

# 化学ソフトウェアの現状と流通

吉村 忠与志\*

## [概要]

化学PC研究会を結成し化学ソフトウェアに関して学術的に活動をしてきて十年目を迎えた。化学の研究・教育のためのパソコン用ソフトウェアが、機関誌、研究討論会などで多く発表・討論され、その中で無償利用の登録がなされたものについては「無償利用ソフトウェア」として会員に無償頒布している。パソコン通信ネットワーク(PC-VAN,SIG)でもOSL(Online Software Library)で関連ソフトウェアを無償配布している。さらに、グローバルなプロジェクトSERAPHIMの化学教育ソフトウェアの日本における無償頒布の委託を受け、会員に配布している。

## 1) 化学ソフトウェアに関する学術活動

1982年に「化学PC研究会」が組織され、化学ソフトウェアに関して学術的な活動を行ってきて十年目を迎えた1992年に、実績が認められて「化学ソフトウェア学会」(本会という)に改組・昇格することになった。本会では、化学の研究・教育におけるパソコン(PC)用ソフトウェアの開発とその振興を目的に学術活動をしその目的達成のために各種委員会主体で、つぎのような事業が実施されている。

- 1) 機関誌および図書の編集と発行 [編集委員会]  
機関誌としての会誌「化学とソフトウェア」(ISSN0918-0869)の季刊と論文誌の発行

- 2) 研究討論会の開催 [討論会実行委員会]  
デモ付き対話討論会を年会として開催(1992年11月28,29日大阪市立大)
- 3) 化学ソフトウェアに関する文献およびプログラムの集録と提供 [化学ソフトウェア頒布委員会]  
ソフトウェア年鑑を発行し無償利用ソフトウェアの頒布を実施
- 4) パソコン通信ネットワーク(PC-VAN) [化学VAN委員会]  
SIG「化学とコンピュータ」を運営(SIGOP:中野英彦)
- 5) プロジェクトSERAPHIMとの国際交流 [国際交流委員会]  
SERAPHIMソフトウェアの日本配布センターを委嘱

第1回国際会議をハワイで企画中

会報JAPCには、査読審査による学術論文の他、プログラム・リスト公開の報文などが掲載され、化学PCソフトウェア研究討論会でも多くの化学ソフトウェアが発表・討論されている。また、最新の化学ソフトウェアについてソフト調査を毎年実施して「最新化学PC用ソフトウェア集」なるソフトウェア年鑑<sup>2)</sup>を発行している。その中で、無償利用の登録がなされたものについては「無償利用ソフトウェア」として、現在78件を会員に無償配布している。パソコン通信ネットワークでもPDSソフトウェアを無償配布している。さらに、化学教育ソフトウェアに関してアメリカを拠点にグローバルに学術活動しているプロジェクトSERAPHIM(Moore教授)との国際交流の活動として、彼らが収集・配布しているSERAPHIMソフトウェア83件について無償配布の委託を受

---

\* 福井工業高等専門学校 本論文は、藤永太一郎博士の叙勲を記念して御寄稿頂きました。

け、日本の会員対象に配布している。  
化学ソフトウェアに関する討論は、本会以外に日本化学会情報化学部会、J C P E (日本化学プログラム交換機構)、C B I 研究会(計算機と化学・生物学の会)などがあり、それぞれで個々に行われているが、著者が主管する化学ソフトウェア学会を通してのソフトウェア情報について報告する。

## 2) 化学ソフトウェアに関する実態調査

パソコンの発展と普及に伴い、化学パソコン用ソフトウェアが個々の優秀な人材によって開発されているものの、まだまだ公表されておらず、実用化しているものはほんのわずかかと思われる。しかし、巷ではパソコン・ユーザが、有用なソフトウェアを紹介してほしいとか、どこにどんなソフトウェアがあるのか教えてほしいという声をあげている。著者らはそれを受けて、1985年より化学の分野でのパソコン用ソフトウェアの実態調査を続けており、毎年各年度版を出版・発行している。化学ソフトウェアの整理と情報流通での調査では、本会で作成している「最新化学PC用ソフトウェア集」(ソフトウェア年鑑)は、唯一の情報源となり学界で高い評価を受けていることで、この調査・報告を続ける責務を果す思いをしている。

1991年度も会報J A P C(1991)3月号で実態調査を開始し、調査表の提出を募った。しかし、編者である著者が文部省在外研究で国内を留守したため、従来ほどの調査表を回収することはできなかった。化学パソコン用ソフトウェアの健全な発展と普及を願い、さらに、その環境向上の一助になればとの趣旨で、この分野のソフトウェアの調査を行った。有料、無料を問わず、公開、非公開を問わず、化学に関したパソコン用プログラムをオリジナルに開発・作成している方を対象に、そのソフトウェアを公表(カタログ)

化して、この分野の情報流通の活性化を図るものである。パソコンを使う化学者・技術者にとって、この成果はそれぞれの部門で有効な情報源となっているものと思われる。

## 3) 集計結果

会報J A P C(1991)3月号での募集に対して、会員各位からの調査表の提出は極めて少なく、事務局での作成も含めて21件であった<sup>2)</sup>。85年度(80件)、86年度(78件)、87年度(72件)、88年度(41件)、89年度(41件)そして90年度(40件)という件数があったので、会員の協力を得て今後ともこの数字の件数を維持していきたいと思う。本会以外に、化学PC用ソフトウェアが議論されていない訳ではなく、J C P EのNEWSLETTER、学研出版の「自作教育ソフト年鑑」や、大阪科学技術センター主催のソフトウェアコンファレンス、日本化学会情報化学部会主催の情報化学討論会などがある。そのうち、筆者所有の資料として「第5、6回化学PCソフトウェア研究討論会要旨集」では、供給未定のもので多かった。また、「自作教育ソフト年鑑'91」は在外研究から帰国して間もないため、化学関連のソフトウェアの調査ができなかったため、収録しなかった。

ところで、この年鑑は、無償利用ソフトウェアの登録台帳の役目も有しているもので、無償利用ソフトウェアに登録されているものについては、昨年度の原稿版下のまま61件を再録した。かくして、収録件数は82件となった<sup>2)</sup>。

調査表の82件について、使用目的別の集計を行ったところ、図1のような内訳となった。集計結果をみると、教育ソフトウェアの件数が引続き多かったが、第2位で28.0%を占めた。昨年度と同様第1位はデータ処理で30.5%であった。他では、分子科学が第3位25.6%で、第4位で図形処理が数字を伸ばしている。分子科学での研究開発と進歩には著

しいものがあり、パソコンの多用化が伺える。

本会は、会報JAPCを季刊し、現在通巻で第38号(JAPC, Vol.13, No.4(1991))となり、これも有用なオリジナルソフトウェアを公開しているので、会報JAPC, Vol.12, No.3(1990)からVol.13, No.4(1991)の5号分の20件について全目次の掲載という形で収録した(これ以前のは85~90年度版の年鑑に収録済み)。年鑑のソフトウェア登録と重複しているものもあり、報文の投稿とソフトウェアの登録とは並行して研究者に定着してきたようである。

使用目的別に集計した結果、20件の内訳

は、図2のようになった。ここでは第1位は分子科学で9件、その次はデータ処理で5件であった。第3位は図形処理が3件であった。化学ソフトウェアがどんどん開発されているはずであるが、会報への投稿発表が減少している傾向が伺える。会員各位に対して大いに報文および学術論文の投稿を期待したい。

全体的にみると、化学ソフトウェアはつぎの5つの用途で開発が進んでいるようである。

- (1) 教育・・・化学教育の方法論の中でパソコンを導入しようとする試みが、化学教育者

件 数 (%)

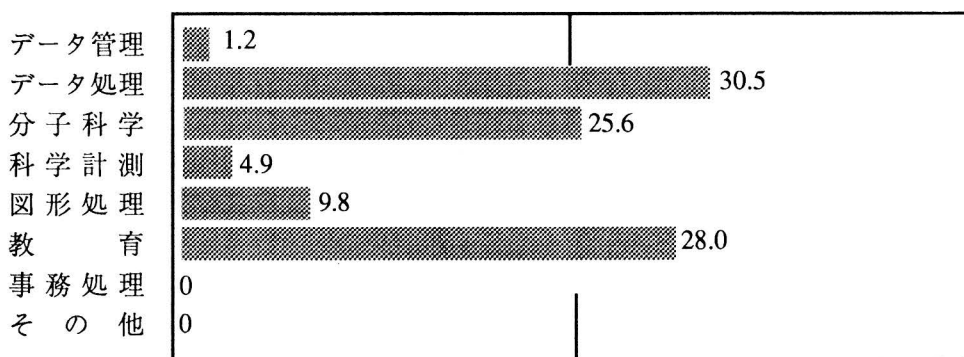


図 1 使用目的別の集計内訳



図 2 会報JAPCでの使用目的別の集計内訳

に目覚め、ソフトウェアの開発が進んでいる

- (2)データ処理・大型計算機以来、主に化学の計算処理を中心とするもの
- (3)分子科学・パソコン利用と性能アップでの分子科学計算や分子グラフィックスの研究がたいへん盛んである
- (4)科学計測・化学計測とも言われる所であり、データの自動計測と装置の制御は重要なテーマ
- (5)図形処理・グラフィックスはハードウェア的にパソコンの最も得意とする所であり、化学に必要な図形が処理されている

ところで、化学情報（文献情報）に関するソフトウェアも化学の分野ではたいへん重要なものではあるが、ユーザのニーズがパソコンでは求めない領域であるのか、これに関するソフトウェアはほとんどこの調査では発表されていない。最近のパソコンは、性能もかなりアップしているが、この分野における勇気ある公開を待ちたい。

#### 4) 使用機種と言語

ソフトウェアの汎用性・互換性・流通性を見る上で、良いと評価されるソフトウェアはベストセラー的なパソコン機種ではほとんど走るように開発・移植が進んでいる。逆に言えば、よく利用・活用される機種ほどソフトウェアの数も多いと言える。今回の調査におけるパソコンの使用機種についてまとめると、NEC、PC-9801シリーズが何と言っても段突で第1位ではほぼ100%であった。他の機種ではPC9801コンパチのEPSON PC-286、386があるだけであった。パソコンのハードウェアの高性能

化にともない、32ビット機もよく使われていた。

使用言語N88BASIC(86)が第1位で74.4%であったが、MS-DOS上で使用されることが多かった。FORTRANが15.9%で、C言語が6.1%と多く使われ始めたようである。他には、QuickBASICが3.7%であった。

DOSにおいては、MS-DOSが最も普及しており、その環境下でBASIC、FORTRANおよびC言語がよく使われている。そのために、各機種のファイルの互換性がよくなってきている。DISK-BASICのDOSは各機種によって異なっており、ファイルの転送は極めて困難であったが、MS-DOSは機種共通であり、このフォーマット上では、ファイルの転送が容易であることも、ソフトウェアの互換性が増し、流通性もよくなったものと思われる。

ところで、次のDOSとして期待されているOS/2であるが、この分野ではソフトウェアの開発環境として全く利用されていないようである。逆に、UNIX系のDOSの普及を求める声さえあり、UNIXマシンのパソコン低価格機種の販売が待たれる所ようである。また、MS-DOS上でのWindows 3.0がPC-9801系で普及しつつあり、これまでと違ったソフトウェア開発環境が設定されていくものと考えられる。

#### 5) ソフトウェアの供給と無償利用

このソフトウェア年鑑の主な目的は、化学関連ソフトウェアの情報流通であり、どんなソフトウェアが誰によってどこで開発され、どのような供給ルートがあるかを示すものである。この章のデータは、90年度までのものをそのまま掲載した。その理由は、91年度は広く一般に向けてソフトウェアの調査する時間がなかったため、このデータではすべて無償供給となってしまったためである。

表 1 ソフトウェアの供給状況

	85年度版	86年度版	87年度版	88年度版	89年度版	90年度版
○供給予定あり						
有 料	31.4%	7.5%	30.6%	29.3%	23.8%	17.5%
無 料	34.3	47.3	40.3	58.5	67.6	72.5
○供給予定なし	6.9	3.3	27.8	12.2	8.6	10.0
○無 回 答	27.5	23.1	1.3	0.	0.	0.

85～89年度版と90年度版（調査表提出分のみを集計）を比べて調べてみると、つぎの表1のようであった。

この調査では、無償利用としての登録および使用許可の有無を尋ねたところ、全体で72.5%が無償供給予定があり、その内訳は無償利用ソフトウェア登録が55%あった。一般的に、本誌への著作者は自作のソフトウェアに対して著作権は保有した形で無料供給することにより、いろいろな方にどんどん活用されることを望んでいるものと思われる。本会の無償利用ソフトウェアに対してたいへん協力的であった。

化学ソフトウェアの頒布では、分子科学計算のプログラムに絞って無償利用頒布を行っているグループ「日本化学プログラム交換機構（JCPE）」がある。JCPEのソフトは、「JCPE NEWSLETTER」で登録されたプログラムのカタログリストが公開されている<sup>3)</sup>。JCPEの承諾によりソフトウェア年鑑にもそのリストを転載したので、参考にされたい。無償利用頒布に関して、分子科学計算のプログラムでは重複登録や頒布窓口が二重であったりするかもしれないが、お互いの趣旨を尊重して共存共栄を謀りたい。

ところで、ソフトウェアは開発者の苦労と汗の結晶であり、供給を受ける者は無料供給といえどもただではないと思っていただきたい。法律的には著作権があり、それを侵害する行為、コピーや改変などは決して無断で行ってはいけない。個人使用で開発者による

好意に甘えられる間はよいが、そのソフトウェアによって営利的な成果を得る行為を行うときは、必ず、事前に了解を取り、引用部分を詳細に明記して、オリジナルを尊重しなければならない。ユーザにこのようなモラルがなければソフトウェアの流通は望めなくなる。ソフトウェアの情報流通をよくするためにも、ユーザはだれにも恥じないモラルをもってよいソフトウェアを活用されたい。

## 6) プロジェクトSERAPHIMのソフトウェア頒布

著者は平成3年3月から11月まで8ヶ月間文部省在外研究でロンドン大学キングスカレッジ（イギリス）、モンクトン大学（カナダ）、ウイスコンシン大学マディソン校（アメリカ）、そしてテキサス大学オースチン校（アメリカ）に留学し、世界的な視野に立って化学ソフトウェアの現状を調査することができた。その中で下沢隆先生が念願だったプロジェクトSERAPHIMとの国際交流のひとつとして、ソフトウェアの交流を実施することができたことは大きい成果であると思われる。

プロジェクトSERAPHIMとは、ウイスコンシン大学マディソン校のジョン・W・ムーア教授が主管している化学教育ソフトウェア・プロジェクトで学術活動をグローバルに実施している。収集・配布している化学教育ソフトウェアはVideodiscs, Apple II ProDOS,

Apple II, IBM PCs, PC compatible, Apple Macintoshの機種について取り扱われ、カタログでは1991年度版<sup>4)</sup>が最も新しいので、91ソフトウェア年鑑にはIBM PCs, PC compatible, およびApple Macintoshのソフトウェア83件についてムーア教授の許可を得てカタログ原稿(英文)そのままコピー掲載した。本会が日本でのSERAPHIMソフトウェアの頒布センターとして認定されたので、これらの83件について頒布を実施している。SERAPHIMソフトウェアについて1987年と1991年のカタログとのプログラムの分類件数を表2に示す。さらに、JCPEと91ソフトウェア年鑑のプログラムについてもそれらの件数を整理したので、参照されたい。

SERAPHIMからソフトウェアを一方的に貰うだけではソフトウェアの国際交流にはならないので、著者はウイスコンシン大学マディソン校の滞在中に「パソコンによる化学計算入門(共立出版)」の英語版を作成し、NEC PC-9801(N88 BASIC)からIBM PC(Quick BASIC ver 4.5)への移植を行い、IBM機で実働できるものをSERAPHIMソフトウェアとして登録してきた。現在のところ、日本からのソフトはこの1件だけであるが、会員でIBM PC機で実働するソフトを開発された場合は、ご一報ください。ソフトウェアの交互交流を続けるためにもご協力ください。

最後に、本論文の一部は日本化学会第63春季年会(1992年3月)で発表した。藤永太一郎先生から「田舎教師にはなるな!」と言われたお言葉を胸に研究活動を続けており、恩師に心から深謝申し上げる。

## 引用文献

- 1)吉村忠与志,油化学,vol.38,No.5,pp.385-393(1989).
- 2)吉村忠与志,最新化学PC用ソフトウェア集'91,化学PC研究会(1991).
- 3)JCPE, JCPE NEWSLETTER, vol.3, No.3(1991).
- 4)Project SERAPHIM, Software Catalog(1991).

Present States and Circulation of Chemical Softwares in 1991.

Tadayosi Yoshimura

Department of Industrial Chemistry,  
Fukui National College of Technology  
Geshi-cho, Sabae, Fukui 916,  
Japan

The use of personal computer in a chemical research is currently excited. The author has investigated on a software communication of chemistry for a personal computer, and published the annual reporting book in 1991 of chemical softwares. This paper describes present states and circulation of chemical softwares in Japan. Furthermore, it mentions the activity of Project SERAPHIM in the field of chemical education software.

表 2 化学ソフトウェアの項目分類

分類項目 <sup>a)</sup>	SERAPHIMカタログ <sup>a)</sup> (1987)	SERAPHIMカタログ <sup>a)</sup> (1991) <sup>b)</sup>					JCPE Newsletter (Vol.3, No.3, 1991)	最新化学PC用ソフトウェア集'91 (1991)
		AR	AP	PC	MC	計		
Special Program/Teaching Support システム・プログラム/教授支援	14	-	23	6	8	37	-	10
General Chemistry/Tutorials & Games 一般化学/チュートリアル&ゲーム	-	-	-	21	-	21	-	-
Methods of Chemistry 化学の方法論	11	7	160	-	2	169	-	4
Atom Structure/Periodicity 原子構造/周期律	15	3	34	8	-	45	-	1
Bonding/Formular/Stoichiometry 結合/化学式/化学量論	12	16	30	19	2	67	-	4
Gasses/Liquids/Solids/ Molecular Structure 物質の3態/分子構造	12	3	21	13	1	38	-	2
Solutions Processes/Acid-Base 溶液論/酸-塩基	8	-	23	12	4	39	-	3
Chemical Reaction/Equilibrium- Kinetic-Redox/Electrochemistry 化学反応/平衡/酸化還元/電気化学	14	1	26	17	-	44	-	1
Organic /Polymer Chemistry 有機化学/高分子化学	19	4	49	10	1	64	-	3
Environmental/Industrial Chemistry 環境化学/工業化学	23	4	10	7	1	22	3	2
Analytical/Qual/Spectroscopy 分析化学/スペクトロスコピー	6	-	9	33	11	53	-	6
Nuclear Chemistry 核化学	2	-	3	1	-	4	-	-
Thermodynamics/Statistical Mechanics 熱力学/統計力学	-	-	-	11	-	11	1	-
Transition Metal Complexes 遷移金属錯体	-	-	-	2	-	2	-	-
Lavoratory Modules/Interfacing 実験モジュール/インターフェイス	9	1	6	1	-	8	-	9
Instrument Simulators 分析機器シミュレータ	5	-	4	1	1	6	-	15
Mainframe Translations/ Molecular Science 汎用機からの移植/分子科学	5	-	-	12	-	12	47	22
Programmer's Tools プログラマングレード	8	12	11	13	1	37	-	-
合 計	163	51	409	187	32	679	51	82

註：a)英文項目はSERAPHIMカタログ(1991)による。

b)AR, Apple II ProDOS; AP, Apple II; PC, IBM PCs; MC, Apple Macintosh