

平成 17 年 12 月 13 日



## 初の国産化学系グラフィックスオープンソースライブラリ

### 『ケモじゅん』 を公開

#### 概要

国立情報学研究所（NII 東京都千代田区一ツ橋 所長：坂内正夫）では、化学と情報学を融合したケモインフォマティクス（化学情報学）の新領域を拓く、化学系グラフィックスライブラリ『ケモじゅん』を平成 17 年 12 月 26 日（月）から公開します。

『ケモじゅん』は、知的基盤の一つとして 2002 年から開発を進めてきた、全て国産のソースコードで構築されている、化学系グラフィックスライブラリとしては初の「純国産」のオープンソースソフトウェアです。化学系ソフトウェア技術の発展と次世代の育成と継承に寄与することを目的にソースコードを公開して基盤技術の共有化を図ります。

大半のソースコードが公開されず、かつ圧倒的に欧米主導の化学ソフトウェア業界においては、基盤技術の共有化が進んでおらず、また我国においては「使う」技術ばかりが先行して「創る」技術が蓄積されていません。このため、学術的にも特色ある国産のオープンソフトウェアを継続して発展させることは極めて重要です。

『ケモじゅん』は、化学分野におけるオープンソース化普及の流れを作り、日本の化学ソフトウェア技術の継承的発展と知的基盤の構築に貢献することを目指します。

#### 『ケモじゅん』とは

『ケモじゅん』は、化学反応予測システムや核磁気共鳴スペクトル予測システムなどのグラフィックスユーザーインタフェース（GUI）の開発の過程において、共通基盤となりうるソースコードを、各システムに特化したものとは別にライブラリとして構築してきた化学系グラフィックスソフトウェアです。基盤となる汎用グラフィックスライブラリとして、SRA 先端技術研究所で開発されている 3 次元マルチメディアオープンソースライブラリ『じゅん』 [<http://www.sra.co.jp/public/sra/technical/jun/index.html>] を用いています。

#### 『ケモじゅん』と化学情報学

化学情報学—ケモインフォマティクスは、化学と情報学を融合した、化学の諸問題を解決するための情報学を主軸とした方法論やシステムの構築をその研究主題とする新領域です。情報学の自然科学への応用研究分野の 1 つであり、化学分野における新しい研究手法や方法論の開拓を目指す学際領域です。

『ケモじゅん』は、化学（化学系ソフトウェアの GUI）と情報学（汎用的グラフィックスライブラリ『じゅん』）を融合するグラフィックスライブラリという意味で、この化学情報学のコンセプトを具体的なソフトウェアとして実現させたものの 1 つとして位置づけられます。『ケモじゅん』の名称は、このコンセプトを表すものであり、また、ロゴのデザインにも、この「融合」の意味が込められています。

## オープンソース化の趣旨

基盤ソフトウェアのオープンソース化は共通技術の共有化によるソフトウェア技術の発展と次世代の育成と継承のために重要です。しかし化学ソフトウェア分野では共通技術であっても公開されているソースコードは極めて少ないのが現状です。一方で、化学ソフトウェアの市場は圧倒的に欧米製のもので占有されており、かつ多くの場合ソースコードは本国で管理され、日本にはオブジェクトコードのみが流通している状況が続いています。このため、日本の化学ソフトウェア分野では、「使う」技術ばかりが先行し、「創る」技術の蓄積が圧倒的に遅れています。つまり、日本の化学ソフトウェア分野には、継続と発展のための基盤となるソースコードが枯渇しているのです。

日本において化学ソフトウェアのソースコードの蓄積がなされていないことは、将来の発展に不可欠な基盤が築かれていないことを意味します。共通技術が公開されていないために、何人もの人たちが似たような努力を繰り返すことになり、さらなる発展のために注力できない状況を引き起こしています。ソフトウェアの発展には競争原理も重要であり、このためにソースコードを非公開とし、技術と利益を独占する部分も必要です。しかし、これらの部分と共通基盤技術とは区別して考えるべきです。昨今よく耳にする「知的基盤の構築」や「技術立国」といった耳に心地よい言葉も、こうした基本的かつ重要な視点が欠如しては言葉だけが一人歩きをするだけで、机上の空論に終わってしまいかねないでしょう。キーワードとしてのスローガンを掲げるだけでなく、実質的な中身を着実につくるためにはどうするべきかについて、現実を正面からとらえて取り組むことが不可欠です。

『ケモじゅん』の開発とオープンソース化は、この問題意識の上に行うものです。研究成果の社会還元としての意義も有しています。

### 『ケモじゅん』の特長

#### 1 純国産のオープンソースライブラリ

『ケモじゅん』は、3次元マルチメディアオープンソースライブラリ『じゅん』（株式会社 SRA 先端技術研究所）を基盤に構築された化学用グラフィックスライブラリです。ライブラリとして提供される化学系グラフィックスソフトウェアとしては初の国産オープンソースであるとともに、基盤グラフィックスライブラリも含めて全て国産のオープンソースコードで構築されている「純国産」のソフトウェアです。

#### 2 汎用性と特異性を兼ね備えたライブラリ

一般に汎用性に主軸をおいて開発された情報工学技術を化学分野の目的にそのまま適用できることは稀であり、一方で、ある目的に特化して開発されたプログラムは拡張性に乏しいという欠点をもちます。『ケモじゅん』は、化学反応予測やスペクトル予測システムのグラフィックスソフトウェア開発の過程において共通基盤となりうるものをライブラリとして独立させて構築してきたものであり、一方で、汎用的ライブラリ『じゅん』の全機能も継承しています。つまり、汎用性から特異性までを段階的にもつ独立したモジュールを連携させることで、汎用性と特異性を兼ね備えたライブラリを実現しています。

#### 3 動的・インタラクティブな化学グラフィックスを指向

現在の化学系グラフィックスは主に分子構造や計算結果の表示によるプレゼンテーションや化学者間のコミュニケーションの道具として使われています。『ケモじゅん』は、こうした従来の可視化利用に加え、動的可視化やインタラクティブな操作性をもつ、化学者の思考ツールともなりうる次世代の化学系グラフィックスを指向しています。

#### 4 わかりやすいソースコードとドキュメント

『ケモじゅん』では、利用者それぞれの目的に応じた幅広い活用を可能とするために、ソースコードの機能の独立性、わかりやすさ、マニュアルやドキュメントの充実も重要な要件と考えて開発を進めています。

#### 5 継続して発展するソフトウェア

オープンソースをソフトウェア技術の発展と次世代の育成と継承につなげるためには、いかに継続し成長させていくかが大きな鍵です。比較的小さなボリュームからのオープンソース化の開始となりますが、知的基盤の構築への貢献のために、着実に活動を継続していきます。

### 『ケモじゅん』の機能

最新バージョン(Ver.030)のライブラリを構成する主要なものを以下に紹介します。

#### 1 分子オブジェクト

分子構造に関する情報を取り扱うための述語やアルゴリズムを有するオブジェクトであり、複数の原子オブジェクトと結合オブジェクトから構成されています。原子オブジェクトは、元素記号、原子座標、van der Waals 半径をインスタンス変数として保持し、結合オブジェクトは、結合種と up-down 情報をインスタンス変数として保持しています。

分子オブジェクトでは、これらの基本情報をもとに分子構造を取り扱うための種々のメソッドが定義されています。例えば以下に示す機能が実装されています。

- 可視化のための3次元オブジェクトの生成機能
- 官能基認識のための機能
- グラフ：点と線の集合への変換機能

分子モデルとしては、スティック、ボール&スティック、スペースフィル（不透明、半透明）、2D 図が実装されています。

#### 2 分子ビューア

分子ビューアは分子オブジェクトの3次元オブジェクトを描画するものであり、3次元分子グラフィックスを司る種々の機能を実装しています。じゅんのビューファインダを継承し、MVC (Model-View-Controller)の考え方で構築されています。

分子の3次元構造の拡大縮小・回転・平行移動を容易に行うことができます。視線・上方・右方ベクトル、視野角、描画投影面などの視体積を操作するためのじゅんから継承したビューアのフル機能を利用することができます。ビューファインダのメタビューであるビューポートをレンダリングする機能も有しています。

#### 3 分子ファイルの読み書き

ファイルの読み込みと書き込みのための抽象オブジェクトを実装しています。現バージョンでは分子ファイルとしてMDLモルファイルの読み書きのためのクラスが定義されています。

## 4 グラファ

グラファは点と線の集合であるグラフの操作系です。じゅんのグラファを継承し、化学用グラファが実装されています。分子オブジェクトでグラフに変換された分子構造に対してグラファを利用することで、様々なグラフ操作が可能となります。

## 5 化学メディアナビゲータ

分子構造ファイルを含む種々の形式のファイルを開覧するためのナビゲータとして化学メディアナビゲータを提供しています。

化学メディアナビゲータはじゅんのマルチメディアナビゲータを継承しており、これに分子ファイルを見るための分子モデルオブジェクトが追加されています。化学メディアナビゲータは、ファイル名の拡張子により画像、映像、文章、分子構造ファイル等の種別を識別し、それぞれに対応した形式でウィンドウに表示します。MVC の考え方で制御されています。

## マニュアル・ドキュメント

ライブラリの円滑利用のためにはわかりやすいマニュアルやドキュメントが必要です。『ケモじゅん』のマニュアルとドキュメントは HTML 形式で記述されており、各機能からクラスの継承・構造図、ソースコードまでを容易に参照することが可能です。クラスの継承・構造図では各クラス名がソースコードの解説にリンクされており、クラスの構造を見ながらソースコードを読み進めることができる仕組みとなっています。

また、オブジェクト指向や言語の解説や、Jun のマニュアルなどにもリンクを張っており、多様な利用フェーズへの対応を可能としています。

## 開発言語・稼動環境

今回公開する『ケモじゅん』の開発言語は Smalltalk であり、VisualWorks を用いて開発を行っています。Java 言語版の開発も計画中です。

Smalltalk の実行形式は仮想マシンを包含しており、この仮想イメージはハードウェアに依存しないので、稼動 OS の種類は問いません。Windows、Mac-OS、UNIX、Linux のいずれでも稼動可能であり、移植にあたって再コンパイルは必要ありません。

## ライセンス

『ケモじゅん』は「GPL ライセンス」（GNU 一般公有使用許諾書）に基づいて、オープンソースソフトウェアとして公開します。「LGPL ライセンス」版も提供可能です。

## 『ケモじゅん』の公開

平成 17 年 12 月 26 日（月）から、以下のサイトで公開を開始します。

<http://research.nii.ac.jp/~cheminfo/ChemoJun/>