

化学構造データ変換プログラム MOLCONV の開発 － NEC 98 から IBM PC への移植 －

速水 健一

仙台電波工業高等専門学校 電子工学科
〒 989-3124 仙台市青葉区上愛子北原 1 番地

(Received : September 16, 1997 ; Accepted for publication : November 5, 1997 ; Published on Web : January 27, 1998)

化学構造データ変換プログラム MOLCONV を IBM PC および、その互換機上で動作するように NEC 98 用から移植を行った。移植には、米国 Microsoft 社の Microsoft Visual Basic の IBM PC 用 MS-DOS 版を用いた。近年、Microsoft Windows の普及に伴い、IBM PC および、その互換機の利用者が、日本にも増えてきた。また、従来からの BASIC アプリケーションの資産継承という目的からこの移植を試みた。移植に必要な IBM PC 用の Visual Basic は、電子メールと FAX を利用して米国から輸入したが、入手価格や時間の面で利便があった。プログラムの移植にあたっての注意点は、日本語処理に関する関数やステートメントを置き換えることが、そのほとんどであった。

キーワード : File converter, Data format, Visual Basic, MS-DOS, Transplantation, MOLCONV

1 はじめに

著者は、さまざまな化学アプリケーションソフトウェアで用いられている化学構造データファイルを他の形式に変換し、ソフトウェア間でそのデータを共有するための一方策として MOLCONV を報告してきた [1, 2]。

近年、Microsoft Windows の普及に伴い、日本にも IBM PC および、その互換機の利用者が急速に増えてきた。日本で発売されている Microsoft Visual Basic の日本語 MS-DOS 版は、NEC PC-9801 シリーズ用 (VB 98) が中心で、IBM PC (DOS/V) 用 (VB IBM) は販売されていない。日本の Microsoft 社が、米国で発売されている VB IBM を輸入して、その販売を行ったこともあった。この製品は英語だけでなく、ヨーロッパを中心とする 1 バイト文字系の国々用の製品が 1 つのパッケージになったものである。どの国の言語でインストール行いたいのかを選択できるようになっている。この製品の日本での発売は、一時的であり、著者を含めた多くの者にとって入手することが難しい製品であった。そこで、Windows 版へ移植してしまうという方策も考えられるが、プログラムをイベントドリブンなアルゴリズムに設計仕直さなければならな

い。しかし、MS-DOS 版にはイベントドリブンのウィンドウプログラムが作成できる一方で、従来からの BASIC のような手続き型言語との互換性が残されていて、資産継承という点から見逃すことのできない製品である。

今回、VB IBM (Figure 1) を入手し、VB 98 から移植を行うことができた。そこで、その入手、移植、そして、新たに作成した IBM PC 用の MOLCONV について報告する。

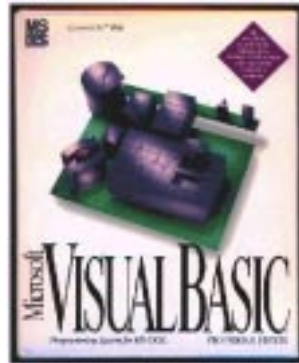


Figure 1. 米国の IBM PC 用 Visual Basic

2 IBM PC 用 MS-DOS 版の入手

日本 Microsoft 社が米国社の製品を販売していたので、VB IBM の注文を行った。しかし、1995 年の夏の時点で、VB IBM の日本 Microsoft 社からの出荷は終了していた。その年の秋に名古屋大須と東京秋葉原の各店頭で VB IBM を探し、大須で VB IBM の Professional 版をわずかに 1 セット確認することができた。価格は、60,000 円弱と高価であった。

日本 Microsoft 社の保証は受けられないが、製品の中身自体は本来の米国製と変わらないので、米国から購入することを検討した。購入には、電子メールや FAX でやり取りが行える通信販売 [3] を利用した。まず、電子メールを出して、製品リストやその価格、支払い方法についてのやり取りを行った。支払いはクレジットカードを利用し、最終的に FAX を利用して申し込んだ。製品は 1 週間以内に届き、30,000 円強の価格で購入できた。今回の場合、このように、時間的にも價格的にも日本で購入するよりかなり有利であった。現在は、円があまり強くない、日本では購入者や機関によっては学割が可能である。また、その後にオープンプライス制も導入されている。しかし、それでも時間や價格面で不利なく入手できることがわかる。また、この方法を利用すれば、英語版の入手など米国にしかない製品を購入することができる。

3 IBM PC 用 MS-DOS 版への移植

VB 98 と VB IBM との違いで移植上問題となるのは、VB 98 と VB IBM の間でお互いに関数やステートメントである。両製品のリファレンスマニュアルを参考に、これらを Table 1 にまとめた [4, 5]。その多くは、頭文字 K ではじまる日本語処理に関するものであった。

基本的には、ANSI 文字を処理することを前提に、ファイル入出力や文字列処理に関するものは、別なものへ代用あるいは、省略できた。たとえば、INPUT¥は、INPUT\$へ、KINSTR は、INSTR へ置き換えることになるが、今回の場合には、こういったことは、ほとんど必要なかった。それは、多くの場合、文字数よりバイト数を考慮するだけで十分だからである。また、日本語文字のほとんどは、全角文字で、表示したときに半角文字 2 バイト分かつ半角文字 2 文字分を必要とし、バイト数と文字数が一致するためである。しかし、移植するプログラムによっては、これがもっとも大変なことと思われた。逆に、はじめから 2 バイト系文字を用いていないプログラムの移植は、非常に容易となることが予想できた。

Table 1. VB 98 と VB IBM の関数やステートメントの違い

カテゴリ	機能	関数、ステートメント、メソッド	
		VB 98 にのみある	VB IBM にのみある
グラフィックス	色	-	QBCOLOR
ファイル入出力	ファイルからの読み出し	INPUT¥	-
文字列	文字列操作	KINSTR	-
		KMID\$	-
		KEXT\$	-
	文字列の長さ	KLEN	-
		KPOS	-
	文字コード取得	JIS\$	-
		KTN\$	-

注) VB IBM の Reference マニュアルの Language Summary には、VB 98 と同じように、関数、ステートメントやメソッドの一覧がある。ここには、ENVIRON\$関数のみで、ENVIRON ステートメントが欠けているが、これはミスプリントである。各関数やステートメントの具体的な説明を記述している A-Z Reference には、VB 98 と同じように ENVIRON ステートメントに関する説明が記述されている。

PRINT ステートメントによる出力やファイル中に用意した日本語文の内容は、移植に際して変更することなくコンパイルできた。VB IBM やコンパイルした MOLCONV は、US モードで利用する必要があった。日本語モードで利用した場合、表示内容が背景色と同じ色となり目で見えて確認できなかった。また、MOLCONV 実行時に /L:1 とすれば、その日本語を出力することもできたが、出力した日本語文字は US モードにすると文字化けしてしまった。しかし、どちらの場合も出力内容を一度ファイルに保存して日本語モードでファイル内容を読み出すことで日本語文字でも出力は、正常に行われていることが確認できた。

この他には、SCREEN ステートメントの引数の持つ意味が異なる点を考慮する必要があった。今回、移植を行った MOLCONV は、テキスト表示とフォーム表示のみを行うため変更は容易であった。グラフィック表示を行うアプリケーションの移植を必要とする化学者は多いと考えられるので、SCREEN ステートメントの違いについて Table 2 から Table 5 にまとめた。mode% は、VB 98 と VB IBM の両者に共通するもの 0, 1, 2 がある (Table 3)。0 は、テキス

トのみのモードであるが、1, 2ではグラフィックスモードとなり両方で解像度が異なるので移植に注意が必要である。paletteswitch% あるいは colorswitch% は、この名の通り両者で異なる (Table 4)。このことから VB IBM の場合、VB 98 の palette-switch% に相当する使用するパレット数の設定がない。これは、VB IBM に多数用意されている mode% の種類と実際に装着されているグラフィックアダプタの種類組み合わせで決まる (Table 5)。

Table 2. VB 98 と VB IBM の SCREEN ステートメントの違い (書式)

VB 98 の場合	
SCREEN mode%[,paletteswitch%][,activepage%][,visiblepage%][,noinit%]]]	
VB IBM の場合	
SCREEN mode%[,colorswitch%][,activepage%][,visiblepage%]]]	

Table 3. VB 98 と VB IBM の SCREEN ステートメントの違い (mode%に指定可能な値)

	mode%
VB 98 の場合	0, 1, 2, 81, 82, 84, 87, 88
VB IBM の場合	0, 1, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13

Table 4. VB 98 と VB IBM の SCREEN ステートメントの違い (paletteswitch%と colorswitch%)

VB 98 の場合		
paletteswitch%	mode%が 1,2,84,87,88 のとき	
0	同時表示可能な最大色数	
1	16 色中 16 色	
2	64 色中 16 色	
3	4096 色中 16 色	
VB IBM の場合		
colorswitch%	mode%が 0 のとき	mode%が 1 のとき
0	色なし	色あり
0 以外	色あり	色なし

COLOR ステートメントやメソッドについては、変更なしに VB 98 の場合と同じ色を表示することができたため、変更しなかった。COLOR 1が青色、2が緑色、4が赤色である。N88-日本語 BASIC(86) と比べた場合には、2と4の意味が逆になっている。

操作キーの割付についても変更は、行わなかった。しかし、NEC 98 とでは、キーの呼び名が異なるのには、注意が必要である。たとえば、GRPH は Alt、ESC は End などである。

Table 5. VB 98 と VB IBM の SCREEN ステートメントの違い (mode%による表示の違い)

mode%	paletteswitch% (colorswitch%)	activepage%/visiblepage%	pixels	Display/Adapter
VB 98 の場合				
0, 81	-	-	-	text(フォームも text, noinit%に 1 を設定すると出力結果を画面に残したまま MS-DOS の画面にもどる, フォームを使わない場合のデフォルト設定値)
82	-	-	-	text(フォームは graphics, フォームを使うものデフォルト)
1, 87	0-3	0-1	640x400	graphics(text も graphics 画面に表示, フォームは表示不可)
2, 88	0-3	0-1	640x400	text, graphics(スーパーインポーズ, フォームは text)
84	0-3	0-3	640x200	text, graphics(スーパーインポーズ, フォームは text)
VB IBM の場合				
0	0, 0 以外	0-	-	text (フォームも text)
1	0, 0 以外	0-	320x200	graphics(CGA,EGA,VGA,MCGA 低中解像度)
2	-	0-	320x200	graphics(CGA,EGA,VGA,MCGA 低中解像度)
3, 4	-	0-	-	graphics(Hercules や 2 以外の Adapter)
7, 8, 9	-	0-	-	graphics(EGA,VGA 中高解像度)
10	-	0-	640x480	graphics(EGA,VGA 白黒高解像度)
11, 12, 13	-	0-	640x480	graphics(VGA,MCGA 高解像度)

4 移植結果

プログラムのコンパイルと実行テストは、富士通社製 FMV499 上で行った。また、MS-DOS の US モード (COUNTRY=1) で行った。Figure 2 に示す画面が現れ、MOLCONV の 98 版に添付されている日本語を含んだサンプルマクロや [2] での実行例について同様の動作結果が得られた。

ソースコード中に日本語文字列を残したまま、コンパイルを行ったにも関わらず、EXE ファイルのサイズは、411,126 バイトから 372,704 バイトと 1 割程度縮小された。

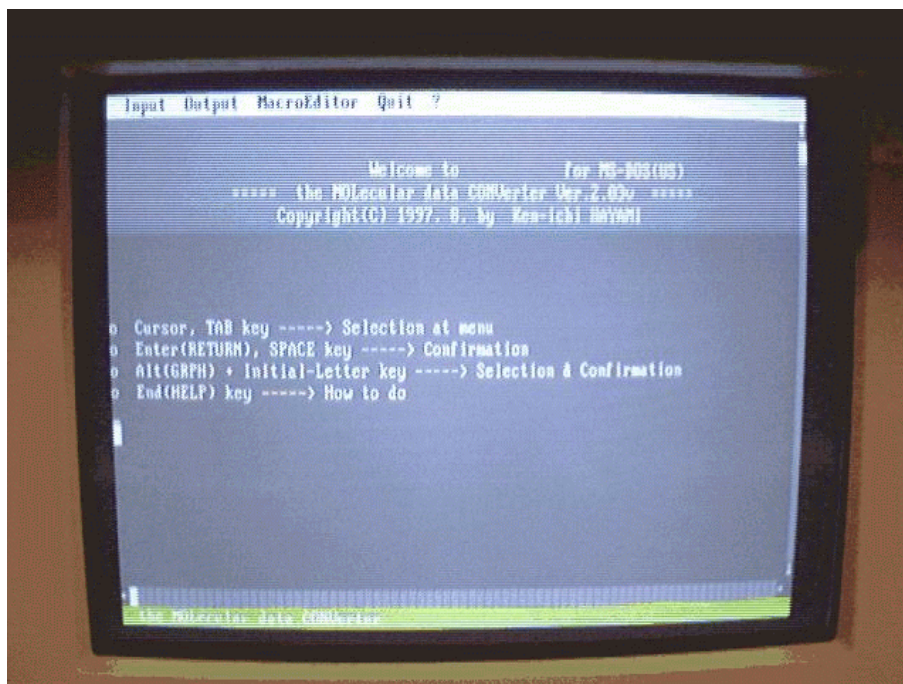


Figure 2. 起動画面

Windows95 (日本語版)の中からは、MS-DOSプロンプトをウィンドウ内で実行し、コマンドライン上で US とタイプして US モードに切り替えることで利用できた。(Figure 3)。

5 まとめ

今回、MOLCONV を NEC 98 から IBM PC および、その互換機上で動作するように移植を行うことができた。移植に必要な IBM PC 用の Visual Basic は、米国から購入したにも関わらず、入手価格や時間で利便があった。プログラムの移植にあたっては、日本語処理に関する関数やステートメントについての置き換えが、そのほとんどであったが、特に問題とはならなかった。実行は、US モードに切り替えることでできた。US モードでは、日本語文字が化けてしまうが、日本語の内容自体は正確に出力されていた。移植されたプログラムは、機能を損なうことなく、サイズは 1 割程度縮小された。

過去に NEC 98 用に開発された手頃で有用な化学アプリケーションは多い。今回の結果から、これらの IBM PC 版への移植や Windows から他言語製品の利用など資産継承の可能性を示す

ことができた。

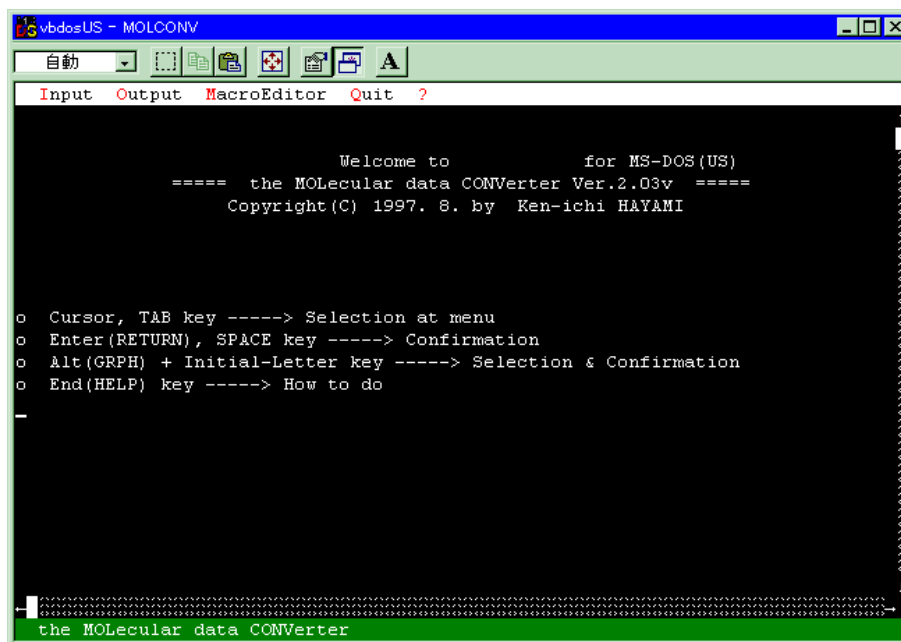


Figure 3. Windows95 内での起動画面

米国からのソフトウェアの入手や移植にあたってのご助言を鳥羽商船高等専門学校の作田誠先生よりいただきました。ここに深く感謝申し上げます。

参考文献

- [1] 速水 健一, *J. Chem. Software*, **3**, 11-24 (1996).
- [2] 速水 健一, 大川 慶, 松本 悟, *化学とソフトウェア*, **19**, 121-128 (1997).
- [3] <http://www.compval.com>, E-mail: compval@ix.netcom.com
Compu-Value.
- [4] *Microsoft Visual Basic Programming System for MS-DOS Reference*, Microsoft Corporation (1992).
- [5] *Microsoft Visual Basic Programming System for MS-DOS リファレンス*, マイクロソフト株式会社 (1993).

Development of A File Conversion Program for Chemical Structure Data: MOLCONV – Transplantation of the MOLCONV program from PC-9801 for IBM personal computer –

Ken-ichi HAYAMI

Department of Electronics, Sendai National College of Technology
Kitahara-1, Kami-ayashi, Aoba-ku, Sendai, 989-3124, Japan

MOLCONV[1, 2] that was a file conversion program for data formats of molecular structures in chemistry was transplanted from NEC PC-9801 for IBM PC or its compatible computers. Microsoft Visual Basic for MS-DOS sold in the USA was utilized as the compiler, because, IBM PC users were rapidly increasing with the popularity of Microsoft Windows in Japan; and this compiler was able to use a large property as Basic application until now. The Basic in USA was ordered using electronic mail and FAX, and imported. The price and the time to have Basic were a profitable deal over Japan. The main work for transplantation was replacement of functions or statements for Japanese two bytes character code with other functions or statements.

Keywords: File converter, Data format, Visual Basic, MS-DOS, Transplantation, MOLCONV