高分子化学研究者のための パソコンソフト

森田 雅夫

Masao Morita, 日本電信電話 (株) NTT 基礎研究所

1. はじめに

数年前までは、研究室に1台程度であったパソコンが今ではパーソナルコンピュータの名のとおりの1台の時代になりつつある。また、半導体デバイスの低コスト化・高性能化などにより、これまでゲームマシンか住所録であったものがひと昔前の大型計算機をしのぐほどになってきている。さらに、パソコンではモデムやプロッタあるいは実験装置と接続するためのインタフェースなどが簡単に実装でき、テキストばかりかグラフィックも扱えることから、研究の始まりから終わりまで、パソコンを用いることにより極めて効率的に研究を行えるようになってきた。本稿では研究の効率化に役立つと思われるパソコンソフトについて、内容や利用法を紹介・解説したい。なお、現在のパソコンの現状からみて、NECのPC 9801シリーズ上でMS-DOSを使用していることを前提として話を進めるが、一部他機種についても言及する。

2. 通信ソフト

研究を始めるにはまず情報を収集する必要がある。以前なら図書館に行き、Chemical Abstractをひもとき、文献を捜したものである。最近では、化学情報協会のSTN (The Scientific & Technical Information Network) やロッキード社のDialogを通してCAS Onlineにアクセスしたり、Junet, csnet bitnetなどのコンピュータネットワークを通して電子掲示板¹⁾を読んだり、電子メールでやり取りすることにより、情報をたやすく効率的に得られるようになってきた。その際、パソコンを端末として利用すればデータステーションに足を運ぶことなく、必要な情報をその場でフロッピーディスクにダウンロードしたり、ハードコピーをとることができる。

通常、シリアルポート (RS-232c) にモデムなど

表1 通信用ソフトウェア

ソフト名	発売元	特徴
ESTerm	アスキー	操作が容易
CCT-98	技術評論社	逆スクロール画面と受信画面を同時に表示
PCOM α	パーソナルビジネスアシスト	グラフィックス、マウスをサポート
exTerm	エヌジェーケー	オートパイロットにより電話料金の安い夜間に無人でアクセスできる

を接続し、パソコンをターミナルモードにすればデータ通信が可能となるが、通信用ソフトを利用することにより、多彩な機能を実現することができる。例えば、データベースにアクセスする際に、loginIDやPasswordなどを自動的に送信させたり、グラフィックを扱う際には、ソフトが必要となる。詳細は、文献を参考にしていただくことにして²⁾、表1に代表的な通信ソフトとその特徴を示す。

3. 計測、計算用プログラム言語

次に、計測、計算を行う場合のパソコンソフトについて述べる。最も簡単にシステムが組めるのは、やはりBASICであろう。BASICでは、通常の計算処理や判断に加え、グラフィックやシリアル・パラレルあるいはGP-IBの入出力ポートなど多彩な命令や関数

森田雅夫 日本電信電話 (株) NTT 基礎研究所 (329-11 茨城県那珂郡東海村白方白根162) 主任研究員
昭和53年東工大工学部高分子工学科卒、55年同大学院修士課程修了、同年日本電信電話公社入社。61~62年ノースカロライナ大客員研究員。専門は高分子物理化学。現在は電気化学の研究に従事。

```

/*
---- Insert numbers into a program for RATBAS ----
*/
#include "stdio.h"

main(argc,argv)
int argc;
char *argv[];
{
    char out_txt[255],fname1[20],fname2[20];
    int bufleng,number,num;
    FILE *fd1,*fd2,*fopen();

    bufleng=255;
    number=100;

    strcpy(fname1,argv[1]);
    strcpy(fname2,argv[2]);
    if((fd1 = fopen(fname1,"r")) == 0) /* source */
    {
        printf("File open error for %s",fname1);
        exit(1);
    }
    if((fd2 = fopen(fname2,"w")) == 0) /* destination */
    {
        printf("File open error for %s",fname2);
        exit(1);
    }

    while(fgets(out_txt,bufleng,fd1))
    {
        fprintf(fd2,"%d %s",number,out_txt);
        number = number + 10;
    }

    if (fclose(fd1) == -1)
    {
        printf("File close error for source file");
        exit(1);
    }
    if (fclose(fd2) == -1)
    {
        printf("File close error for destinasion file");
        exit(1);
    }
}

```

ファイルのオープン

行番号の挿入

ファイルのクローズ

利用方法 (アンダーラインの部分のみ入力)

A>INSNUM source.bas dest.bas □
 ↑ ↑
 行番号のないリストのファイル名 行番号を挿入したリストのファイル名

リスト 1 行番号挿入プログラム

がサポートされている。したがって、測定機器を制御し、データを取り込み、ある処理をしたのちディスプレイ上にグラフィックとして表示させ、プロッタに出力するといったプログラムを比較的たやすく組むことができる。しかし、パソコン本体に添付されてくる BASIC ではプログラムを作成する際の編集環境が不十分、実行速度が遅いといった問題がある。さらに、サブルーチンをパッケージ化したり、プログラムを構造化することもできない。

アスキー社の RATBAS は、これらの問題をかなり解決してくれる。このソフトは、通常の BASIC の機能に加え、END IF などの構造化構文やローカル変数（そのサブルーチン内だけで有効な変数）の使用が許されるため、プログラムの開発や保守が非常にやりやすくなる。さらに、行番号なしでプログラムを作成した後、リスト 1 に示すプログラムで行番号を付与して RATBAS を通し³⁾、コンパイルすることにより高速で高度なプログラムを効率よく開発することが可能になる。

C や Pascal, FORTRAN といった言語を用いればさらに高速化が可能であるが、グラフィックや入出力ポートのプログラムも作成しなくてはならない。

IBM-PC でないと動作しないが、Microsoft 社の Quick BASIC や Borland 社の Turbo BASIC はすばらしいソフト開発環境を与えてくれる。いずれも BASIC のコンパイラであるが、インタプリタ感覚で作業を進めることができる。すなわち、画面がいくつかのウィンドで区切られ、1つのウィンドでプログラムを作成・実行でき、生じたすべてのエラーが別のウィンドに表示される。各エラーにカーソルをあわせてリターンキーを押せば、カーソルがエラーの生じた行に移動する。また、実行途中の変数の値も知ることができる。しかもコンパイルされたプログラムの実行速度は C や Pascal で作成したプログラムのそれとほとんどかわりがない。

一方、MM 2 や MMP 2 を用いた分子力学計算、CNDO や MNDO などを用いた分子軌道計算をされている方も多いと思われる。もちろん、大型計算機と比べれば、メモリ容量や計算能力の点で太刀打ちできるものではないが、パソコン上で分子を組立て、構造を確認し、そのまま分子計算を行わせ、結果を再びグラフィック表示させるといったことは、パソコンの得意とするところである。パソコン上で MM 2 などの計算については、大沢の総説を参考にさせていただくとして⁴⁾、分子の組立や、グラフィック表示については、安藤⁵⁾ や山本⁶⁾ らのプログラムが利用しやすい。これらは、BASIC のソースプログラムとして公開されているため、他のプログラムとも容易に結合することができる。

分子計算プログラムは通常 FORTRAN で記述されており、グラフィック部分も FORTRAN でとお考えの方は、日本技術ソフト開発より FORTRAN 用グラフィックライブラリがソースリスト付きで市販されている。

```
% TEST.TEX
(a)
\centerline{\big A Sample Text} \vskip 3mm
{\def
\leftline{{\bf 1.Introduction}}
\vskip 3mm
This is a sample text written by TEX which has a variety of font style like
{\it italic}, {\sl slanted}, {\bf bold}, and {\tt typewriter}. You can also
use a different size of font like {\tiny tiny}, {\small small}, {\big big}, {\LARGE larger}, and {\Huge hugest}. Even the exotic characters including \aa, \ss,
\alpha, \beta, \gamma can be used.
\vskip 2mm

\ss
\nabla^2\psi + \{8\pi^2m\over h^2\}(E-U)\psi = 0
\ss
\vskip 3mm

\ss
rot E = -{\partial B\over\partial t}
\ss
}
\end
```

(b)

A Sample Text

1.Introduction

This is a sample text written by T_EX which has a variety of font style like *italic*, *slanted*, **bold**, and `typewriter`. You can also use a different size of font like tiny, small, **big**, **larger**, and **hugest**. Even the exotic characters including $\hat{a}$, β , α , β , γ can be used.

$$\nabla^2\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E-U)\psi = 0$$

$$\text{rot } E = -\frac{\partial B}{\partial t}$$

(c)

A Sample Text

1.Introduction

This is a sample text written by T_EX which has a variety of font style like *italic*, *slanted*, **bold**, and `typewriter`. You can also use a different size of font like tiny, small, **big**, **larger**, and **hugest**. Even the exotic characters including $\hat{a}$, β , α , β , γ can be used.

$$\nabla^2\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2}(E-U)\psi = 0$$

$$\text{rot } E = -\frac{\partial B}{\partial t}$$

図 1 TEX 言語入力原稿・TEX 出力結果

4. ワードプロセッサ

現在多くの方が論文作成に、なんらかのワードプロセッサを使っていると思われる。通常の手紙や事務書類であればパソコン用ワードプロセッサで十分であるが、論文となるといろいろ不満がでてくる。よく聞かれる不満としては、①ギリシャ文字が扱えない、②式の記述ができない、③文字の大きさが変えられない、④文字の種類が変えられない、といったところであろうか。

TEX^(7,8) というソフトは厳密にはワードプロセッサではないが、上述の不満を解消し、活字印刷並みの表現を可能にしてくれる点で注目に値する。まず、TEX にどのような指示を与えると、どんな出力が得られるかを示そう (図 1)。

(a) が TEX 言語で書かれた原稿で、(b) がその出力である。一見すると全く別のファイルのように見えるが、文章はほとんどそのまま書かれている。特殊文字が現われたり、字体の切り換えが起こるところには π マーク (VAX など π マークの無い場合には $\backslash$) で始まるコマンドが挿入されている。数式は \$ や \$ \$ マークで囲まれており、数式特有のコマンドが使用できるようになっている。出力にはレーザプリンタを使うに越したことはないが、ドットプリンタでも期待以上の結果が得られる (c)。

この TEX は、パソコンから大型機まで多くのコンピュータ上で動いており、しかも手軽に入手できる⁹⁾。これだけの品質をもった文書が研究室などで作成できるとなると、まさに卓上出版 (DeskTop Publishing) の時代になりつつあるといえる。

5. ユーティリティ

これまで述べてきたソフトのほかに、あると便利なソフトをいくつか挙げてみたい。

Pop-Up-Menu (アスキー)

このソフトは、ユーザーと MS-DOS の間を仲介するコマンドプロセッサである。通常 MS-DOS にファイルの表示や複写を指令するときには、その命令やファイル名を打ち込んでやらなくてはならない。これに対し、Pop-Up-Menu ではコマンドやファイル名が画面上に表示されており、ユーザーはマウスとよばれる指示装置でこれらを選択できる。したがって、入力の手間が省け、より効率的に MS-DOS を使用することができ。

Mifes-98 (メガソフト), FINAL (E・S・P) など

これらはいわゆるエディタとよばれるソフトである。MS-DOS にも EDLIN という簡易なエディタが添付されているが、これはラインエディタとよばれ、N 88-BASIC のスクリーンエディタに慣れた者にとっては非常に使いにくい。これらのソフトは画面を分

Jeager (35) described non-linear diffusion to a cylinder in a heat flux study and McCreery et al. (36) applied the Jeager expression to the determination of concentration gradients at microcylinders. The corresponding hemicylindrical currents would be given by one-half the previous expression, or

$$i = \frac{2nFADC}{\pi^2 r} \int_0^{\infty} \frac{\exp(-uDt/r^2)}{J^2(u) + Y^2(u)} \frac{du}{u}$$

$$Y = X(X-2)(X-1)(X+1)(X+2)$$

図2 Macintosh 出力例

割して異なるファイルを表示したり、エディタから抜けることなくコマンドを実行できるなどソフトのプログラミング、TEX の原稿などテキストファイルの編集を効率よく行うことができる。

Right Writer (Decision Ware : サザンパシフィック)

これは英文添削ソフトである。論文用などに作成した英文をこのソフトにかけると、文体、1つの文章の長さ、使用された単語の種類と頻度、などがチェックされ、コメントを返してくれる。一般的な英文を対象としており、また、内容を理解してコメントしているわけではないので、技術論文を添削した場合、必ずしも適切なコメントとはならないが、よい英文を書くための参考にはなると思う。

6. Macintosh の世界

Apple 社から発売されている Macintosh を御存じの方も多いと思う。このマシンは PC 9801 や IBM-PC とは全く別の世界を形成している。Macintosh ではノート、鉛筆、消しゴムから辞書、電話、電卓まで机上にある種々の道具をディスプレイ上を実現しており、すべてのことがこれ1台でできるようになっている。しかも、マウスでディスプレイ上のアイコン (フ

ァイルの内容や道具の種類などをシンボライズした絵文字) をポイントするだけでほとんどのことは事足りてしまう。また、Macintosh はグラフィックベースのパソコンで、文字も図形も同じように扱われる。したがって、使用できるフォントの種類や大きさなども、他のパソコンとは比べものにならないほど豊かである。

Macintosh においては、各アプリケーションソフトのデータに互換性があるため、実験装置から送り込まれたデータを Cricket Graph (Cricket Software) などのグラフ作成ソフトで図表し、MS Word (Microsoft) などのワードプロセッサで作成した論文に組み込み、そのまま本にしようことも可能である。図2にサンプルを示す。

TEX の場合、原稿とプリントされたものの間に大きな隔りがあり、文章を書くというよりは印刷物のレイアウトをプログラミングしているといった感がある。これに対し、Macintosh ならば印刷されるとおりにディスプレイされるので、自然な感覚で作業を進めることができる。

7. おわりに

誌面の都合上、ここに紹介できなかったソフトも多く、また、その進歩も著しいため、必ずしも最新の情報になっていない懸念はあるが、研究の効率化に少しでもお役に立てばと思う。現状においてもパソコンは研究になくはならないものになりつつあり、今後、32ビットのパソコンが普及するにしたがい、さらにその重要度が増すものと思われる。

参考文献

- 1) 例えば、Stanford 大の電子掲示板には“ニューラルネット”などさまざまなテーマで書き込みがあり、全世界の研究者が議論を戦わしている
- 2) 中沢真也：日経バイト，September，106 (1987)
- 3) 阿部徹治：私信
- 4) 大沢映二：化学 40(11)，703 (1985)
- 5) 安藤慎治，中野英彦：化学，41(1)，76 (1986)
- 6) 山本米雄：分子の組み立て，講談社
- 7) D.E. Knuth：The TEXbook，Addison Wesley Publishing Company (1986)
- 8) 大野義夫：Bit，19，1037 (1987)
- 9) L. Lamport：LATEX A Document Preparation System，Addison Wesley Publishing Company (1986)