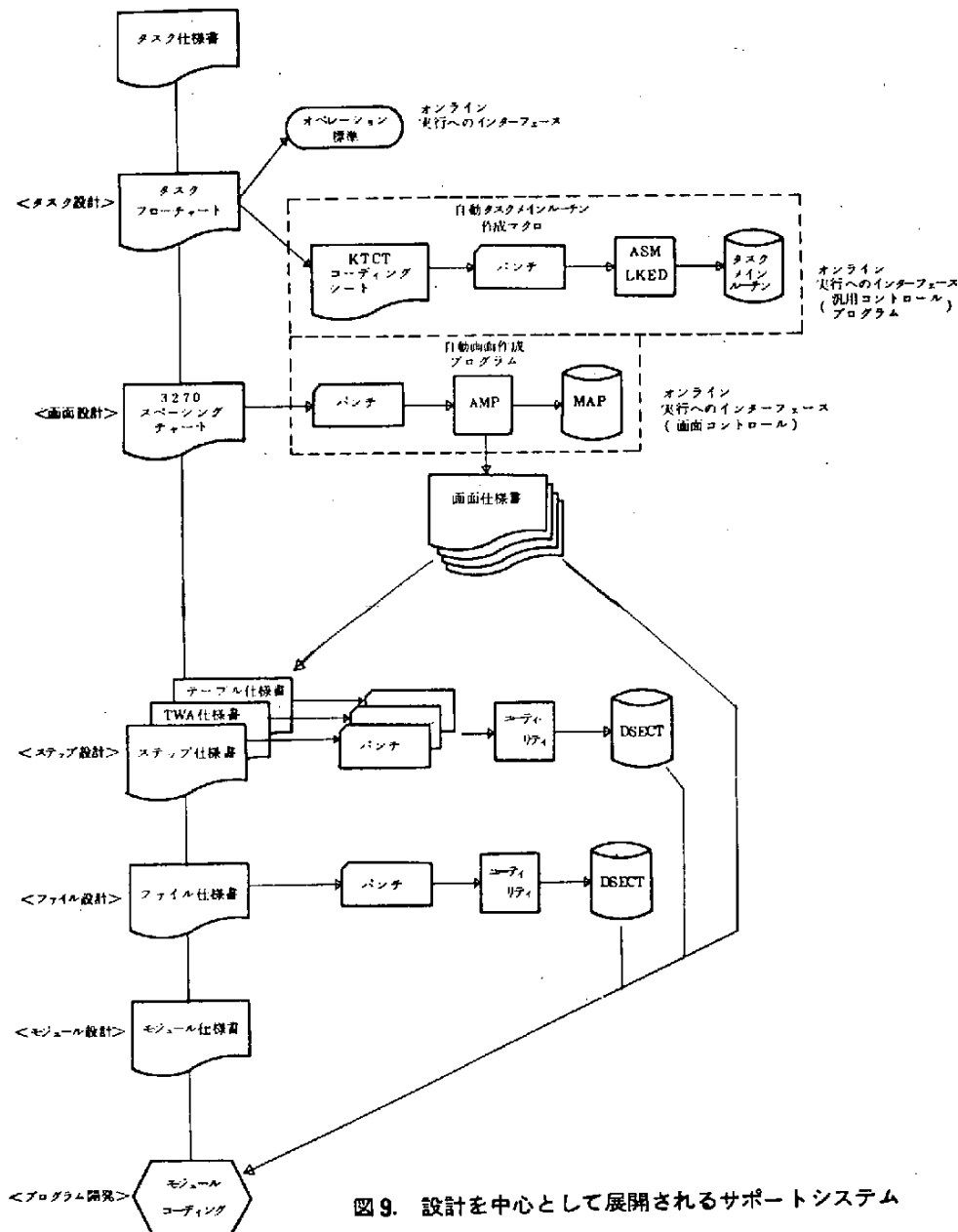


図9. 設計を中心として展開されるサポートシステム

- (1) タスク設計と、オンライン実行（オペレーション標準、汎用コントロールプログラム）間のインターフェース。
- (2) 画面設計と、自動画面作成プログラム、及びオンライン実行間インターフェース。
- (3) ステップ設計、ファイル設計、モジュール設計と、プログラム開発間インターフェース。

等が、自動的に確立されるようにした。

換言すれば、当サポートシステムでは、図8の5つの構成要素が設計標準の基に、システムティックに統合されており、この設計標準に従えば、他の全ての作業までが、自動化、標準化されるようになっている。

Ⅱ サポートシステム構成要素の詳細

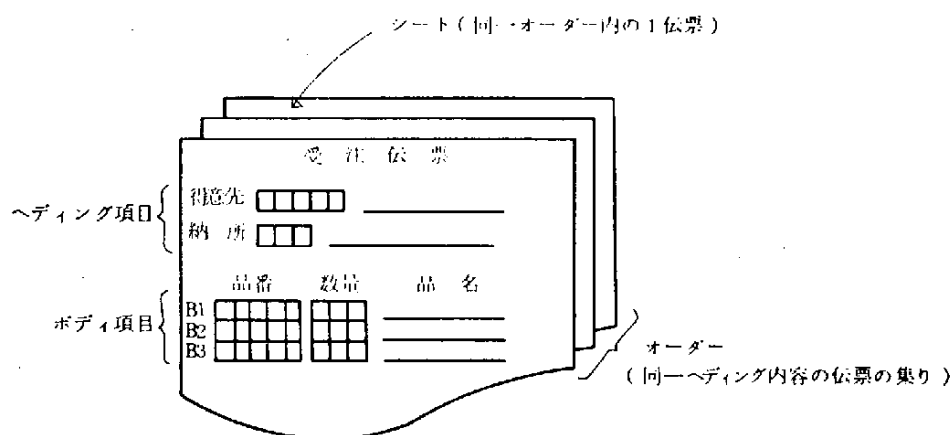
以下、サポートシステムのそれぞれの機能について、当社の代表的業務である。受注伝票処理を例にとって、設計の各段階を中心に、順次説明する。

1. 受注業務とその特徴

図10に示す例のように、当社の受注伝票は、一品一葉ではなく、同一得意先に対して、伝票（シート）が一枚で収まらず何枚にも続く場合がある。その為に、シート毎の処理は許されず一つのオーダーとしての処理が必要となる。この時のオペレーションを考えた場合、各シート毎にヘッド項目を入力する事は効率上好ましくない。

したがって、図11に示すように、一度ヘッド項目を入力すると、次のオーダーまで入力する事なく、各シートの処理が可能のようにしなければならない。

図12は、このような受注伝票処理の流れを、ディスプレイ端末の操作から表現したものである。



注：これ以降に続く各例は、全てこの伝票処理を中心に説明する。

図10. 受注伝票の例

Ⅳ お わ り に

以上、設計からプログラム開発、オンライン実行にわたり、サポートシステムを中心となる項目について詳述した。

バックアップリカバリーシステム等、サポートパッチシステムについては割愛したが、最後に、その他のトピックスについて簡単に述べる。

1. 開発スケジュール

図11に示すように、サポートシステムは、約15ヶ月をかけ立案開発した。この間、アプリケーションシステムの開発に対し、たえず先行して進める反面、アプリケーション面からのフィードバックを織込みながら、各種修正、効率向上をはかってきた。これらの変更作業は、サポートシステムの汎用性の故に楽に対処できた。

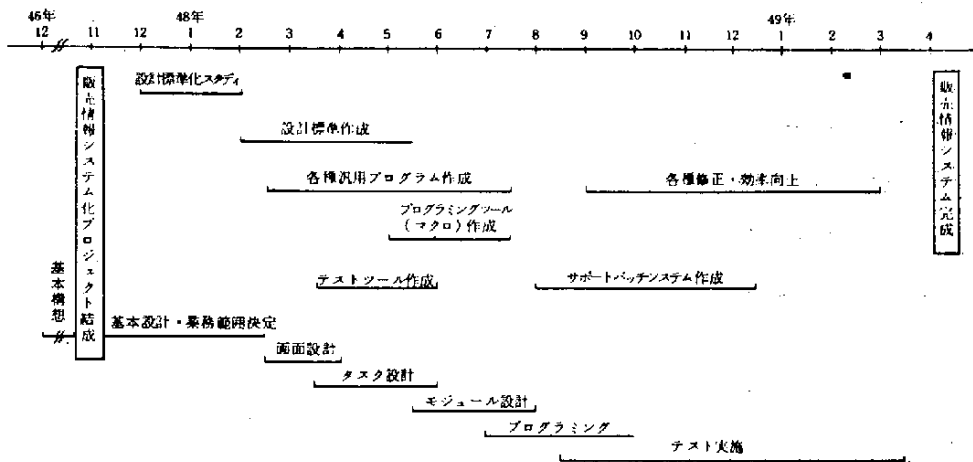


図 11. サポートシステム開発経過

2. 開発工数と効果

図 12 に示すように、当サポートシステムは、8500 ステップ（システム全体から見て約 12%）の規模となった。

このサポートシステムの開発工数が、従来一般的にいわれてる、10 ステップ／人／日と同様の工数になった事は、当然といえる。しかし、これによって、ルート販売情報システムが、2 分の 1（20 ステップ）の工数で開発出来た事で、大きな省力効果が得られた。

又、設計の容易性、開発作業及び管理の一貫性等により、ユーザー部門で設計が行え、かつプログラム外注が可能となった等の、効果も得られた。

開発工業

サポートシステム	サポートシステムプログラム総ステップ数	1人1日当りのステップ数
	8,500	
販売情報システム	開発工数	10 ステップ
	850人・日	
ル ー ト	リアルタイム部分プログラム総ステップ数	1人1日当りのステップ数
	60,000	
販売情報システム	開発工数	20 ステップ
	3,000人・日	

効 果

1. 省 力 化
2. 拡 張 性
3. 標準化による統一性
4. システム開発の管理性，容易性，簡略性
5. 維持管理の容易性

図12 開発工数と効果

3. パフォーマンス

オンラインシステムのパフォーマンスにおいて，タスクライフは，大きな要因となるが，当サポートシステムは，タスクの，ロールイン／ロールアウトを汎用的に行うなど，種々のパフォーマンス改善に寄与している。しかし，さらにターンアラウンドタイムという面での改善を，現在進めており，特に回線のスピードアップを中心に検討中である。この状況を図13に示す。

現在、ルート販売情報システムは、成功裡に稼働している。又、当社ではさらに、当サポートシステムをそのまま利用して、他のシステム開発が進んでいる。

ふりかえってみるに、全般的プロジェクト進捗に先行して、技術的課題の設定と、その解決を図ることが、いかに重要なことであるかを痛感した。当サポートシステムは、まだまだ不備な面はあったと考えるが、久保田鉄工ルート販売情報システムの開発を進める上で、サポートシステムの果たした役割は、十分なものがあったと考える。

本論文で紹介した、サポートシステムの開発の考え方なり、進め方、具体的内容について、今後の参考になれば幸いである。

Japan Computer Usage Development Institute

財団法人 日本情報開発協会

東京都千代田区霞ヶ関3丁目2-5 霞ヶ関ビル30階 TEL 581-6401(代)