

## X<sup>Y</sup>TeX 4.04 公開とオンライン投稿

○ 藤田 眞作

湘南情報数理化学研究所 (〒258-0019 神奈川県足柄上郡大井町金子 479-7)

[はじめに] 有機化学分野の論文投稿・審査過程では、(1)「化学構造式を ChemDraw (あるいは ISISDraw) などで描画し、MD-Word で作成した本文に組み込み、そのまま投稿原稿とする」という形態が事実上の標準となっていた。この形態では、一民間企業の都合で突然に文書フォーマットが改変されて、もとのバージョンに基づく原稿がうまく使えないなどの事態が起こりがちである。

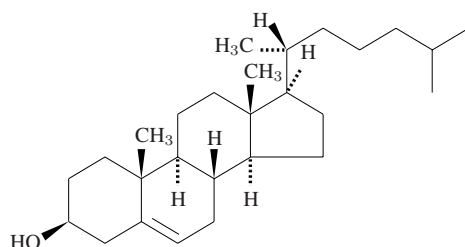
最近の状況を見ると、PDF (Portable Document Format) が普及したことによって、MS-Word 依存の (1) による一極集中の事態が変わってきたのがわかる。いろいろなシステムを使って PDF ファイルを作成できるようになったので、PDF を共通のフォーマットとするという道が開けてきた。PDF ファイルを作成できるならば、どのソフトを使ってもよいので、論文を作成する場合の選択肢がひろがる。このように、PDF 投稿の優位性がはっきりしてきたので、化学分野でも、投稿原稿を PDF で受け付ける学術誌が多数を占めるようになりつつある (現に、本討論会も PDF 投稿で、MS-Word の原稿は受け付けられないことになっている)。

演者は、数理有機立体化学を研究対象にしているのので、数式と化学構造式を同時に使わなければならない。そのため、原稿作成では、(2) 数式を取り扱う上で定評のある T<sub>E</sub>X/L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub> を使用しており、これに自作の化学構造式描画システム X<sup>Y</sup>TeX を組み合わせている。この方法でも、PDF を容易に作成できる。演者のように「数式も化学構造式も」というニーズをもっている場合には、有効な方法である。

本発表では、最近公開した X<sup>Y</sup>TeX 4.04 の機能を紹介したあと、X<sup>Y</sup>TeX により描画した化学構造式を T<sub>E</sub>X/L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 文書に取り込む方法を述べる。さらに、X<sup>Y</sup>TeX による構造式を含んだ論文のオンライン投稿 (Elsevier や Springer が採用している Editorial Manager, アメリカ化学会や Wiley が採用している Manuscript Central) をおこなうためのワークフローを示す。完全なオンライン投稿でなく、PDF 原稿へ変換してから投稿する方式 (セミオンライン投稿) についてもふれる。

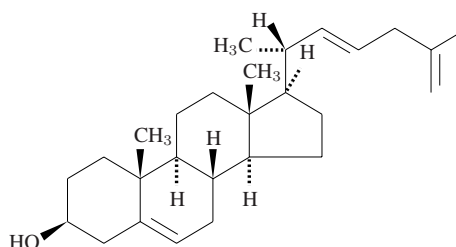
[X<sup>Y</sup>TeX 4.04] X<sup>Y</sup>TeX は 1993 年にバージョン 1.00 を公開し [1], 数回のバージョンアップ [2], マークアップ言語への展開 [3], インターネットへの展開 [4] ののち, バージョン 4.00 で PostScript 対応 [5] にして, 印刷出版に耐える品質になった [6]. L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub> の標準的な教科書 [7] でも引用されるなど, 着実に普及している。今回のバージョンアップでは, ステロイドの描画命令を拡充した [8]. たとえば, 次の 1 行目に示した命令を指定するだけで, 下の構造式が描画できる。

$\backslash\text{cholestane}[e]{3B==HO}$



cholesterol

$\backslash\text{cholestane}[e\{Zc\}\{Zg\}]{3B==HO}$



(22E)-cholesta-5,22,25-trien-3β-ol

T<sub>E</sub>X/L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub>—X<sup>Y</sup>TeX の組み合わせのメリットは, 上記のような X<sup>Y</sup>TeX による構造式描画に加えて, T<sub>E</sub>X/L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub> の機能により, 下記のような複雑な数式を出力することができることである。

$$b(x, q, t, s, p) = \sum_{k=0}^{\infty} \left( \sum_{n_q=0}^{\infty} \left( \sum_{n_t=0}^{\infty} \left( \sum_{n_s=0}^{\infty} \left( \sum_{n_p=0}^{\infty} \beta_{kn_q n_t n_s n_p} p^{n_p} \right) s^{n_s} \right) t^{n_t} \right) q^{n_q} \right) x^k$$

[T<sub>E</sub>X/L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub>による論文投稿] T<sub>E</sub>X/L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub> の原稿を受け付けている論文誌の投稿形態は, 大きく分けて, セミオンライン投稿とオンライン投稿にわかれる (従来の郵送による投稿は本発表では省略する)。

セミオンライン投稿 オンライン投稿した PDF で審査をおこなう。採用後に改訂原稿の PDF ファイルとともに、それに用いたテキストファイル (tex ファイル) と図の EPS (Encapsulated PostScript) ファイルを送付。筆者の経験では、*Bull. Chem. Soc. Jpn.* など、本邦の化学系論文誌の多くはこの方式を採用。

オンライン投稿 投稿は、tex ファイルと図の EPS ファイルをオンラインで送付。先方のシステムで PDF ファイルを自動生成。生成した PDF を著者がチェックして投稿終了。審査は、自動発生した PDF ファイルをおこなう。採用後は、改訂 tex ファイルと EPS ファイルを同様に送付して、オンラインで PDF ファイルを発生させる。Elsevier や Springer から発刊されている論文誌は、Editorial Manager に基づいたオンラインシステムを採用している。また、アメリカ化学会や Wiley は、Manuscript Central に基づいたオンラインシステムを採用している。

[ $\text{\LaTeX}$ による構造式の EPS 変換] セミオンライン投稿にせよオンライン投稿にせよ、採用後は EPS ファイルによる図が要求される。 $\text{\LaTeX}$ による構造式を含む図を単独ページに出力するにすれば、dvipsk (フリーソフト) により、EPS ファイルに変換することが可能である。作成した EPS ファイルは、`\include` 命令により、tex ファイルに取り込むことが可能である。

[ $\text{\TeX}/\text{\LaTeX} 2_{\epsilon}$ — $\text{\LaTeX}$ による(セミ)オンライン投稿] 図 1 に、 $\text{\TeX}/\text{\LaTeX} 2_{\epsilon}$ — $\text{\LaTeX}$ によるセミオンライン投稿 (S) とオンライン投稿 (O) のワークフローを示す。審査用投稿には、四角の枠で囲んだもの (O) と (S)、改訂稿投稿には、丸で囲んだもの (O) と (S) をそれぞれ送付する。

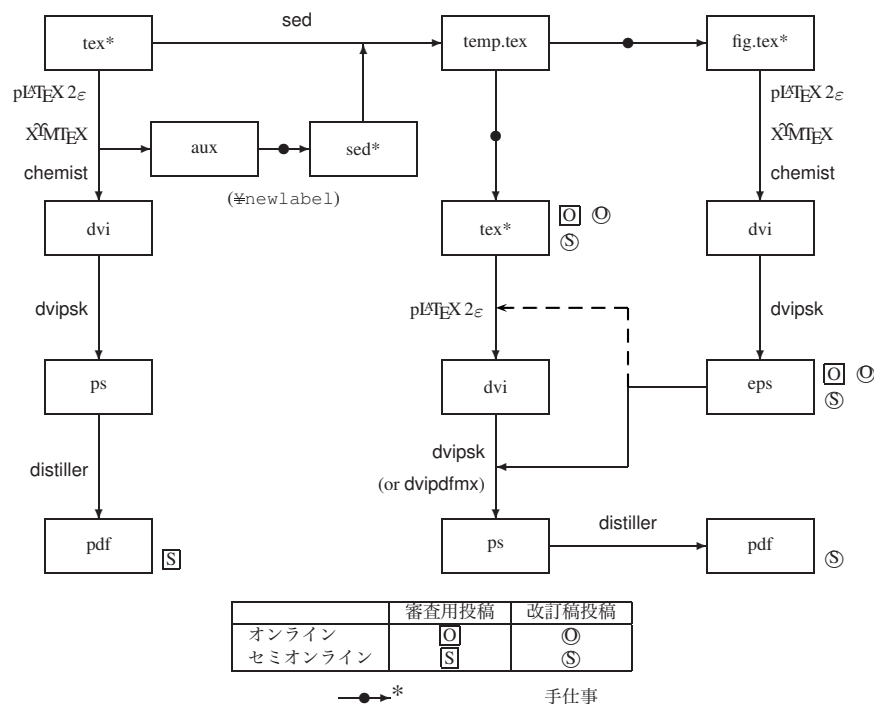


図 1:  $\text{\LaTeX}$  による構造式を含んだ論文のオンライン投稿。ちなみに、本予稿原稿は、セミオンラインの流れ (審査用投稿) で作成したものである。

現在のところ、\*を付けたファイルを作る過程 (●→\*) は手仕事として残っている。今後は専用のソフトを開発して、図 1 のワークフロー全体をシステム化したいと考えている。

[文献] (1) S. Fujita (1994) *Comput. Chem.* **18**, 109–116. (2) S. Fujita (1995) *TUGboat* **16**, 80–88; S. Fujita, N. Tanaka (2000) *TUGboat* **21**, 7–14; S. Fujita, N. Tanaka (2001) *TUGboat* **22**, 285–289. (3) S. Fujita (1999) *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **39**, 903–914; S. Fujita, N. Tanaka (1999) *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **39**, 915–927; 藤田眞作 (2004) *CICSJ Bulletin*, **22**, 110–115 (2004). (4) 田中伸也, 藤田眞作 (2001) *JCPE journal* **13**, 161–168 (2001); S. Fujita, N. Tanaka (2002) *J. Comput. Aided Chem.* **3**, 37–47; N. Tanaka, T. Ishimaru, S. Fujita (2002) *J. Comput. Aided Chem.* **3**, 81–89; K. Ito, N. Tanaka, S. Fujita (2005) *J. Comput. Chem. Jpn* **4**, 79–88. (5) S. Fujita (2005) *J. Comput. Chem. Jpn* **4**, 69–78. (6) たとえば, S. Fujita (2004) *Organic Chemistry of Photography* (Springer-Verlag, Heidelberg-Berlin) は、 $\text{\TeX}/\text{\LaTeX} 2_{\epsilon}$ — $\text{\LaTeX}$  の組み合わせで組版した。 (7) M. Goossens, F. Mittelbach, S. Rahtz, D. Roegel, H. Voß (2008) *The  $\text{\LaTeX}$  Graphics Companion*, 2nd Ed. (Pearson Educ., Boston), pp. 520–540. (8) 演者のホームページ <http://xymtex/> より入手可能。