

あとがき

構造－活性相関手法は常に進歩している。その多くのアプローチは突然現れる事は少なく、従来の手法の流れの延長上に有ることが普通である。また、この分野でしばしば大きな革命を起こす大きな要因となるのはやはりコンピュータ技術の進歩である。現に、構造－活性相関の歴史もコンピュータのハードやソフトウェアの歴史と一致して展開されていることは事実である。

参考のために現在のコンピュータ関連技術のトレンドを以下に簡単にまとめる。この表記が何年間持つのか、あるいは新たな項目がどの程度追加されるかはコンピュータ関連技術が急速かつ広範囲に広がってきている事を考えると不安な所がある。とりあえず、参考として見ていただきたい。

1. ハードウェア関連

- ①プラットフォームの移行：ワークステーションからパソコンへ
- ②CPUの変化：32ビットCPUから64ビットCPUへ
- ③グラフィック：専用高度グラフィックからTV可能のマルチグラフィック
- ④メモリ、ディスク：MEGA/GIGA単位からGIGA/TERA単位へ

2. ソフトウェア

- ①データベース：クライアント・サーバからクライアント・ウェブ・サーバへ
- ②作業形態：ローカル処理からネットワーク（ワールドワイド）処理へ
- ③プログラム形態：システム単位からシームレス結合システムへ

ここであげたトピックは構造－活性相関に影響を与えるかもしれない項目である。これ以外にも多数の項目が存在するが省略する。とにかく、最近のコンピュータの進歩は著者にも付いていけないほど高速／広範囲に進んでいる。

ここで紹介した構造－活性相関アプローチは過去に行われた試みの氷山の一角にしかすぎない。まだまだ紹介したくなるようなユニークなアプローチや、単発的には幼稚と見えるアプローチも他の手法と組み合わせるとすばらしい手法となるようなアプローチも多々見られる。残念ながら著者は種々の理由からこれらの素晴らしいアプローチをシステム化して現実の物とする事が出来ないでいる。現在は、読者の中から新たな構造－活性相関手法にチャレンジする方ができることを期待している。