

Title	Chemical Abstractsに着目した化学の動向分析に関する考察
Author(s)	林, 和弘; 白川, 展之; 小笠原, 敦
Citation	年次学術大会講演要旨集, 29: 786-789
Issue Date	2014-10-18
Type	Conference Paper
Text version	publisher
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10119/12562">http://hdl.handle.net/10119/12562</a>
Rights	本著作物は研究・技術計画学会の許可のもとに掲載するものです。This material is posted here with permission of the Japan Society for Science Policy and Research Management.
Description	一般講演要旨

## Chemical Abstracts に着目した化学の動向分析に関する考察

○林 和弘, 白川展之, 小笠原敦

(文部科学省科学技術・学術政策研究所 科学技術動向研究センター)

## 1. はじめに

文部科学省科学技術・学術政策研究所(NISTEP)では、計量書誌学の共引用を用いた科学技術研究の定量的動向調査と、引用以外の手法を用いた定量的な科学技術動向の解析を行い、その結果を政策的に役立てる試みを行っている。本稿は化学の分野に注目し、化学者がデファクトスタンダードで利用する2次情報データベースを利用した科学技術動向分析の手法開発について考察を行う。

## 2. NISTEP の科学計量学調査による科学技術動向分析と、分野別調査の必要性

2-1. サイエンスマップを利用した科学研究論文に着目した動向分析

NISTEP 科学技術・学術情報基盤調査研究室では、共引用関係を利用して、影響力のある論文群を相対的にマッピングし、ホットな研究領域や学際的な領域を可視化する調査を行っている。<sup>1)</sup> 一番最近の調査報告では、これまでのサイエンスマップの動向変化も解析しており、概して、日本はホットな研究領域への参画が英独等と比較して少ないことが示されている。

2-2. 工学系の動向分析

一方、同研究所科学技術動向センターでは、引用の流量(総被引用数や一論文あたりの被引用数)が科学の分野に比較して少ない工学分野の研究成果群に着目し、工学系を代表する IEEE の発行論文、会議録を定量的に調査した。<sup>2)</sup> この場合、会議録等の属性(ソサイエティ)に基づいて、研究の動向を論じることで、日本が特異的な挙動を取っていることを示した。

2-3. 研究者が認めるトップジャーナル群に着目した分析手法

さらに、研究者がトップジャーナルと考えるジャーナル群を分野別に調査することで、ジャーナルの属性に基づいた、科学技術動向を分析する手法の可能性を示した。<sup>3)</sup>

2-4. 分野別調査の必要性

2-2. で示した工学分野の分析で分かったことの一つは、分野別調査の必要性である。例えば、共引用関係を利用した解析の場合は、文献間の関係を示し、クラスタ分けをした後の領域の特定に専門家のレビューを含む一定のリソースを必要とし、マップを描画してからのシソーラスづくりが必要となる。なお、最新のサイエンスマップでは、テキストマイニングを利用して、その領域に現れる論文情報からキーワード群を抽出し、その効率化を図っている。

あるいは既存の大手の引用データベースでは、それぞれのデータベースが抱える論文全体に対して独自の分野分けを行なっている。このこと自体は最もなことであるが、その分野分けが当該研究者の実感とは乖離していることも起きている。

このジレンマを解消する一つの手法として、研究者のデファクトスタンダードとなっているデータベースを利用し、その分野やシソーラスに基づいて動向を分析することが考えられる。前述のIEEEの調査においては、工学系のデファクトスタンダードのデータベースを用いた捉えることができる。

## 3. Chemical Abstract を利用した化学の動向分析

3-1. Chemical Abstracts とその特徴

Chemical Abstracts (CA) は米国化学会の一部門である、Chemical Abstracts Service (CAS) が提供している科学情報サービスである。<sup>4)</sup> 元々は1907年より化学文献の抄録誌として始まり、研究成果として生まれた化合物を識別して独自のナンバー(CAS Number)を割当て、関連の文献と共に網羅的に情報を収集する事業を長く続けている。現在では、SciFinder と呼ばれる分析ツールなどを通じて、化学を中心とした広い科学情報サービスを提供しており、特に化学者に広く支持されている。

この Chemical Abstracts は文献データベースとして見ることも可能である。その場合、例えば Web of Science や SCOPUS と比較して以下の特徴を持つ。

- ・化学者によって設定されたシソーラス（CA セクション、CA ロール）に基づいた論文の分類が行なわれている
- ・文献中に記載された化合物の属性情報を持つ
- ・化合物に関連した特許情報を持つ

### 3-2. CA を用いた化学の動向解析の可能性

以上より、化学のデファクトスタンダードデータベースを用いた論文を中心とした研究成果の調査を行うことで、前述の IEEE の調査と同様の、化学者が設定した属性に基づいた動向分析を行なうことができると考えられる。また、化合物、特許など他の属性情報をうまく活用することで、化学独自の動向分析を行い、化学研究の実態をより正確に把握することで、例えば政策オプションづくりにおいて、より適切な設定に役立てる可能性がある。

## 4. 手法と簡易分析結果

### 4-1. 今回利用した手法

今回 3-2 で示した可能性を確かめるために、フィジビリティスタディとして、以下の調査を行った。

OECD 主要国を中心とし、1982 年から 5 年おきに、2012 年まで、CAplus ファイルに収録されている資料の種類毎の件数を調査した。さらに、資料の種類が「JOURNAL」と「REVIEW」について、CA セクション・著者所属国などについてもそれぞれの件数を調査した。著者所属国は整数カウントで集計した。

### 4-2. 化学の 5 分野別にみた各国の動向

まず、各国の主な化学分野の論文の動向について報告する。CA 上で各論文は以下の分野に分かれる

- ・BIOCHEMISTRY（生化学）
- ・ORGANIC（有機化学）
- ・MACROMOLECULAR（高分子化学）
- ・APPLIED（応用化学）
- ・PHYSICAL, INORGANIC, AND ANALYTICAL（物理, 無機, 分析化学）

これらの分野に従って論文出版量の各年の変化を主な国について示したものを図表 1 に示す。他の国も含めて、以下のタイプに分類されることが分かった。

### A) 先進国型（米、英、イタリアなど）

先進国型の特徴は 1997 年時点で各分野において一定の論文数を確保していることと、近年生化学分野の伸びが著しいことである。

### B) 開発途上型（中国、インド、ブラジルなど）

この型の特徴はここ 10 年くらいの間に急激に論文出版量を伸ばしていることである。また、他の国に比較して応用化学の割合が多いのが特徴である。

### C) 独自型（ロシア、日本）

今回一番の特徴を見せたのがロシアと日本であり、ロシアは物理, 無機, 分析化学分野において特異的に大きなシェアを見せている。一方、日本は 2007 年までは先進国型の傾向を見せていたが、2012 年になって論文出版量がいずれの分野でも落ち込んでいることが分かった。

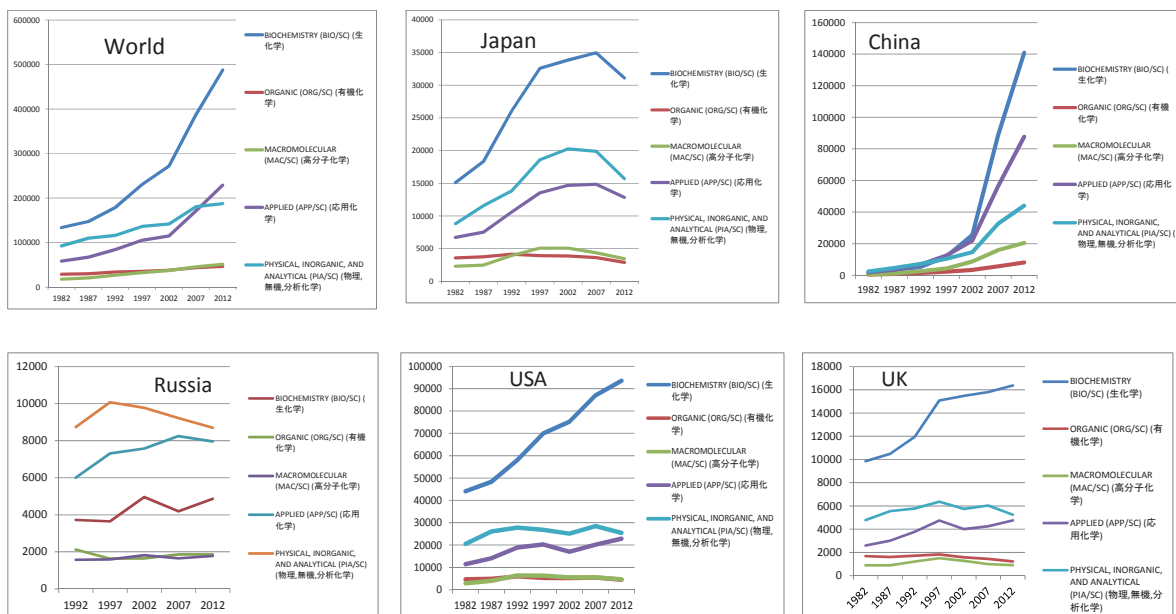
### 4-3. CA セクションに着目した各国の特徴を可視化する手法によるパターン分析

次に CA セクションに着目した分析を報告する。CA セクションは図表 2 で示したような、5 分野をさらに 80 に分類したものである。これらの分類に基づく各国内の分類シェアを計算し、その高低に応じて色分けを行ったものが図表 3 である。この色分け図を各国ごとに並べることで、相対的な比較を行うことが可能となる。

この分析でわかったことは以下の通りである。

- ・4-2 では特異的な動向を見せた日本とロシアのうち日本は、世界とそれほど変わらない動向を示す一方、ロシアは独自のパターンを示している。
- ・米英は生化学のシェアが高めに出ている。
- ・日本と中国は応用化学のシェアが高めに出ている

図表 3 を見る限り、化学分野においては、IEEE の調査で見られたような、日本の研究分野に偏りが見られず、世界の動向と比較的類似していることが分かった。日本の化学は出版量としては下がったが、研究領域においては、世界と歩調がそれほど違っていないことが示唆される結果となった。ただし、このことをもって日本の化学が最先端をキープしていると言えるかどうかは、詳細な調査を要する。



図表 1 各国の化学論文出版動向

乳 牛 類	01. Pharmacology (薬理学)	新 材 料	47. Apparatus and Plant Equipment (装置, 工場設備)
	02. Mammalian Hormones (ホルモン薬理学)		48. Unit Operations and Processes (単位操作, プロセス)
	03. Biochemical Genetics (生化学的遺伝学)		49. Industrial Inorganic Chemicals (工業無機化学製品)
	04. Toxicology (毒物学)		50. Propellants and Explosives (推進薬, 爆薬)
	05. Agrochemical Bioregulators (農芸化学的生物調整剤)		51. Fossil Fuels, Derivatives, and Related Products (化石燃料, 誘導製品, 関連製品)
	06. General Biochemistry (生化学一般)		52. Electrochemical, Radiational, and Thermal Energy Technology (電気化学的, 放射および熱エネルギー工学)
	07. Enzymes (酵素)		53. Mineralogical and Geological Chemistry (鉱物地質化学)
	08. Radiation Biochemistry (放射線化学)		54. Extractive Metallurgy (抽出冶金学)
	09. Biochemical Methods (生化学の方法)		55. Ferrous Metals and Alloys (鉄, 鉄合金)
	10. Microbial, Algal, and Fungal Biochemistry (微生物生化学)		56. Nonferrous Metals and Alloys (非鉄類合金)
	11. Plant Biochemistry (植物生化学)		57. Ceramics (セラミックス)
12. Nonmammalian Biochemistry (非哺乳類生化学)	58. Cement, concrete, and Related Building Materials (セメント, コンクリート, 関連建築材料)		
13. Mammalian Biochemistry (哺乳類生化学)	59. Air Pollution and Industrial Hygiene (大気汚染, 産業衛生)		
14. Mammalian Pathological Biochemistry (哺乳類病理生化学)	60. Waste Treatment and Disposal (廃棄物処理, 処分)		
15. Immunochemistry (免疫化学)	61. Water (水)		
16. Fermentation and Biotechnological Biochemistry (発酵, 工業生化学)	62. Essential Oils and Cosmetics (精油, 化粧品)		
17. Food and Feed Chemistry (食品, 飼料化学)	63. Pharmaceuticals (薬剤)		
18. Animal Nutrition (動物栄養学)	64. Pharmaceutical Analysis (薬剤分析)		
19. Fertilizers, Soils, and Plant Nutrition (肥料, 土壌, 植物栄養学)	65. General Physical Chemistry (物理化学一般)		
20. History, Education, and Documentation (歴史教育およびドキュメンテーション)	66. Surface Chemistry and Colloids (界面化学, コロイド)		
21. General Organic Chemistry (有機化学一般)	67. Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms (触媒化学, 反応速度論, 無機反応機構)		
22. Physical Organic Chemistry (物理有機化学)	68. Phase Equilibria, Chemical Equilibria, and Solutions (相平衡, 化学平衡, 溶液)		
23. Aliphatic Compounds (脂肪族化合物)	69. Thermodynamics, Thermochemistry, and Thermal Properties (熱力学, 熱化学, 熱的性質)		
24. Alicyclic Compounds (脂環式化合物)	70. Nuclear Phenomena (原子核現象)		
25. Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds (ベンゼン, ベンゼン誘導体, 縮合ベンゼノイド化合物)	71. Nuclear Technology (原子核技術)		
26. Biomolecules and Their Synthetic Analogs (生体分子, 合成類似体)	72. Electrochemistry (電気化学)		
27. Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom) (複素環化合物 (ヘテロ原子 1つ))	73. Optical, Electron, and Mass Spectroscopy and Other Related Properties (光電子, 質量分光学, その他の関連する性質)		
28. Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom) (複素環化合物 (ヘテロ原子 2つ以上))	74. Radiation Chemistry, Photochemistry, and Photographic and Other Reprographic Processes (放射線化学, 光化学, 写真, その他の複写プロセス)		
29. Organometallic and Organometalloidal Compounds (有機金属, 有機メタロイド化合物)	75. Crystallography and Liquid Crystals (結晶学, 液晶)		
30. Terpenes and Terpenoids (テルペン, テルペノイド化合物)	76. Electric Phenomena (電気的性質)		
31. Alkaloids (アルカロイド)	77. Magnetic Phenomena (磁気的現象)		
32. Steroids (ステロイド)	78. Inorganic Chemicals and Reactions (無機化学物質, 反応)		
33. Carbohydrates (炭水化物)	79. Inorganic Analytical Chemistry (無機分析化学)		
34. Amino Acids, Peptides, and Proteins (アミノ酸, ペプチド, タンパク質)	80. Organic Analytical Chemistry (有機分析化学)		
35. Chemistry of Synthetic High Polymers (合成高分子の化学)			
36. Physical Properties of Synthetic High Polymers (合成高分子の物理的性質)			
37. Plastics Manufacture and Processing (プラスチックの製造, 加工)			
38. Plastics Fabrication and Uses (プラスチックの成型, 用途)			
39. Synthetic Elastomers and Natural Rubber (合成エラストマー, 天然ゴム)			
40. Textiles and Fibers (繊維, 繊維)			
41. Dyes, Organic Pigments, Fluorescent Brighteners, and Photographic Sensitizers (染料, 有機顔料, 蛍光増白剤, 写真用増感剤)			
42. Coatings, Inks, and Related Products (塗料, インク, 関連製品)			
43. Cellulose, Lignin, Paper, and Other Wood Products (セルロース, リグニン, 紙, その他の木材製品)			
44. Industrial Carbohydrates (工業炭水化物)			
45. Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes (工業有機化学製品, 皮革, 脂肪, ワックス)			
46. Surface-Active Agents and Detergents (界面活性剤, 合成洗剤)			

図表 2 CA セクション



	世界										日本										中国										ロシア										米国										英国									
	1992	1997	2002	2007	2012	1992	1997	2002	2007	2012	1992	1997	2002	2007	2012	1992	1997	2002	2007	2012	1992	1997	2002	2007	2012	1992	1997	2002	2007	2012	1992	1997	2002	2007	2012	1992	1997	2002	2007	2012																				
生化学	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000																				
有機化学	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000																				
高分子化学	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000																				
応用化学	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000																				
物理無機分析	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000																				

世界 日本 中国 ロシア 米国 英国

図表3 CAセクションの各セクションのシェア割合による各国の特徴の可視化 (1992-2012年, ロシアは1992-97年のデータを除く)

5. おわりに

本報告は、研究者の実感により近づいた化学系の動向調査を行なう可能性の一端をフィージビリティスタディとして示すことができたに過ぎない。5年おきの調査でも、国ごとの特徴があることが示されたが、各年のデータを入手し、移動平均を取るなどして、動向の精緻化を図ることが考えられる。また、化合物の属性や特許との関連などに着目した分析など、化学あるいはCAに特徴的な属性情報に基づく調査、動向解析を今後行なって行く予定である。

参考文献

1) 文部科学省 科学技術・学術政策研究所. サイエンスマップ 2010&2012一論文データベース分析 (2005年から2010年および2007年から2012年) による注目される研究領域の動向調査. NISTEP REPORT No. 159. 2014年7月. <http://hdl.handle.net/11035/2933>

- 2) 文部科学省 科学技術・学術政策研究所. IEEE 定期刊物における電気電子・情報通信分野の領域別動向—日本と世界のトレンドの差異—. NISTEP REPORT No. 176. 2010年2月. <http://hdl.handle.net/11035/899>
- 3) 林和弘, 白川展之. 自然科学・生命科学系研究者がトップジャーナルと認める学術雑誌に関する調査. 研究・技術計画学会第28回年次学術大会講演予稿集. 2013, p. 1059-1062. <http://hdl.handle.net/10119/11889>

4) Chemical Abstracts Service <http://www.cas.org/>

謝辞

本調査研究と本報告においては、一般社団法人化学情報協会 会 財情報センター (<http://www.jaici.or.jp/SHIPS>) の方々とのディスカッションから示唆を得ている。ここに感謝の意を記す。