

CAS ONLINE の始まり

時実 象一*

筆者は化学情報協会（当時化学情報協議会）のインターンとして1977年にCASに派遣され、CASの化学構造検索の初期の研究の手助けもおこなった。化学構造検索は1960年代にその原理が開発されていたが、CAS登録システムの実用化とともに1970年代に入って各方面で研究開発が進められた。CAS ONLINEは1980年の12月に公開されたが、当初はスクリーン検索のみで、構造を作図しての検索は1981年末によく可能となった。構造検索ができる端末機としてはHP2647という高価な機種が選ばれたが、まもなくTektronix4010（PLOT-10）対応の簡易端末機が使われるようになり、次にPCでこの機能をエミュレートするソフトウェアが開発されるようになって普及した。通信には当初ICAS（後にVENUS-P）を使っていたが、1984年には東京と大阪に国際専用線を引き、利用者に開放した。この専用線を使ってオフライン・プリントの印刷もおこなった。CAS ONLINEは当初化学物質ファイルだけだったが、1983年に文献書誌と抄録のCAファイルが追加され化学物質ファイルはREGISTRYと名づけられた。1984年からは両ファイルともSTNの一部となり、今日に至っている。

キーワード：CAS, CAS ONLINE, STN International, 化学構造検索, 化学構造作図, CAS化学物質登録システム, Registry, CA, PLOT-10, 国際専用線

1. はじめに

私が東レ㈱の環境技術研究所（滋賀県大津市）で逆浸透膜の開発を行っていた頃（1976年）、上司が「こんなものが来ているよ」と見せてくれたのがChemical Abstracts Service (CAS) のインターン募集のビラでした。1970年代に入ってCASは化学情報の近代化のため英国やドイツなど海外の化学情報機関との協力を進め、その一環としてそれらの機関からのインターンを受け入れていました。同じ頃日本では小寺明、湯川秀樹、平山健三先生らが、日本化学会に化学情報特別委員会を設置して、いろいろ調査をおこなっていました。その結果、日本での化学情報の振興のため化学情報協議会（現化学情報協会）という組織を設置することになりました。その後いろいろ紆余曲折があったようですが、ようやく専従職員を募集しようということになり、中心となって動いていた大阪大学の千原秀昭教授が、日本のCA抄録者に送ったのがこのビラでした。

当時東レではそれまであった海外留学制度がしばみかけしており、もう会社では海外留学はむずかしいなと思っていたときなので、内心「これだ」と思いました。そうはいってもまだ形もない会社に移るのは大冒険でした。しかし、その時化学情報協会の会長であった、協和発酵創業者で会長の加藤辨三郎氏が、「万一のときは協和発酵であなたを引き取る」とまでおっしゃってくれたこともあり、転職を決意しました。

1976年6月に化情協に入社し、1977年1月から丸1年、米国オハイオ州コロンバスのCASにインターンとして勤務しました。その時の費用の半分は当時東京大学大型計算機センターの所長であった島内武彦先生のご努力で科学研究費から出たとうかがっています。

コロンバスでは研究部に所属しました。CASにおけるさまざまな業務、たとえば雑誌の入手、抄録作成から化学物質の登録までさまざまなことを勉強しました。当時CASはCAS登録システムのデータベースの活用をいろいろ研究しているところで、オンライン化学構造検索の開発も模索している時期でした。たとえば、オンライン化学構造検索にはどんなスクリーン（索引）が必要か、という研究もやっていました。CASでは当時DIALOGで提供されていた化学物質名称ファイルCHEMNAMEを使った受託検索サービスもおこなっており、そこで集めた検索質問を整理・解析することも私の仕事のひとつでした。

CASから戻ると化学情報協会のスタッフも少し増えていました。事務局長は化学会の事務局長であった神森大彦氏が兼務、スタッフとしては後に山形大学に移った工藤喜弘氏のほか、廣田勇二、佐藤明子、谷本謙一各氏が最初のメンバーです。日本科学技術情報センターを退職された稲葉安養子氏も手伝われていました。当時CASが発行していたChemical Abstractsの書誌事項とキーワードを取めた磁気テープCA Condensatesを使ったSDIサービスを化学情報協会では始めることになったので、しばらくはその仕事をしていました。そうしているうちに、CAS ONLINEが始まったのです。

*ときざね そういち 愛知大学文学部図書館情報学専攻

〒441-8522 愛知県豊橋市町畑町1-1

Tel.0532-47-4467

(原稿受領 2009.7.7)

2. CAS 化学物質登録システム

CAS ONLINE の話をするにはまずその元になっている CAS 化学物質登録システムの話をする必要があります。

2.1 CAS 化学物質登録システム

CAS は長年世界の化学文献に記載されている化学物質を集めて化学物質の索引 Chemical Substance Index (当時は Subject Index) を作成していましたが、これをコンピュータ化しなくてはならないと考え、Harry L. Morgan を研究部長として化学構造のコンピュータ化の研究をおこないました。米国国立化学財団 (National Science Foundation: NSF) から総計 2,300 万ドルもの助成も受けて 1965 年に化学構造に基づき化学物質を登録するシステム CAS 化学物質登録システムを構築しました²⁾。

2.2 化学構造検索の歴史³⁾

CAS 登録システムができた時には、化学構造結合表を用いた化学構造検索の原理 (トポジカル検索とも呼ばれる) はすでに知られており、1965 年には Gluck が Du Pont 社で検索実験をおこなっています⁴⁾。しかし、当時のコンピュータの力ではそれを実用化するのは困難でしたので、実用的な方法としてフラグメント・コード法や線形表記法がまず実用化されました。この辺の事情については固武さんがすでに書かれております⁵⁾。フラグメント・コード法は今でも化学特許検索の分野で使われています。また CAS の組織的名称法を用いた化学物質検索が 1970 年代後半には DIALOG の CHEMNAME ファイルなどでおこなわれていました。

オンラインの化学構造検索が実用化されたのは、Feldmann らが NIH で開発した Chemical Information System (CIS)⁶⁾ が一番早いのではないかと思います。化学構造検索では最終的には質問式の化学構造とファイルの化学構造を直接重ねてみて一致するかどうかの確認が必要ですが、その前に不要な構造を除く (または必要な構造だけを取り出す) ことが必要で、そのためにスクリーニングということをおこないます。これは一種の構造索引ともいうことができ、前述のフラグメント・コードと同じ考えです。ただしフラグメント・コードは人手で索引するのに対し、スクリーンは化学構造から自動生成するところに特徴があります。スクリーンとしては、スイスのパーゼルにあった製薬会社 3 社 (Ciba-Geigy, Hoffmann-La Roche, Sandoz) の共同情報機関 Basel Information Center for Chemistry (BASIC) が CAS 登録システムのデータを用いて開発したものが有名で、これは CASONLINE のスクリーンの原型となりました。またフランスの Dubois 教授は独自に DARC System⁸⁾ という索引を考案し、これは Questel DARC の起源になっています。

このような動きの中で CAS は研究開発を進めていましたが、1980 年になって、Dubois 教授の DARC がいち早く CAS 化学物質登録システムのデータを用いた構造検索

サービスの開始を発表しました。そこで本家の CAS も開発を急ぎ、同じ年の 12 月に公開にこぎつけることができました。

3. CAS ONLINE の開始

3.1 CAS ONLINE の開始

化学情報協会はすでに CAS と協力協定を結んでいたもので、1980 年 12 月 2 日 (大阪・大阪科学技術センター) と 4 日 (東京・学会センタービル) で相次いで CAS ONLINE 発表会を開催しました。化学情報協会の会員や Chemical Abstracts 購読者に案内を出したところ、多数の出席者があり、関心の高さが裏付けられました。幸いわが国ではその時点では Questel の代理店が存在せず、化学情報協会としては CAS ONLINE を「世界最初の化学構造検索システム」として宣伝しました。当初の営業担当は佐藤明子氏でした。

3.2 HP2647 端末機

発表時点での CAS ONLINE の使い方は次のようになっていました。まず探したい化学構造の特徴をあらわすスクリーン番号をスクリーン辞書からさがします。スクリーンとしては環の特徴や、原子や結合のつながりの特徴などをしめしたものが 4,000 くらいありました。これらを AND や OR で組み合わせて検索をおこないます。検索結果は化学構造式で表示されます。ただし化学構造式を見るためには Tektronix 4010 (PLOT10) という機種に対応したグラフィック端末機が必要でした。なおその化学物質が記載されていた文献の CA 抄録番号が最近の 10 件まで表示されましたが、書誌事項は表示されなかったため、その文献の内容を知るには冊子体の CA か他のオンライン・システムで調べる必要がありました。文献数が 10 件を超した場合にまた別の方法で検索しなくてはなりません。

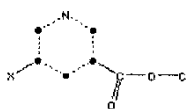
スクリーン検索では検索結果を十分絞りきれないので、ノイズが多くなる場合があつて問題でした。化学構造式を使って正確な検索ができるようになったのは 1981 年 12 月でした。そのための化学構造式作図には Hewlett-Packard 社の HP2647 と呼ばれる端末機を使い (図 1)、カーソルまたはタブレットとペンを使って作図しました。まだマウスが普及する前で、二次元の図を書くのは容易でなかったのです。この装置はプリンタ、作図用のタブレットを含めると 450 万円もする高価なものでしたが、先進的なユーザはこれを購入し、最終的に 10 台ほどが使われたのではないかと思います。

HP2647 で構造作図するには、まず磁気テープまたはフロッピーディスクから BASIC のプログラムを読み込み、それから CASONLINE に接続して、STRUCTURE コマンドを入力してからおもむろに作図を始めます。作図画面は図 2 のようなものでした。

装置が購入できないユーザのために、当協会の装置を公開するとともに、新大阪駅前の横河ヒューレット・パッカー (株) 大阪支店にお願いして、同社の装置を関西のユーザに



図1 構造検索に用いられた HP2647A, 画面の下に磁気テープ・カセットが見え、右に作図用タブレットも写っている (1982年)



```

CREATE
* REPLACE
RING3 Unspec Bond
RING4 Singl(E/W)
RING5 Single(E)
RING6(N) Doubl(E/N)
C * Double(E)
H Triple
N Normalized
O Chain
P Ring
S Ring/Chain
F Add Bond
Cl Spiro
Br I
I DISPLAY
X(HALO) MOVE
NH DELETE
OH NEW FRAG
M(Metal) ROTATE CW
NM(NonMet) ROTATE CCW
R DETAIL
O HELP
Id DELETE/END
Gk END
DRAW
STACK
  
```

図2 HP2647の構造作図画面例

使わせていただきました。

この時同時にアルファベットの文字で構造を描くテキスト構造入力方式 (TSTRUCTURE=Text STRUCTURE) も発表されました。これは前述 CIS の SANSS 構造作図方式と類似でした (図3)。これなら当時 DIALOG の検索などに使われていた Silent 700 などの文字型端末機が使えたのでこの方式が急速に普及することになりました。ただしこの場合、検索結果の構造図は表示できなかったので、こ

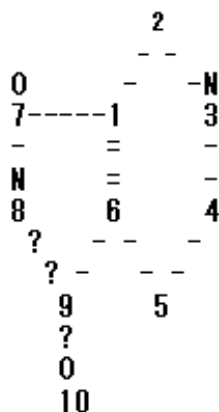


図3 当初のテキスト構造作図例

れはオフライン出力して郵送してもらう必要がありました。

3.3 PC用ソフトウェア

1984年の4月に構造作図コマンドがすべての端末機タイプに対して STRUCTURE に統一されました。TSTRUCTURE コマンドはしばらく並行して使われてきましたが1985年10月に廃止されました。また文字を使っての回答構造表示が可能となり、文字型端末機しか持たないユーザもその場で化学構造が見られるようになりました。さらに新しい STRUCTURE コマンドにおいては HP2647 だけでなくタイプ2型 (PLOT-10 対応) グラフィック端末機でも質問構造がグラフィック表示されるようになりました。その結果、グラフィック端末機としての HP2647 の優位性はほとんどなくなり、この後は汎用のグラフィック端末機、すなわちタイプ2の端末機 (パソコン) が急速に普及していくことになりました。さらに1985年末にはタイプ2型端末機でもメニュー作図が使えるようになりました。HP2647 端末機は1984年末で製造中止となり、後継機も発売されませんでした。わが国での HP2647 のユーザも1989年末にはすべてタイプ2型端末機 (汎用パソコン) へ移行しました。

当時グラフィック専用端末機としては Textronix のほか日本電算機(株)の NJC シリーズなどがありました。しかし、このころ日本でもパソコンが普及時代に入り (有名な PC-9801 は1982年に登場)、パソコン上で Textronix 4010 型のグラフィックを表示するためいくつかのソフトウェアが開発されました。これらには日本マイコン(株)の IF800 用ソフト、大阪情報システム(株)の IBM5550 用ソフト、協和醗酵(株)の PC-9801 用ソフトなどがありました (図4)。



図4 展示会での CAS ONLINE のブース, 手前の PC は沖電気の if800, 奥のは IBM5550 である (1984年)

3.4 通信

CAS ONLINE 開業当初の通信回線としては KDD の ICAS サービス (のちに VENUS-P サービス) を利用しました。しかし、これらは使いよいとはいえず、価格も高かったため、DIALOG の代理店などは独自に国際専用線と呼ば

れる回線を確保し、これをユーザーに利用させていました。CAS ONLINEでもサービス向上のためCASと化学情報協会の方に国際専用線を設置することが検討されていました。1982年9月には神森事務局長がKDDとの最初の相談をおこなっています。その検討中に、後述のようにシステムがCAS ONLINEからSTNへ発展することとなり、その結果接続対象がCASだけでなくFIZ Karlsruheも含むこととなったため、KDDとの交渉は複雑となりました。またSTNへの参加そのものに郵政省やKDDが興味を示していたこともあったので、専用回線を引くまでには紆余曲折がありました。

この専用線はようやく1984年3月末にコロンバスー東京ー大阪間に設置されました。専用線の機器としてはDCA-355を用い、大阪に子機を置きました。大阪の機器(DCA, モデム, 電話)は当初横河ヒューレット・パカード社に置かせていただいていたのですが、1984年7月より回線機器の購入先である理経(株)に設置させていただきました。東京と大阪に1200bps (bit per second), 300bpsの電話回線をそれぞれ数本用意しました。当初東京ー大阪間の同期がうまくいかず、ノイズが多く発生して苦労しました。この問題は後に大阪にもDCA-300を設置することで解決しました。ノードが東京、大阪のみでしたから、遠隔地のユーザ、あるいは専用線だとノイズが入りやすいユーザは引き続きKDDのVENUS-Pを使用してもらいました。なお当初回線費用は有料で提供する予定でしたが、その後STNの計画が具体化してくると「すべての国際通信料金は無料」という方針に変更されました。

これは当然ユーザにとってもたいへん便利なものですが、営業事務上も大変革でした。それまでCASとのコミュニケーションは手紙、テレックス、または電話でしたが、専用線が開通してからは電子メールが中心となり、迅速で綿密なコミュニケーションが可能となりました。もっとも当時の電子メールは今と異なり、CASのコンピュータの中でのメールで外部とは通信できませんでしたが、それでもその便利さに感動したものでした。

また、この専用線を利用して検索結果のオフライン・プリントを東京で印刷することを計画しました。当協会が管理していたHITACのコンピュータでデータを受け取ることとし、研究部が必要なソフトウェアを開発しました。印刷はXEROX 9700 レーザープリンタでおこなうよう指定されていたので、富士ゼロックス(株)と交渉し、印刷委託することとなりました。毎日同社がテープを受け取って印刷し、同日中に同社より発送する方式となりました。通常の配送は速達でしたが、量の多いオフライン・プリントは宅配便で配送しました。この方法は1986年より開始しましたが、大変ユーザから歓迎されました。東京近郊の場合、注文から2日後にはほとんどのユーザがオフライン・プリントを入手できました。競合するDIALOGではオフライン・プリントは米国から郵送するため5~6日かかっていたようです。オフライン・プリントの郵送先を間違えないよう、宛名と内容の照合には注意しました。それでも2社

分の回答書をまとめて1社に送るようなトラブルは全部で2-3回発生したように覚えています。その際はとにかく平謝りでした。

3.5 CA ファイル

1982年3月より、従来の化学物質情報、CA抄録番号に加えて、最新10件のCAの書誌事項が表示できるようになりました。1983年4月には回答に最新10件のCA抄録も加わりました。これまでCA抄録はTOXLINEの一部としてオンラインに載っていたものがありましたが、1975年以降(一部1967年以降)の360万件もの抄録がオンラインに載ったのは初めてでした。

1983年7月、CAS ONLINEのコマンド体系に大幅な変更がありました。これはCAS ONLINEに文献ファイルを載せる準備でした。CASでは文献ファイル用のシステムを自社開発するか外部から導入するかいろいろ検討したのですが、結局自社開発に落ちつきました。これにともない従来の構造検索ファイルはREGISTRYファイルという名前となりました。この時確立したコマンド体系が現在もほぼ変更なくSTNで使われています。

1983年12月よりCAS ONLINE(その1ヵ月後にはSTNとなった)にCAファイルが加わり、Chemical Abstractsの文献情報が検索できるようになりました。CAファイルは他サービスのCA Condensatesと違ってChemical Abstractsの抄録が入っていたので、大きな反響を呼びました。抄録ファイルをSTNにだけ搭載したことについては、米国ではDIALOGを中心として強い抗議があり、一部ユーザからの批判もありました。しかし、わが国ではユーザからの批判はほとんどなかったように記憶しています。なお抄録テキストの検索は1985年10月より可能となりました。

4. その後の展開

CASと西独のFIZ4 (Fachinformationszentrum Energie, Physik, Mathematik GmbH, のちFIZ Karlsruhe とよぶ)は1982頃からオンライン・サービスの協力について話し合いを続けてきました。その合意が1983年に成立し、これに基づいてSTN Internationalプロジェクトが開始されました。これは複数国にまたがる分散型オンライン情報検索システムのネットワークで、各センターは対等の立場で協力することになっていました。ただし必要なソフトウェアはCASが低料金をライセンスしました。この協定調印にともない、CAS ONLINEは1984年1月よりSTN Internationalシステムの一部となりました。また検索ソフトウェアの名称がMessengerと命名されました。化学情報協会は暫定東京センターとして営業に当たりました。

STN Internationalは米、欧、アジアの3大陸にセンターを持つものとされ、日本にもセンターを設置することが当初から計画されていました。この目的で1984年3月にCASのJames V. SealsとNick A. FarmerおよびFIZ KarlsruheからClaus von Consbrudhが訪日し、日本科学

技術情報センター (JICST, 現科学技術振興機構: JST) の代表と交渉を開始しました。その結果, 1987年11月30日に正式の STN 東京センターが JICST によって開設され, STN 用のコンピュータも設置されてサービスを開始しました。化学情報協会は STN 運営関係の業務 (利用者管理, 専用線の維持・管理, オフライン・プリントの印刷・発送, STN の技術資料の作成など) を JICST に譲り, CAS ONLINE などデータベース中心の業務に移ることとなりました。ただし STN の顧客サービス (受付, 請求・集金) や講習会, ヘルプ・デスクは従来通り継続することになりました。JICST を引き継いだ JST は東京センターを 2006年3月まで運営しましたが, 現在はまた化学情報協会が STN の窓口となっています。

5. おわりに

CAS ONLINE の導入時, 化学情報協会にいてその日本の普及に関わることができました。これはちょうど日本に PC が普及する時期とも重なり, 多くの経験ができたことは大変幸運だったと思っています。なおこの原稿を事前に読んでいただいた CAS の Janice Mears 氏に感謝いたします。

参 考 文 献

- 1) 日本化学会化学情報特別委員会. 化学情報—問題点の現状と将来. 南江堂. 1971, 152p.
- 2) David W. Weisgerber, 時実象一訳. hemical Abstracts Service のあゆみ—第2回—ケミカル・アブストラクツ・サービスにおける情報システムの発展—CAS 登録システムから STN International へ. 薬学図書館. 1998, vol.43, no.4, p.428-434.
- 3) Robert V. Willams, Mary E. Bowden, 時実象一 (訳, および補筆). 化学情報の歴史. 薬学図書館. 2000, vol.45, no.2, p.129-148.
- 4) D. J. Gluck. A Chemical Structure Storage and Search System Developed at Du Pont. J. Chem. Doc. 1965, vol.5, no.1, p.43-51.
- 5) 固武 龍雄. オンライン検索以前を振り返って. 情報の科学と技術. 2009, vol.59, no.8, p.441-418.
- 2) 関 正弘. 情報検索応用講座⑥ 化学, 薬学情報の機械検索. ドクメンテーション研究. 1971, vol.21, no.3, p.94-100.
- 6) Richard J. Feldmann. Interactive Graphic Chemical Structure Searching. Computer Representation and Manipulation of Chemical Information. W Todd Wipke, et. al. ed. John Wiley & Sons. 1974, p.55-91.
- 7) W. Graf, H. K. Kaindl, H. Kniess, B. Schmidt, R. Warszawski. Substructure Retrieval by Means of the BASIC Fragment Search Dictionary Based on the Chemical Abstracts Service Chemical Registry III System. J. Chem. Inf. Comput. Sci., 1979, vol.19, no.1, p.51-55.
- 8) Jacques-Emile Dubois. DARC Ssystem in Chemistry. Computer Representation and Manipulation of Chemical Information. W Todd Wipke, et. al. ed. John Wiley & Sons. 1974, p.239-264.

■ 用語解説 : CA Condensates ■

Chemical Abstracts の書誌事項とキーワードを収録した磁気テープサービスで, 1本のテープに1週間分約8,000件の文献情報が入っていた。これは大手化学会社で社内の文献速報サービス (SDI) に使われた

ほか, 日本では東京大学大型計算機センターの TOOL-IR や科学技術情報センターの JOIS, 海外では DIALOG や ORBIT でオンライン検索に用いられた。抄録情報は収録されていなかった。

■ 用語解説 : PLOT-10 ■

Tektronix 4010 という端末機に使われたベクトル図形作図用コマンドで, 画面上の座標を指定して線をひくことができる。1980-1990年代の化学構造表示

用に広く使われ, PC でもこれをエミュレートしたソフトウェアが数多く開発された。

■ 用語解説 : マウスの歴史 ■

スタンフォード研究所 (Stanford Research Institute: SRI) の Engelbart がマウスを発明したのは1968年である (<http://sloan.stanford.edu/mousesite/>)。最初に商業システムで使われたのは Xerox 社の Star シ

ステムで1981年のことである。しかしマウスが普及したのは Apple 社の Macintosh (1984) が発売されてからであった。

Series: Footsteps of information retrieval service pioneers (18) Early days of CAS ONLINE. Soichi TOKIZANE (Library and Information Science, Faculty of Letters, Aichi University, 1-1 Machihata-cho, Toyohashi, Aichi 441-8522 JAPAN)

Abstract: The author spent one year at CAS as an intern sent from JAICI in 1977 and was involved in the early study on structure searching. The principle of structure searching was already known in early 1960s, but practical systems were developed in 1970s after the CAS Registry System was in operation. CAS ONLINE was released in December 1980, which was searchable only by screen numbers. Real structure searching by drawing query structures became possible in December 1981, but using an expensive terminal called HP2647. Soon structure drawing became available for conventional terminals equipped with PLOT-10, and then for PCs with PLOT-10 emulators. ICAS (later VENUS-P) was used to communicate with the host at first. A dedicated line was installed in 1984. It was used to print search results offline, too. CA file, a bibliographic file with abstracts, were added to CAS ONLINE in 1983, and the structure file was named as REGISTRY. Both became a part of STN in 1984.

Keywords: CAS / CAS ONLINE / STN International / structure searching / structure drawing CAS Chemical Registry System / Registry / CA / PLOT-10 / international dedicated line