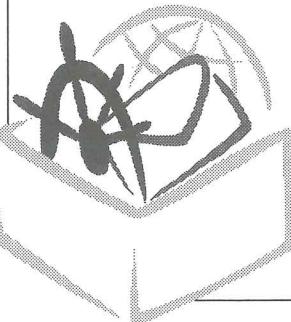


## 入門編



## インターネットは研究者を変えるか?

伊藤 真人 | Ito Masato  
創価大学

## 化学者はコンピュータをどのように使ってきたか

インターネット<sup>\*1</sup>は、日本の90年代中期を象徴するトレンドの一つであるといってよいだろう。おそらく1995年に始まった一時的なブームを経て、ようやく最近になって社会のなかに定着しつつある感がある。化学者と例外ではない。インターネットを積極的に活用している人はまだそれほど多くはないだろうが、関心をもって様子を見ている人は多いはずである。一見すると、コンピュータの新しい用途の一つにすぎないといえなくもないインターネットは、化学者のライフスタイルに影響を与えるほどの可能性を本当に秘めているのだろうか。この問題を考える前に、まず化学者とコンピュータとのかかわりを振り返ってみよう。次頁の「化学とコンピュータとネットワークに関する小年表」と照らしあわせながら読んでいただきたい。

## 黎明期(60年代まで) —— 大型機の時代へ

当初は電子計算機と呼ばれていたコンピュータは、その開発当初から自然科学者に注目され、活用されてきた。化学者も例外ではない。Hückel法のような簡単な分子軌道法のプログラム<sup>\*2</sup>は、初期の電子計算機のうえでもつくられた<sup>\*3</sup>。また、振動や回転スペクトルなどの分光学のデータを分子構造と結びつけるためのプログラム<sup>\*4</sup>が、構造化学の分野の発展を促進したであろうことは容易に想像がつく。早くも1962年にはQCPE(Quantum Chemistry Program Exchange)<sup>\*5</sup>がプログラムの交流活動を開始しており<sup>\*6</sup>、すでに30年以上前には、各種の半経験的分子軌道法のプログラムが利用されるようになっている<sup>\*7</sup>。

\*1 p.21を参照。一般的な解説書は、村井 純、『インターネット』(岩波新書)をはじめ多数ある。

\*2 QCPEで今も公開されている最も古いHückel法のプログラムは、1965年に発表されている(QCPE 70, J. E. Bloor, B. R. Gillson, QCPE 11, 70 (1965))。

\*3 西本吉助、化学ソフトウェア学会'97研究討論会記念講演(1997)でも当時の事情に言及している。

\*4 QCPEで最も古いものは、1966年の振動スペクトルに関するプログラムである(QCPE 74, W. G. Rothschild, QCPE 11, 74 (1966))。

\*5 インディアナ大学に本拠を置く、複数の研究者が同じ原理に基づく化学計算プログラムを独立につくる労力の無駄を防ぐために、研究者間での国際的な計算プログラムの相互利用の促進を目的とする機関。はじめは量子化学者が中心だったが、やがて化学者による計算機利用全般へと広がった。コンピュータを介した化学者間ネットワークのはしりである(<http://qcpe5.chem.indiana.edu/qcpe.html>)。

化学とコンピュータとネットワークに関する小年表 (年号のあとに分類項目 H: ハードウェア, S: ソフトウェア, N: ネットワーク, C: 化学)		
西暦	分類	できごと
1931年	C	Hückelがπ電子系の分子軌道法を発表する。
1945年	H	最初の電子計算機(真空管式)ENIACが完成する。
1962年	C	QCPEが発足する。
1963年	C	Hoffmannが拡張Hückel法を発表する。
1965年	H	東京大学に大型計算機センターが発足する(おもなシステムはHITAC5020)。
1966年	C	PopleがCNDO法を発表する。
1969年	H	Intel社が4004チップ(4bit)を発表する。
1969年	N	米国でARPAネットが発足する。
1969年	S	AT&Tベル研究所でUNIXの開発が始まる。
1972年	N	東大大型計算機センターでTSSの利用が始まる(おもなシステムはHITAC8800/8700に変わる)。
1973年	C	PopleがGaussian 70を発表する。
1973年	C	東大大型計算機センターでCASの文献検索が始まる。
1974年	H	Intel社が8080(8bit)チップを発表する。
1975年	S	Microsoft社が発足する。
1977年	C	AllingerらがMM2を発表する。
1977年	H	Apple IIが発売される。
1978年	H	Intel社が8086(16bit)チップを発表する。
1981年	H	IBM PCが発売される(OSはMS-DOS)。
1982年	H	NEC PC-9801が発売される。
1982年	H	最初のUNIXワークステーションSun-1が発売される。
1983年	C	Stewart & DewarがMOPACを発表する。
1983年	C	日本化学会に情報化学部会が発足する。
1983年	C	化学PC研究会が発足する。
1984年	H	Apple Macintoshが発売される。
1984年	N	JUNET(Japanese University Network)が発足する。
1985年	N	電気通信事業が民営化され, NTTが発足する。このときの法改正がきっかけとなって, 日本でもパソコン通信が盛んになります。
1986年	N	JUNETとKDD研究所が共同で国際電子メール接続を「実験的に」開始する。
1988年	N	WIDE(Widely Integrated Distributed Environment)が発足する。
1988年	C	化学PC研究会がPC-VANにSIG「化学とコンピュータ」を開設する。
1989年	C	日本化学プログラム交換機構(JCPE)が発足する。
1990年	S	Windows 3.0が発売される。
1990年	N	日本研究ネットワーク連合委員会(JCRN)が発足する。
1991年	C	日本化学会がNIFTY-Serveに「化学の広場」フォーラムを開設する。
1991年	N	日本ネットワークインフォメーションセンター(JNIC)が発足する。
1992年	N	インターネットとパソコン通信ホストとの電子メール接続が可能になる。
1992年	C	化学PC研究会が改組され, 化学ソフトウェア学会が発足する。
1993年	N	Mosaicが公開され, WWWの利用が活発になる。
1995年	C	化学ソフトウェア学会がホームページを開設する。また, 論文誌 <i>Journal of Chemical Software</i> の全文ネットワーク公開を試験的に開始する。
1996年	C	日本化学会がホームページを開設する。
1996年	C	QCPE, JCPEがそれぞれホームページを開設する。
1997年	C	日本化学会が欧文誌 <i>Bulletin of The Chemical Society of Japan</i> の全文ネットワーク公開を試験的に開始する。

\*6 今も公開されている最も古いQCPEプログラムは、Hoffmann自身による拡張Hückel法の計算プログラムである(QCPE 30, R. Hoffmann, QCPE 11, 30 (1964))。

\*7 この分野の最も古いプログラムは、1966年に公開されたCNDO/2法のものである(QCPE 91, G. A. Segal, QCPE 11, 91 (1966))。

しかし、この頃に計算機を活用していたのはごく一部の化学者に限られていた。それは計算機の能力が限られていて、大多数の実験化学者の期待

するような結果を与えるには十分ではなかったこともあるが、計算機のインターフェースが不便であり、普通の化学者には使いづらかったこともまた事実である。当時の計算機の使い方は「バッチ・ジョブ方式」と呼ばれ、プログラムやデータのリストを一行分ずつ一枚のパンチカードに打ち込み、これをまとめて計算機のそばにもっていってカードリーダーから入力し、計算を実行させるという方法だった。外部記憶装置<sup>\*8</sup>の容量も限られていた。たとえば1973年の東大の大型計算機センターの計算機では、利用者一人あたり保存可能なファイル容量は、標準でわずか84Kバイトだった<sup>\*9</sup>。

## 展開期(70年代) —— TSSの時代

一方、1970年代はじめには国内でもTSS(Time Sharing System)<sup>\*10</sup>による計算機の使用が可能になり、計算機と対話しながら使うことが可能になった。音響カプラ<sup>\*11</sup>に接続された300bps対応のタイプライター型端末機が、学部あるいは学科に一台といった具合で設置されはじめた。これとほぼ時期を同じくして、*Chemical Abstracts*が計算機で検索可能になり<sup>\*12</sup>、はじめて化学者全体の関心を計算機に向ける契機が訪れた。数学や物理学の先生が中心となって設置した端末を、化学の先生が最も頻繁に使うと一部で皮肉をいわれたのもこの頃である。

やがて端末機はディスプレイ型が増え、音響カプラにかわってモデムが普及はじめた。保存可能なファイルの容量が大きくなり、TSSジョブで入力データを編集し、保存しているプログラムを起動すれば<sup>\*13</sup>大きな計算も行えるようになり、重いカードをもって計算機センターに足を運ぶ必要がなくなった。利用者間の電子メール機能<sup>\*14</sup>や電子掲示板(BBS)機能<sup>\*15</sup>が、熱心なUNIXユーザーの間で利用されはじめた。*ab initio*分子軌道法<sup>\*16</sup>や分子力学法<sup>\*17</sup>が本格的に使われるようになったのもこの時代である。

## 普及期(80年代) —— パソコンの時代

しかし、化学者全体をコンピュータに親しませる契機となったのは、80年代のパソコンの登場である。WordStar<sup>\*18</sup>に代表されるワープロで論文を作成し、ChemDraw<sup>\*19</sup>などで化学構造式を作画するという、現在ではごくあたり前の作業が、最新のトレンドとして注目を集めた。

熱心な利用者は、グラフ作成ソフトウェアや分子モデリングソフトウェアなどを開発し、パソコンが化学者の研究を支援する道具としてなくてはならないものになる時代がすぐそこまでできていることを予感させた<sup>\*20</sup>。

\*8 当時、一般利用者が使用できたのは磁気テープや紙テープであり、計算機自身は磁気ドラムの使用が一般的だった。

\*9 1500～2000行分。1977年までに、500Kバイトまで拡大された。

\*10 計算機のCPU時間を細かく区切って、各単位で別の端末機と接続することにより、計算機と人間の間で対話型のジョブ処理を可能にしたシステム。

\*11 本体のアダプターに固定した受話器を経由して、端末機から得たバイナリ情報と音を、電話回線を通じて計算機に接続したモデルとやりとりすることにより、端末機と計算機との接続を行う装置。モデルに比べて安価だっただけでなく、当時はモデルジャックがほとんど普及していないために、モデルを使うと一回線を犠牲にしなければならなかったのに対して、手元にある受話器をそのまま使えるというメリットがあった。しかしその反面、受話器周辺の騒音に弱いという欠点がある。

\*12 日本では、1973年から東大大型計算機センターで利用できるようになった。

\*13 TSSジョブから、あらかじめ用意したバッチ・ジョブを起動することができた。

\*14 p. 32を参照。

\*15 p. 39を参照。

\*16 Gaussian 70が

QCPEから公開されたのは1973年である(QCPE 236, W. J. Herre, J. A. Pople, QCPE 11, 236 (1973))。

\*17 MM1 / MMPIがQCPEから公開されたのは1976年である(QCPE 318, N. L. Allinger et al., QCPE 11, 318 (1976))。

\*18 MicroPro 社が開発した英文ワープロソフトの先駆的な存在。8bitパソコン時代には唯一の実用的なソフトウェアとして好評を博した。

\*19 Macintosh上で動作する化学構造式作画ソフトウェアの草分け的存在。日本の有機化学者のほとんどが Macintosh をほしがったのは、このソフトウェアを使いたいためだといつてもいい過ぎではない。化学者の使い勝手を考えた独特的インターフェースはほかに例がなく、現在でも人気は抜群である。

\*20 化学, 50, 154(1995)を参照。

\*21 たとえば平良 豊、東大センターニュース, 20(3), 94(1988)など。市販のパソコン通信端末プログラムも盛んに利用された(石田晴久、東大センターニュース, 20(7-8), 95(1988))。

\*22 JUNET, N1, WIDE など。当時のおもな機能は端末エミュレーション(telnet)と高速ファイル転送(FTP)だった。

大型計算機の利用者は、端末専用機のかわりに、パソコンを端末化するソフトウェアを開発した<sup>\*21</sup>。これにより、入力データはパソコンで作成してから計算機に接続して送り込むとともに、計算結果を手元で加工して活用することも可能になった。

パソコンの性能が次第に向上去るにつれて、それまでは大型計算機で行われていた半経験的分子軌道法、分子力学法、あるいはX線結晶解析などのやや大規模な化学計算が、パソコンでも行えるようになりはじめた<sup>\*20</sup>。また、これらの計算プログラムの入出力インターフェースとして活用するソフトウェアがパソコン上で開発されるようになり、使い勝手が大幅に改善された。これにより、それまではこれらの計算化学ソフトウェアの利用に消極的であった一般の実験化学者にも、身近なものに感じられるようになってきた。一方、端末化ソフトウェアは一行編集型から全画面型へと進化したが、そうなると1200bpsが標準の当時の電話回線利用環境がネックとなりはじめた。この問題を解決する手段として80年代の末期に普及はじめたのがLAN(Local Area Network)によるキャンパス単位でのネットワークと、専用線を用いるWAN(Wide Area Network)による遠隔地間のネットワーク<sup>\*22</sup>である。

## そして90年代——ネットワークの時代へ

コンピュータの発達は、これを利用する化学者の増加につながり、便利な道具として認知されるようになってきたことは間違いない。今や、パソコンをまったく使っていない化学者を見つけることはほとんど不可能だろう。しかし、ここまで歴史をたどってみたとき、コンピュータは化学者のライフスタイルを真に変革したといえるだろうか？

確かに計算化学者は、常により高度な計算の可能なプログラムの開発を指向してきた。使いやすい入出力インターフェースが公開され、ひと昔前には限られた人びとしか使っていなかった計算化学ソフトウェアを、実験化学者があたり前に使うようになってきた。これはコンピュータを媒介として培われた、マンマシン・インターフェースの成果といえよう。

また、計算機を使うための手段はパンチカードから端末機、パソコン端末へと変化した。一般的の化学者の手元では、タイプライターのかわりにワープロソフトが、ロットリングのかわりにグラフ作画、構造式などの作画ソフトウェアが使われるようになった。文献検索は大部の *Chemical Abstracts* から CAS Online<sup>\*23</sup>へと移行した。

しかし、見方によっては研究者のライフスタイルはこれによって何も変

わってはいないともいえる。計算し、実験する。論文を書いて投稿する。査読を受け、改訂し、掲載される。学会でかけて研究発表を行い、ディスカッションする。論文誌を読み、文献検索を行う。共同研究者と手紙や電話、電子メールで打ちあわせをする。一つ一つの営みは確かに便利になったには違いないが、研究者のライフスタイルそのものは100年前と基本的に同じではないだろうか。

この意味で、ネットワーク時代以前のコンピュータの発達は、研究者の営みを便利、快適、効率のいいものへと導いたにすぎないといえるのではないだろうか。

## 「インターネットは研究者のライフスタイルに根本的な変革をもたらすか？」

この問い合わせは本書全体を貫くテーマといつてもいいだろう。したがって、この問い合わせへの個人的な回答をここに書くのは適当ではないと思う。本書を読み終えたときにあなたが感じたもの、それがおそらくこの問い合わせへのあなた自身の回答となることだろう。

そのかわりに、次項ではほんの少しだけ時計の針を未来に進めて、21世紀のはじめの普通の研究者の生活を想像してみることにしたい。絵空事はどうでもいいから現状を早く知りたいという人は、遠慮なく21頁へとジャンプされたい。

## 参考文献

- 1) 木原、内田、生田、『分子軌道法』、講談社(1994)。
  - 2) 町田、『分子力学法』、講談社(1994)。
  - 3) 「JCRNセミナー——学術研究とネットワーク」講演要旨集、研究ネットワーク連合委員会(1992)。
  - 4) D. Ichibiah, S. L. Knepper, 棚田訳、『マイクロソフト——ソフトウェア帝国誕生の奇跡』、アスキー出版局(1992)。
  - 5) M. Hall, J. Barry, アスキー書籍編集部監訳、『サン・マイクロシステムズ』、アスキー出版局(1991)。
  - 6) E. Dunphy, 中西訳、『The UNIX Industry』、技術評論社(1992)。
- 多数の文献を提供していただいた故 磯晃二郎先生のご遺族の皆様に深く感謝します。