

## 1. 学生時代

私は学生時代から電子計算機（コンピュータ）を使っていますが、同年代ではめずらしいほうだと思います。特に、工業化学科のようなところでは、コンピュータを使えるのは数人しかいませんでした。きっかけは、研究室の先生が自分ではプログラミングしないのに、学生にやらせることが好きな先生だったためです。その頃（1970年頃）の金沢大学には、コンピュータは理学部にしかありませんでしたので、工学部のあった小立野から15円の路面電車賃を節約して歩いて行きました。兼六園を通り抜けて（その頃は入園無料でした）、金沢大学の正門である石川門を通過して、理学部のある金沢城内に入っていくのは気分がいいものでした。今は、大学は角間キャンパスに移って、城内は「利家と松」の観光地になっています。

コンピュータはNEAC2230だったと思います。大きなラックに基盤が見え隠れしているものすごい機械が一部屋を占領していました。入力には紙テープですので、テレタイプ端末でプログラムやデータを作成しました。できた紙テープを受付に置いて順番待ちになります。空いている時はすぐにコンピュータにかけられます。見ていると、ちょっと恐ろしいお姉さんが紙テープをリーダーにセットしています。ボタンを操作すると紙テープが読み込まれていきますが、紙テープが引っかかって止まることがあります。そのような時にお姉さんがリーダーの横をバンバン叩くと、不思議なことに紙テープの読み込みは再度始まります。この光景がトラウマとなって、今でもパソコンの調子が悪いとその辺を叩く癖があります。あまりお勧めしませんが、動かなくなった古いパソコンにショックを与えて動かして、ゴッドハンドの千田と呼ばれたこともあります。計算結果の出力も紙テープで吐き出されますので、入力ですべてと同じテレタイプ端末に紙テープをセットして打ち出します。これも順番待ちがあるので、待ち時間の中にテープを眺めていると、人間紙テープリーダーの技が身につくようになります。こんなことをしていても、一日で計算できるのは、2、3バッチでした。

工学部に FACOM230 が導入されて、理学部に行く必要がなくなり、入力が紙カード、出力がラインプリンタになっても、シングルタスクのバッチ処理では、それほど効率は上がりませんでした。計算していた内容は、今の電卓で間に合いそうなものですが、その頃は電卓がありませんでした。計算尺のアナログは肌に合わず、醜悪で騒音のうるさいタイガーの手回し計算機は珠算一級の私は我慢できず、かといって大学の研究室ではソロバンは似合いません。というわけでコンピュータなのですが、計算依頼してから結果が戻るまでの時間が長く、おかげで暇を持て余して、ピンポンやテニスはうまくなりました。

修論のテーマは、高分子溶液の拡散曲線から拡散係数分布、さらに分子量分布を求める方法の妥当性を実験で検証することでした。当時はGPCはありませんでした。拡散曲線

から拡散係数の分布を求めるには、片対数方眼紙を使って図的に分割するという研究室伝統の解法がありました。しかし、このような怪しい方法は我慢できなかつたので、乱数を用いたデコンボリューション法を編み出して、理論合成曲線を分割できることを示しました。ポリマーを合成したり分別したりする実験は4年生にやらせておいて、私はデコンボリューションのプログラムをのんびりと完成させました。この頃はFORTRANを使っていましたので、主にDelphiで書く今でもFORTRANが最も得意です。

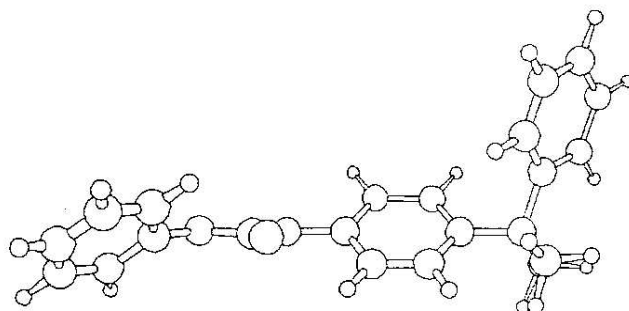
## 2. 出光入社

出光に入ってから、自分はコンピュータが使えるいくせに人に使わせることが好きな上司に恵まれて、いろんなコンピュータをいじくりました。最初の頃は、IBMの計算センターと電話回線に音響カプラーで繋いで使うTSS-BASICで、GPC測定結果から分子量分布等を計算してプロットさせたりしていました。計算料金は、接続時間とCPU時間の両方でカウントされました。一台しかないので順番待ちをすることがありますが、前に使っている人の計算の様子を見てみると、妙に計算時間がかかっているようです。「無限ループの恐れがあるので止めたほうがいい」と忠告したのですが、「そんなはずはない！」と言われて、その自信を羨ましく思いました。後で聞いた話では、やはり無限ループだったようで、「計算できなかったのに10万円の請求が来た(泣)」そうです。この頃のトラウマで、パソコンで文書作成中にちょっと席をはずす時でも、保存・終了する貧乏性が残っています。

## 3. 計算化学とCAMM

計算化学を知ったのは、システム担当をしていた時です。汎用中型計算機IBM4381の面倒を見ていた時に、頼まれてMM2(77)やMOPAC3のコンパイルをしました。FORTRANの微妙な仕様の違いに悩まされましたが、なんとか動くようにしました。CAMMに参加するようになったのもその頃で、第2期からでした。その頃はGUIにいいものがなく、某社のANCHORやMDSSを使ってみました。気に入らないので自分でMODSTARというGUIをつくりました。IBM4381で動くもので、分子表示部分は今でも日本コンピュータ化学会に登録されている、別府先生のNAMOD(旧JCPE, No.056)を組込みました。社内電算システムの名称がSTARだったので、名前はMODSTARにしました。1行編集のZ-Matrixエディタでしたが、結構重宝されていました。図はMODSTARのNAMOD表示です。

それからいろいろあったのですが、省略してWinmostarの開発の頃に飛びます。その頃は、システム担当から分析担当に戻り(表面分析)、計算化学から離れて、CAMMも脱会していました。



続<

「人に歴史あり、CAMMにこの人あり」

－Winmostar 開発秘話（2）－

テンキューブ研究所（元出光興産中研） 千田範夫

## 1. ウィルスから Winmostar

1990 年代初頭は、まだ分子作画・モデリングソフトにいいものがなく、NEC-PC9801 を用いた様々なフリーソフトが公開されていて、私もお世話になったことがあります。その頃ならわかりますが、今のようにパソコン上で動く高性能な分子モデリングソフトが入手できる時代に、わざわざ苦勞して自作するようなことは、自分でも全く考えていませんでした。

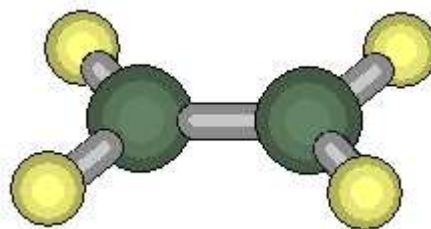
思いがけないきっかけは、2001 年 6 月某日、会社でのことです。同僚（女性）の U 山さんが私のところへ来て、友人の I 上さん（女性）の自宅パソコンがウィルスに犯されたらしいので、相談に乗ってほしいという話でした。I 上さんにパソコンの状況を詳しく聞くと、明らかにウィルスに感染していることがわかりました。

まず、トレンドマイクロのページからダウンロードしたツールで駆除し、一件落着と思われましたが、これで解決していたら、Winmostar の誕生はなかったかもしれません。ところが、たちの悪いウィルスは完全には駆除できず、翌日には活動再開するということが続きました。これを放っておいて感染後 1 カ月も経過すると、BIOS やハードディスクが破壊される恐れがあるようです。仕方がないので、OS を再インストールすることで、ようやくウィルスを消滅することができました。その際に、再インストールに必要なリカバリー用の CD を調べた中に何故か VisualBasic(VB) という開発言語の CD を発見しました。この VB の機能を調べたところ、RS232C 通信のサンプルプログラムを見つけ、試験機 → RS232C データ受信 → 依頼試験管理 DB を行うラボラトリオートメーションシステム (LAS) の構築のヒントを得ました。こうして開発がスタートした LAS で、多くの分析試験機器からの自動データ収集に成功しました。

VB を使ってみると、メニューやボタンを使う Windows の GUI ソフトが簡単に作成できることに魅了されて LAS 開発ではもの足りなくなり、分子表示ソフトを趣味で作り始めることにしました。I 上さんのパソコンは完璧に復旧して、ついでに手持ちのメモリーを増設したりしたので非常に感謝されましたが、私にとって I 上さんは Winmostar 開発のきっかけを与えてくれた女神のような存在です。

Winmostar の表示は、今では 3D 機能もありますが、標準の表示は 2D です。最初は 3D プログラムの書き方がわからなかったもので、まず VB の Circle 文と Line 文で分子を表示してみました。ディスプレイ上の棒球モデルでは、奥から手前の順序で描く Z バッファ法で陰面消去ができます。棒と球が接するところは本当は半楕円にするべきところを半円にしていますが、図のように、ほとんど違和感はありません。最初は半楕円にしないといけないものと思い込んでいましたが、VB では勝手に太線の先を丸くしてくれるので、それを見ていたら、それで問題ないことに気づきました。立体感を表すために、球では 3 回、

棒では2回の重ね描きをすると、3Dに近い棒球モデルになります。これに、回転機能、置換基追加機能、MOPACの起動等をサポートすると、ちょっと使えそうなものになったので、趣味のホームページで公開してみました。ソフトの名前は、前に社内システムで作ったMODSTARにWinをつけて→



Winmodstar : 語呂が悪いので→Winmostar にしま

した。これで、自分でも憧れだったフリーソフト作家になることができました。

## 2. port:3016

公開はしましたが、たいしたプログラムではないし、自分で使う仕事はないし、他人が使うこともあまり想定してはいませんでした。そこに現れたのが、謎の s 2 k 氏が運営する port:3016 というサイト (<http://3016.net/>) です。そこでは Winmostar が「使いやすい」ソフトだと紹介されています。見ず知らずの他人の言うことなので、これで大きい自信とやる気が出て、そのうちシェアウェアにして小遣い銭稼ぎも悪くないかと考えました。

s 2 k 氏というのは、ページをよく見ていくとわかったのですが、C大4年生の佐々木君という学生さんでした。Winmostar の改良を続けて分子軌道表示もできるようになった頃に佐々木君のページを見ると、「フリーで分子軌道表示もできるとはすごい！作者はシェアウェアを目指しているのではないか？貧乏学生としては、それだけは勘弁してほしい。」などと書いてありました。大学4年生ごときに腹の中を見透かされたようで、癪にさわるので、当分シェアウェアにするのはやめました。考えてみると、出光のような会社において趣味とはいえ変なアルバイトで副収入を得るのはまずい、ということもありました。その代わりに考えたのが、学会に参加することでした。趣味の仕事を会社の経費で学会発表するというのは微妙なところですが、いい会社（上司）だったと思います。

## 3. 未踏ソフトと吉田先生

2002年7月の日本コンピュータ化学会春季年会で、広島大学の故吉田弘先生との出会いがありました。お互いに、Molda と Winmostar の作者ということでネット上では知り合いでした。懇親会の席上で、Molda で採択された情報処理推進機構(IPA)の未踏ソフトプロジェクトへの協力を、吉田さんから要請されました。大学の先生からの依頼であれば、会社にも話しやすいのでやってみることにしましたが、マニュアル作成は嫌いなので、佐々木君にやってもらうことを提案して受け入れられました。佐々木君にもまだ会ったことは無かったのですが。吉田さんのテーマは、Winmostar と同じく VB で書いてあった Molda のコードを Java で 3D 化し、主にバイオ機能を追加することでした。私の担当したところは座標変換や MOPAC 計算の部分で、今まで Fortran や VB で書いてきたところを Java で書くことになりました。2002年秋の日本コンピュータ化学会では55歳で学会発表デビューし、その後 CAMM に復帰して、会社では EPMA 装置の担当をしながらも、なんとなく計算化学にも関わることになりました。

「人に歴史あり、C AMMにこの人あり」

－Winmostar 開発秘話（3）－

テンキューブ研究所 千田範夫

## 1. Fortran、VisualBasic、Java、Delphi

Fortran と Basic で育った私にとって VisualBasic(VB)は、いわゆるイベントドリブン（マウスやキーが押されたら何かが始まる）の Windows プログラミングの世界へ導いてくれる画期的な開発環境でしたが、いろいろ問題点が多い言語です。2002 年の未踏の吉田プロジェクトは、Molda を Java で開発することでしたので、私も Winmostar の機能の一部を Java で書きました。その後は全面的に Java に転向することも考えられましたが、Java は嫌いになったので、結局は Delphi に転向することにしました。

Java が嫌いになった理由は、Fortran のソースコードを一文ずつ機械的に書き直しができなかつたためです。

第一に、Java には goto 文がありません。ダイクストラの構造化プログラミングの理論によると、goto 文は有害であるということも私は知っていますし、goto 文を使わないプログラムも書けます。しかし、他人の書いた goto 文の入り混じった古い Fortran のソースコードを goto 文なしに書き直すのは、コードを読んで処理内容を把握する必要があるために困難を極めます。VB や Delphi の場合は、何も考えずに一文ずつ機械的に書き直しすれば、Fortran の枯れたコードが甦ります。

第二に、サブルーチンの引数が Fortran では参照渡しのみですが、Java では値渡しのみです。VB や Delphi 等では参照渡しと値渡しのどちらでも選択可能ですので書き直しは簡単ですが、Java では参照渡しができないので機械的に書き直すことはできません。

結局 Java は、他の言語で当たり前に行っていることができないという重大な欠点があります。Java は、理想に燃えた若造が現実の問題を知らずに、オブジェクト指向という不必要な思考に囚われて仕様を作ってしまった欠陥言語です。たぶん。

## 2. 経験と人生と魂を込めて

2002 年の未踏は、アルバイトプログラマーとして Java で書きましたが、これで Java は嫌いになったので、2003 年は Winmostar を全面的に Delphi で書き直しました。これによって VB の DLL 地獄から開放され、インストーラ不要でコピーするだけ、USB メモリーからでも動かせるという本物のフリーソフトの形になりました。

Delphi に書き直している時に、たまたま観ていたのが「マンハッタンラブストーリー」というテレビドラマです。子供が好きなので、家でテレビドラマは良く映っていても、あまり真剣に観ることは無かったのですが、これにハマってしまいました。ドラマを 2 回以上観ることなど考えられないことだったのですが、これは DVD で 50 回以上観たのでセリフも憶えています。最近ハマった「のだめカンタービレ」でも、まだ 2 回くらいです。「マンハッタンラブストーリー」の主役は、トキオの松岡演ずる風変わりな喫茶店の店長で、普段は無口なのに、店の常連さんに「経験と人生と魂を込めて」と言ってお節介を焼くの

ですが、それがことごとく裏目に出るという変な爆笑ドラマです（宮藤官九郎脚本）。その店長の言葉をもらって、私の名刺には「経験と人生と魂を込めて」と印刷されています。Winmostar の開発は趣味で楽しんでいますので、「経験」はともかく、「人生」とか「魂」を込めて、というのは大嘘です。このドラマで助演女優賞をとったのが、「赤羽ちゃん」を演じた小泉今日子です。アイドルではない小泉今日子の才能に気づいた後の、私のパソコンのデスクトップと携帯の待ち受け画像は赤羽ちゃんになっています。赤羽ちゃんはタクシーの運転手で、その先輩が「イボリー」こと井堀さん（尾美としのり）です。赤羽ちゃんとイボリーのからみは爆笑場面が多かったので、CAMM で井堀さんの顔を見ると、イボリーの思い出し笑いをしているのは、私だけの秘密です。

### 3. 未踏ソフトとスーパークリエイター

Delphi への書き換えに成功して自信が出たので、今度は未踏ソフトに自分で応募することにしました。応募するには、まず採択してくれそうなプロジェクトマネージャ(PM)を、約 10 人の中から選ばないといけません。採択は合議制ではなく、PM 個人の独断と偏見によって決まります。PM（任期 2 年）は大体が情報系の専門家で、自分の得意な分野を公募対象分野にしていますので、化学系ソフトが対象分野に入っている場合はほとんどありません。2004 年はたまたま、情報から芸術、科学なんでも OK の伊知地 PM という変わった人がいて、高倍率にもかかわらず採択してもらえただけでなく、天才プログラマー／スーパークリエイターという称号も頂くことができました。

未踏に参加して一番良かったのは、飲み会が多かったことです。今でも、現開発者のキックオフや報告会には、懇親会があれば参加しています。未踏の開発者は若い情報系の人が多く、プログラマーとしては私の何倍も優秀ですが、他の分野をあまり知らないのもったいない人が多いと思います。ダブルメジャーの重要性を痛感します。

### 4. Tencube/WM

2007 年 4 月に定年退職後はテンキューブという個人事業を立ち上げました。Winmostar では商標が取れなかったのが、千田=1000=10<sup>3</sup>=テンキューブ(Tencube)にしました。商標登録は、インターネットの「自分でできる！」サイトを参考にして、全部自分でやりましたが、出願から登録まで 8 ヶ月半、17 万円の費用（2 分類）がかかりました。

12 月に商標登録できたのと、1 月末のテンキューブの預金残高が 2 万円以下になったので、慌てて 3 月に Tencube/WM の名前で商用版を出しました。

### 5. 開発環境

以前は深夜コーディングが多かったのですが、今はなるべく昼間に仕事するようにしています。開発環境は写真のように前と変わりありませんが、昼間はなかなか調子がでません。

まだまだやり残したことは多いので、昼間でも調子がでるようにビールで勢いをつけることもあります。（未完）

