遺伝的アルゴリズムを用いた石炭分子構造の構築

学生員 井 林 真 吾 (大阪大学)

正 員 大 川 剛 直 (大阪大学)

正 員 薦 田 憲 久 (大阪大学)

Construction of Coal Molecular Structure by Genetic Algorithm

Shingo Ibayashi, Student Member, Takenao Ohkawa, Member, Norihisa Komoda, Member (Osaka University)

It is recognized that elucidation of chemical structure at molecular level is important to develop new application of coal. As a result of various experiments, it has been clarified that the coal molecular consists of the following three components, the aromatic class cluster, the bridge connecting the aromatic class cluster, and the end permutation radical. Chemists have to construct these components by hand, utilizing their empirical knowledge. It is desired to support this time consuming work with computers.

The molecular structure of coal is not specified with a unique structure. In addition, the constructed structure is evaluated from various viewpoints, such as density and potential energy. Therefore, the deterministic approach is inappropriate to the estimation of the molecular structure.

In this paper, we propose a method of constructing the molecular structure using the genetic algorithm (GA). In this method, the chromosomes are expressed in the form of graphs. At the crossover operation, partial graph of one parent is kept and the nodes in the rest graph inherit connectivity of nodes from the other parent. The evaluation function is determined based on the heuristics of chemists as 'the density of the coal molecular is uniform averagely'.

As a result of some experiments with structures constructed from real coal data, the following properties of our method were clarified: (1) improvement of the evaluation value was observed with the progress of the generation, (2) the coal models constructed by GA had good value of potential energy in comparison with the structure constructed by coal chemists.

キーワード：石炭化学, 分子構造, 遺伝的アルゴリズム, グラフ表現, ポテンシャルエネルギー

1. はじめに

近年、石炭の新しい利用法の開発が石炭化学の分野において試みられており、そのためには石炭構造を分子レベルで把握することが重要であると認識されている⁽¹⁾。これまでに、様々な化学的実験や専門家の経験的知識により石炭分子を構成している部分構造が芳香族クラスター構造と、それを繋ぐ架橋構造、ならびに末端置換基から成ることが知られている。専門家は経験的知識を活用しながら分子模型や図面などを用いて手作業でこれらを組み立てていき、全体としての石炭分子構造モデルを構築している^{(2)・(7)}が、1つの石炭分子構造モデルを構築するのに多大な労力と多くの時間が必要になるため計算機による構築支援⁽⁸⁾が望まれている。

従来から、計算機を用いて分子構造を推定する研究は行

われてきたが^{(9)・(10)}、それらをもとに、石炭のような複雑な巨大分子に直接適用することは、計算に膨大な時間がかかり、また、構造の推定に必要な十分な情報が得られないため現実的に不可能である。

石炭分子は同じ炭種であってもサンプルの部位によりその組成や分子構造が異なるため唯一の分子構造が定まらない。また専門家にも具体的な全体の構造に関する知識はなく、部分構造の接続に関する局所的な知識もほとんど得られていない。そのため、構造を推定するのではなく、むしろ実験から得られたデータを元に石炭分子がどのような部分構造から構成されているのかを予測し、それらをつなぎあわせることで平均的な妥当な構造をモデルとして構築していくことが必要となる。これまでに、巨大分子を対象に、グラフ理論を用いてその構造異性体を列挙し、その中からランダムにサンプルを選ぶことで、構造を求める手法はい

くつか見られるが⁽¹⁷⁾ ⁽¹⁹⁾、それらは、網羅的かつ決定論的に構造を列挙することに主眼がおかれており、妥当な構造の探索については扱われていない。

石炭の性質及び具体的知識の不足から、決定論的な手法で正しい構造を予測するというアプローチは現時点においては事実上不可能であり、むしろ、石炭分子としてもっともらしい代表的な構造のみを短時間で何種類も提示できることが構築支援にとって重要である。このため、何らかの統計的手法が必要となる。

そこで、本論文では統計的なアルゴリズムであり、多くの組合せから比較的妥当なものを選択する能力に優れ、専門家の具体的知識があまりなくても全体構造を構成できる遺伝的アルゴリズム (GA)⁽²⁰⁾ ⁽²²⁾ を用いてエネルギー的に安定な石炭分子構造を短時間で構築することを試みる。

統計的なアルゴリズムとしては GA 以外にもローカルサーチ法やシミュレーテッド・アニーリング法が考えられる。しかし、石炭分子モデルの特徴として、モデルそのものが更に大きな分子構造の代表的な一部であることから、モデル内の部分が良い部分モデルであれば、モデル全体も良くなるという特性がある。このため、暫定的なモデルから、部分を保存しながらその近傍を探索する手法より、複数のモデルをもとに、両者の良い部分を継承して組み合わせながら探索する GA がより効果的であると期待できる。

GA で石炭分子構造を構築するためには、いかにして構造を遺伝子として表現するか、およびどのような評価値を採用するかが問題となる。すなわち、一般に GA で用いられている遺伝子は直線構造をしており、石炭分子のように枝分かれした構造の表現を直線的に表すことは困難である。また、一般的に構築された石炭分子はポテンシャルエネルギーなどの物性値により評価されるが、石炭のような巨大分子を対象としてポテンシャルエネルギーを計算するには膨大な時間を必要とし、多数の個体に対して反復計算を必要とする GA の評価値としてそのまま用いることは不可能である。

そこで前者に対しては、ネットワーク構造の遺伝子を想定し、親のネットワーク構造の部分構造を子に適切に反映させる交叉手法を考案することによって対処する。また、後者に関しては、ポテンシャルエネルギー的に安定な構造を作成する際に専門家が用いているノウハウを定式化し、分子量の均一性といった比較的計算が容易な尺度を導入することで、短時間での構築を実現する。

2. 石炭分子構造の推定

石炭の構造は有機・無機部分からなる複雑な固体混合物で、その有機部分は芳香族が複雑に結合しあった不規則なアモルファス構造をしている。そのため、X 線回折などによる構造分析からもその構造は知ることができず、有機溶媒にもあまりとけないためその分子構造は最近までよくわからなかったが、近年 NMR 法などの構造分析法⁽²³⁾ の発展、石炭分子を溶解する溶媒の開発によって一部ではある

図1 石炭分子のフラグメントセット

Fig. 1. Fragment set in coal molecule.

が、その化学構造の考え方や基本構造が明らかになりつつある⁽²⁾。

現在石炭分子構造に対する考え方として、

「石炭分子は芳香環、架橋結合、末端置換基などの部分構造 (フラグメント) から構成されており、それらが互いに結合することによって一つの石炭分子構造を構成している。石炭は、この基本構造が複雑に無限に寄り集まった巨大分子である」

ということが石炭化学者にとって一般的である⁽³⁾。本論文でもこの考え方に基づき石炭分子構造モデルを考える。

石炭を構成する部分構造の例として、専門家があるサンプルに対して化学的分析から導出した芳香族クラスター構造、架橋構造、末端置換基のデータを図1に示す。

専門家はこれらの石炭の部分構造であるフラグメントを架橋構造で接続して全体の石炭分子構造モデルを構築しているが、その際石炭分子モデルは全体として密度が均一になる、またフラグメントの大きさのバランスがとれるようにするなどの経験的な知識をもとに組み立てていく。また芳香族クラスター構造の接続箇所などといった知見がほとんど得られていない構築プロセスにおいてはランダムに構築を行っている。

3. GA を用いた石炭分子構造構築

〈3・1〉 GA の石炭分子構造構築への適用 図1に示されるフラグメントセットの各要素を必ず1回づつ使って1つの分子モデルを組み立てる際の問題点として、専門家にも具体的な分子全体の構造に関する知識はなく、部分構造の接続に関する局所的な知識もほとんど得られていない

ので、可能な芳香族クラスタ構造の組合せが膨大になることが挙げられる。専門家は構築の際に自らの経験的知識と直感により絞り込むことでこの組合せ爆発を回避しているが、1つの構造を構築するのに2、3ヶ月といった時間を要しており、多数の構造を比較検討するには至っていない。一方で、石炭の分子構造は唯一に定まるわけではなく、統計的にいくつかの代表的な構造を構築する必要がある。すなわち、石炭分子モデルの一般的评价の一つにポテンシャルエネルギーが挙げられるが、このポテンシャルエネルギーが低い安定な構造を短時間で複数個生成することが重要である。

そこで、多くの組合せからの選択性に優れ、かつランダムな要素を含んだ遺伝的アルゴリズムを用いて構造構築を実現する。

(3・2) 石炭分子のコーディング GA においてコーディング手法は様々あるが、分子構造に対してコーディングを行うといった試みはあまりないようである。文献⁽²⁴⁾は分子構造を扱うものであるが、分子構造構築としての目的ではなく、原子一つ一つを扱うため、複雑になり大きい分子構造を扱えない。また、石炭分子は直線構造ではないため、文献⁽²⁵⁾で扱われているペプチド鎖のような接続関係を限定できる構造で用いられたコーディング手法は流用できない。一方で、専門家が石炭分子を構築する際にも、架橋構造と末端置換基に関してはランダムに接続していることから、これらの情報はコードから除くことができ、どの芳香族クラスタがどの芳香族クラスタと繋がっているのかという情報のみを考慮すればよい。そこでここでは、図1のように各芳香族クラスタに番号をつけ区別することで、図2のようなグラフ表現をし、このグラフ表現をそのまま染色体として使用する。同じ芳香族クラスタ構造には同じID番号を与え同等に扱うこととする。またコーディングされる石炭分子構造に以下の2つの前提条件を与える。グラフ表現によりこれらの前提条件を満たす構造はすべて表されることになる。

- (1) 分子構造はループを含まない
- (2) 一つのクラスタに対して接続される枝の数は最大4個とする

これらの前提条件は専門家が構造を構築する際に、一つのクラスタに多数のクラスタを接続することがないこと、小さなループを作る構造を考えないことなどを反映したものである。

(3・3) 交叉手法 グラフ表現されたコードに対して他の遺伝的プログラミングでみられるような単純な部分グラフの入れ替えという交叉手法ではグラフ中に同じクラスタが2つ現われたり、あるクラスタが不足するなど、与えられた石炭分子セットに一致しない個体が数多く現われる。このような個体はいわゆる致死遺伝子であり、進化に寄与しないばかりでなく、その発生自体が実行時間を増やす結果になるため発生を抑える必要がある。そこで、その問題解決のために新たな交叉法として次のような交叉手法を提

図2 分子構造のグラフ表現

Fig. 2. Graph expression for the chromosome.

図3 交叉例

Fig. 3. An example of crossover.

案する。この手法に基づいた交叉例を図3に示す。

- (1) 二つの親のある接続ポイントを一箇所ランダムに切り二つの構造に分離し、その内の大きい方の部分グラフを保存する。
 - (2) 保存された構造に接続されていない芳香族クラスタ構造を、他方の親においてそれらの芳香族クラスタ構造がどの芳香族クラスタ構造と接続していたのかを参照する。
 - (3) このときある芳香族クラスタは複数の接続の可能性が生じるため、全ての接続関係を候補として生成する。
 - (4) 全ての芳香族クラスタ構造が接続されるまで(2)(3)の作業を繰り返す。
 - (5) 得られた複数の解の中で最も評価値のよい構造を次世代に残す。
- (5) で一つの親から一つの子に限定しているのは、ある評価値の良い構造と類似した構造が集団の中に広まるのを回避し、個体群の多様性を維持するためである。

全体的子を生成するプロセスにおける計算量は最悪ノード数 N の指数オーダーになるが、ノードからの手の数が制限されていることと、保存する部分構造の大きさを半分以上にすることにより、実用的な時間で十分計算可能である。

〈3・4〉 突然変異 突然変異は遺伝子を強制的に変化させることによって交叉だけでは生成できない子を生成し、個体群の多様性を維持する働きをする。具体的にはある個体のグラフのノードを2つランダムに決定し、その2つのノードを入れ換えることにより突然変異とする。ノードの接続関係が変化することにより新しい接続関係を持った子が発生し、個体群の多様性を維持する働きを期待する。

〈3・5〉 評価関数 一般に石炭分子の構造は空間エネルギーや密度などの物性値を尺度として評価されるが、GAに用いられる評価関数は(個体群サイズ×反復世代数)回適用されるため、これらの値は計算に時間がかかり個体の評価の基準として直接使うことは困難である。そこで、専門家の知識を定式化した評価関数を考える。

専門家は経験的にエネルギーが低い安定した構造を得るために以下で述べることを考慮している。

- 石炭分子は全体として密度が均一となるように構築する
- 大きい部分構造と小さい部分構造がある程度分散して繋がるようにする
- 石炭分子は小さなループをつくらない

ここで、専門家の考える「大きい部分構造」とは、環の多い芳香族クラスター構造を指している。

この知識を反映した評価関数 $f(x)$ を以下に定義する。

$$f(x) = \sum_{i \in N} |w_T - w_i|$$

N : ノードの集合

w_T : 分子全体に対する1フラグメントあたりの平均分子量

w_i : i の近傍ノードにおける1フラグメントあたりの平均分子量

ここで近傍ノードとはノード i とそのノードに隣接するノードの集合である。

この評価関数 $f(x)$ は図4のように、分子全体に対する1フラグメントあたりの平均分子量と部分的な1フラグメントあたりの平均分子量との差をとることで、1フラグメントの均一なモデルからのずれを考え、その総和によって全体的な分子量の偏りを導いている。こうすることで、専門家が構築の際に全体として構造が均一となるように構築するという知識と大きい部分構造と小さい部分構造がある程度分散して繋がるようにするという知識を反映している。したがって、評価関数 $f(x)$ は小さい程、石炭分子として妥当な全体構造が均一な構造が構築されることになる。

〈3・6〉 デコード化 最終的に得られた構造は石炭分子モデルとして構築されなければならない。本手法では専門家が構築する際にもフラグメントの接続箇所はランダム

図4 分子量に注目した評価値

Fig.4. Evaluation based on molecular weight.

に決定しているという理由からコードに接続箇所の情報を含めなかったため、接続箇所ならびにどの架橋構造で接続するかをランダムに決定し石炭分子モデルを構築した。石炭分子モデルを表現するファイル形式は他の分子化学ソフトウェアでも用いられ、3次元表示が可能なALC形式にした。ALCファイルとして出力することで構築した構造を既存ツールを用いて専門家に提示することが可能である。

4. 石炭の実データに基づく構造構築とその評価

3章に基づいた手法により専門家によって提示された図1の赤平炭のデータセットを用いて次の3つの実験を行った。このとき、選択手法として比較的操作が簡単な2つの個体の評価値の高い個体を保存し、集団数が選ばれるまで繰り返すトーナメント方式を用いた。

また、以下の全ての実験に際して計算機はSilicon Graphics Indigo2(CPU:200MHz,Memory:192MB)を用いた。

〈4・1〉 突然変異率に関する実験 これは、パラメータの一つである突然変異率と最終的に得られた個体の評価値との関係を調べる実験である。突然変異は交叉だけでは作れないような構造を生成する重要な操作であり、個体群の多様性を維持するために必要である。その確率は小さいと多様性が失われ類似した個体が集団に広がる結果を生み、大きすぎると親の形質を遺伝した構造が失われることになり、ランダムサーチに近くなり有効な探索が不可能になる。本実験では、解探索に効果的な突然変異率を求めることを目的とする。

異なる乱数の種を用いて、100、200、300、500、1000の各個体数に対して十分最適解が得られたと思われる300世代までの5回の試行を行い、各確率から得られた評価値の平均値を結果として図5に表している。この結果、突然変異率と最終的に得られる個体の評価値は滑らかな曲線で表されるグラフになる。このグラフから突然変異率は35%が妥当である。

〈4・2〉 個体数に関する実験 もう一つのパラメータである個体数に関する実験である。個体数は実行の段階で入力できるようにしているが、個体数が大きすぎると実行時

表 1 評価値と個体数の関係

Table 1. Relationship between evaluation value and population

個体数	100	200	300	400	500	1000
平均評価値	56.51	46.67	45.50	45.23	44.40	42.37
最適評価値	47.32	39.58	38.31	38.30	38.20	38.01
実行時間	1分00秒	1分40秒	2分28秒	4分32秒	7分30秒	10分04秒

図 5 評価値と突然変異の関係

Fig. 5. Relationship between evaluation value and mutation probability.

間が格段に長くなり短時間で石炭分子モデルを構築するという目的を果たせなくなる。また少ないと初期個体群を生成した時に評価値が良い構造と類似した構造が集団に広まることになる。突然変異率を実験1で決定した35%として、同じ乱数の種を用い個体数を100、200、300、500、1000にしたときの5回の試行の平均評価値とそのときの最も良い値である最適評価値と平均実行時間を結果として表1に示す。

個体数が大きい程多くの組合せ空間を探索でき、最終的に得られた構造の平均評価値も良いという当然の結果であるが、その中の最適評価値に注目してみると300個体からはほとんど変化せず、計算時間も考慮すると個体群は300程度が妥当であると思われる。

以上2つの実験から決定された突然変異率35%個体群300個体としたときの実行の過程での評価値の遷移のグラフを図6に示す。

〈4・3〉 評価値とエネルギーの相関性に関する実験 専門家の知識を定式化した評価値がポテンシャルエネルギー値を適切に反映しているかどうかを確認するとともに、最終的に得られた構造の妥当性を調査するため、両者の相関性を調べる以下の2つの実験を行った。

〈4・3・1〉 実験1 突然変異率35%、初期個体数300個体で実行し、ある1回の試行の過程である評価値を越えた時点での世代の中で最もよい評価値を持つ個体を4個取り出した。

取り出した個体を、ポテンシャルエネルギーなどの分子力学計算が可能な分子化学ソフトウェアであるChem3Dを使用して3次元の石炭分子構造モデルを構築し、エネルギー

図 6 収束課程

Fig. 6. The process of convergence.

表 2 評価値とエネルギーの関係

Table 2. Relationship between evaluation value and steric energy.

モデル	評価値	世代	エネルギー (kcal/mol)
GA により構築された構造	38.0	169	-129.6
	88.8	11	-123.0
	147.8	4	-117.7
	228.3	1	-106.3

表 3 生成された最適構造と専門家の構造とのエネルギー比較

Table 3. Comparison between solutions with structure constructed by coal chemists.

モデル	評価値	世代	エネルギー (kcal/mol)
GA により構築された構造	38.0	169	-129.6
	38.8	178	-128.6
	39.6	159	-128.6
	40.1	174	-127.9
	42.9	156	-127.4
専門家が作った構造	—	—	-130.7

最小化を行った。その1回の構築結果を表2に示す。

この実験から実行の課程で評価値が良くなるにつれてエネルギーが安定な石炭分子モデルとして妥当な構造が得られていくことが確認された。

〈4・3・2〉 実験2 突然変異率35%、初期個体数300個体で乱数の種を変えて数回の実行を行い、最終的に得られた最適解をChem3Dを使用して、それぞれの解について1つの3次元の石炭分子構造モデルを構築した。その結果と専門家が手作業で構築した構造をChem3Dでエネルギー計算した結果を表3に示す。

この様にGAにより最適解として得られた構造はすべて

ある程度エネルギーが安定した構造を取っていることが分かる。GA のモデルは専門家のモデルに比べてエネルギーの観点からみると高い値をとっているが、エネルギー値はモデルの絶対的な評価基準ではなく、低いものであることが必要最低限具備すべき要件であり、また、エネルギー値は若干の接続関係及び3次元構造の相違で1~2kcal/mol程度変化することを考慮すると、石炭分子として十分に満足できるモデルの構築ができています。また、専門家の経験的知識を定式化した分子構造の平均化を考えるとという評価関数が石炭分子の評価として妥当であることが確認できる。

GA によって得られた構造を石炭化学者に提示し評価していただいたところ、得られた構造の半数程度が石炭分子として妥当であり、さらに詳しい密度などの評価に使用可能であることが明らかになった。このことは、GA で構築したモデルの全てが必ずしも満足できるものではないことを示しているが、専門家が1つのモデルを構築するのに数ヶ月必要であるのに対し、本手法では数分で可能であることを考えると、最低限の条件であるエネルギー値を満足する多様な構造を提示できることは十分評価に値する。

一方で、専門家が構築したモデルについて今回導入した評価値で評価すると、120 程度になる。本手法において、120 程度の評価値を示す構造のエネルギー値は-120kcal/mol 程度になり、専門家のモデルに比べるとかなり高い値になっている。これは専門家が構築する際には、分子量の観点からみた均質性だけでなく3次元的情報も配慮しているからであると思われる。今後は3次元構造情報や密度情報などに基づく評価項目を導入することで、より精度の高いモデルの構築を実現することが課題である。

5. 結 論

本論文では、GA による石炭分子構造構築を実現するため、分子構造のような枝分かれ構造を表現できる新しいコーディング法と交叉手法を提案し、評価関数に専門家の知識を定式化した関数を用いることにより専門家と同じような構築が可能な手法を示した。

この提案した手法を用いて、実際専門家が化学的データから予測した芳香族クラスターと架橋構造、末端置換基を用いて石炭分子モデルの構築を行った。専門家が約3ヵ月かけて構築する過程をわずか数分で構築でき、石炭分子モデルとして妥当な構造を複数解求めることができた。また、解として得られた構造をエネルギー計算することで、専門家の知識を定式化した関数の妥当性を確認し、更に専門家の構築した構造のエネルギー値と比較することで専門家と同程度の構造を短時間で推定できることを確認した。

本手法の課題として、3次元情報や密度情報などを付加し、より精度の高いモデルの構築を行うことが挙げられる。

本研究に関し議論頂いた本学工学研究科分子化学専攻の野村正勝教授と村田聡講師に深く感謝する。本研究の一部はNEDO、石炭利用総合センター、日本エネルギー学会の

助成による。

(平成9年11月4日受付, 同10年4月13日再受付)

文 献

- (1) (財)エネルギー総合工学研究所 石炭研究会編著: “石炭技術総覧,” 電力新報社, 東京 (1993).
- (2) J. H. Shinn: “From coal to single-stage and two-stage products: a reactive model of coal structure,” *Fuel*, vol. 63, no. 9, pp. 1187-1196 (Sept. 1984).
- (3) M. Nomura, K. Matsubayashi, T. Ida and S. Murata: “A study on unit structures of bituminous Akabira coal,” *Fuel Processing Technology*, vol. 31, no. 3, pp. 169-179 (Sept. 1992).
- (4) 野村正勝, 村田聡, 三宅幹夫, 三浦雅博: “石炭化学構造へのアプローチ,” 日本エネルギー学会誌, vol. 72, no. 5, pp. 321-329 (May 1993).
- (5) K. Nakamura, S. Murata and M. Nomura: “CAMD study of coal model molecules. 1. estimation of physical density of coal model molecules,” *Energy & Fuels*, vol. 7, no. 3, pp. 347-350 (May 1993).
- (6) S. Murata, M. Nomura, K. Nakamura, H. Kumagai and Y. Sanada: “CAMD study of coal model molecules. 2. density simulation for four Japanese coals,” *Energy & Fuels*, vol. 7, no. 4, pp. 469-472 (May 1993).
- (7) T. Dong, S. Murata, M. Miura, M. Nomura and K. Nakamura: “Computer-aided molecular design study of coal model molecules. 3. density simulation for model structures of bituminous Akabira coal,” *Energy & Fuels*, vol. 7, no. 6, pp. 1123-1127 (Nov. 1993).
- (8) T. Ohkawa, T. Sasai and N. Komoda: “Computer-aided construction of coal molecular structure using construction knowledge and partial structure evaluation,” *Energy & Fuels*, vol. 11, no. 5, pp. 937-944 (Sep. 1997).
- (9) M. Randic and C. L. Wilkins: “Graph-based fragment searches in polycyclic structures,” *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, vol. 19, no. 1, pp. 23-31 (Feb. 1979).
- (10) S. Bohanec and J. Zupan: “Structure generation of constitutional isomers from structural fragments,” *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, vol. 31, no. 4, pp. 531-540 (Nov. 1991).
- (11) R. E. Carhart, D. H. Smith, N. A. B. Gray, J. G. Nourse and C. Djerassi: “GENOA: a computer program for structure elucidation utilizing overlapping and alternative substructures,” *J. Org. Chem.*, vol. 46, no. 8, pp. 1708-1718 (Apr. 1981).
- (12) K. Funatsu, N. Miyabayashi and S. Sasaki: “Further development of structure generation in the automated structure elucidation system,” *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, vol. 28, no. 1, pp. 18-28 (Feb. 1988).
- (13) A. H. Lipkus and M. E. Munk: “Automated classification of candidate structures for computer-assisted structure elucidation,” *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, vol. 28, no. 1, pp. 9-18 (Feb. 1988).
- (14) B. G. Buchanan, G. L. Sutherland and E. A. Feigenbaum: “Heuristic DENDRAL: a Program for Generating Explanatory Hypotheses in Organic Chemistry,” *Machine Intelligence*, vol. 4, pp. 209-254 (1969).
- (15) B. G. Buchanan, G. L. Sutherland and E. A. Feigenbaum: “Rediscovering some Problems of Artificial Intelligence in the Context of Organic Chemistry,” *Machine Intelligence*, vol. 5, pp. 253-280 (1970).
- (16) E. A. Feigenbaum, B. G. Buchanan and J. Lederberg: “On Generality and Problem Solving: A Case Study Using the DENDRAL Program,” *Machine Intelligence*, vol. 6, pp. 165-190 (1971).
- (17) J. L. Faulon: “On using graph-equivalent classes for the structure elucidation of large molecules,” *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, vol. 32, no. 4, pp. 338-348 (Aug. 1992).
- (18) J. L. Faulon, P. G. Hatcher, G. A. Carlson and K. A. Wenzel: “A computer-aided molecular model for high volatile bituminous coal,” *Fuel Processing Technology*, vol. 34, no. 3, pp. 277-293 (Aug. 1993).
- (19) J. L. Faulon: “Stochastic generator of chemical structure. 1. application to the structure elucidation of large molecules,”

- J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, vol. 34, no. 5, pp. 1204-1218 (Oct. 1994).
- (20) 伊庭齊志: “遺伝的アルゴリズムの基礎 —GA の謎を解く—,” オーム社, 東京 (1994).
 - (21) 坂和正敏, 田中雅博: “遺伝的アルゴリズム,” 朝倉書店, 東京 (1995).
 - (22) 萩原将文: “ニューロ・ファジィ・遺伝的アルゴリズム,” 産業図書, 東京 (1994).
 - (23) A. E. Derome 著, 竹内敬人, 野坂篤子 訳: “化学者のための最新 NMR 概説,” 化学同人, 京都 (1991).
 - (24) R. D. Brown, G. Jones, and P. Willett: “Matching two-dimensional chemical graphs using genetic algorithms,” *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, vol. 34, pp. 63-70 (Apr. 1994).
 - (25) R. P. Sheridan, S. K. Kearsley: “Using a Genetic algorithm to suggest combinatorial libraries,” *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, vol. 35, no.2, pp. 310-320 (Feb. 1995).

井 林 真 吾 (学生員) 1974 年 2 月 13 日生まれ。97 年 3 月大阪大学工学部情報システム工学科卒業。同年 4 月大阪大学大学院工学研究科情報システム工学専攻博士前期課程入学。石炭分子構造構築に関する研究に従事。97 年電気学会電子情報システム部門大会優秀論文発表賞受賞。

大 川 剛 直 (正員) 1963 年 5 月 1 日生まれ。88 年 3 月大阪大学大学院工学研究科通信工学専攻博士前期課程修了。90 年同後期課程退学。現在, 同工学部情報システム工学科助教授。工博。知識獲得, 機械学習, 定性推論に関する研究に従事。93 年度電気関連学会関西支部連合大会奨励賞受賞。98 年電気学会進歩賞、論文賞受賞。IEEE などの会員。

薦 田 憲 久 (正員) 1950 年 2 月 27 日生まれ。74 年 3 月大阪大学大学院工学研究科電気工学専攻修士課程修了。同年 (株) 日立製作所入社。81~82 年 UCLA 留学。91 年 4 月大阪大学工学部情報システム工学科助教授, 現在, 同教授。工博。システム工学, 知識情報処理の研究に従事。計測自動制御学会 86 年度論文賞, 同学会 87 年度技術賞受賞。98 年電気学会論文賞受賞。IEEE などの会員。