

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』の公開

平成17年12月13日

国立情報学研究所

佐藤 寛子

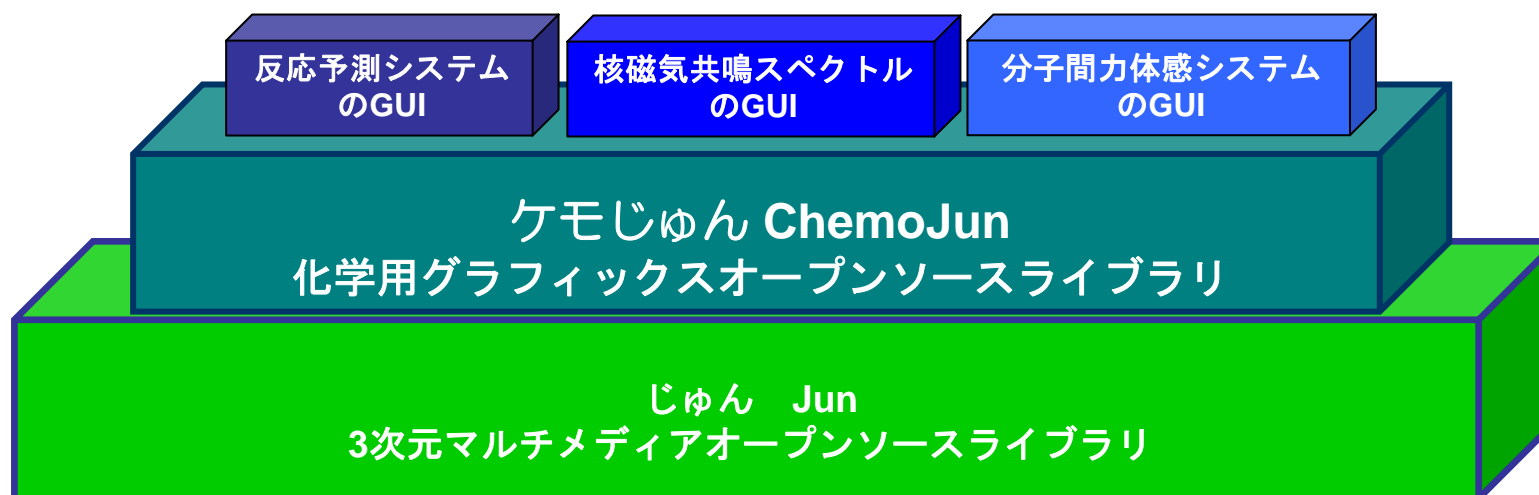


化学系グラフィックスライブラリ『ケモじゅん』の公開

- 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
- オープンソースとして公開
- 純国産の化学系ライブラリ



『ケモじゅん』とは



- 「じゅん」*を基本ライブラリとする化学用グラフィックスライブラリ
- 種々の化学系ソフトウェアのGUI開発において共通基盤部分をライブラリ化



* 株式会社SRA先端技術研究所. <http://www.sra.co.jp/public/sra/technical/jun/index.html>

『ケモじゅん』と化学情報学

化 学

情報学



『ケモじゅん』と化学情報学

化学情報学 Chemoinformatics



オープンソース化の趣旨

1. 基盤技術の共有化

化学ソフトウェア業界全体の現状：

- 一部の企業や団体による独占
- ソースコードの大半は非公開



基盤技術であっても共有化が進んでいない



2. 「創る」技術の蓄積

日本の化学ソフトウェア業界の現状：

- 圧倒的な欧米主導
- 日本は欧米のオブジェクトコードに依存



「使う」技術が先行し「創る」技術が蓄積されていない



オープンソース化の趣旨

基盤技術の共有化

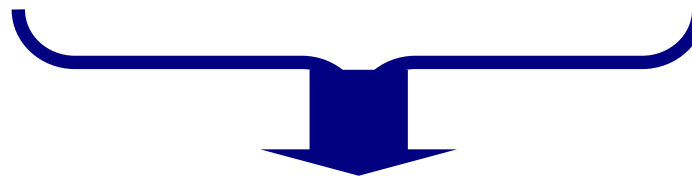


ソースコードの公開
様々な目的に利用可
わかりやすいマニュアル
充実したドキュメント

「創る」技術の蓄積



国産オープンソース
学術的な新規性
継続的な活動



人材育成

知的基盤の構築と継承



『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

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

基盤グラフィックスライブラリ『じゅん』も含めて**全て国産**



2. 汎用性と特異性を兼ね備えたライブラリ

特異性が高い → 適用範囲が狭くなる

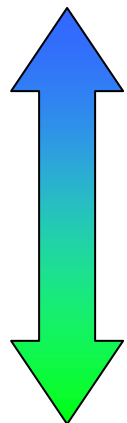
汎用性が高い → 特定の目的への流用難



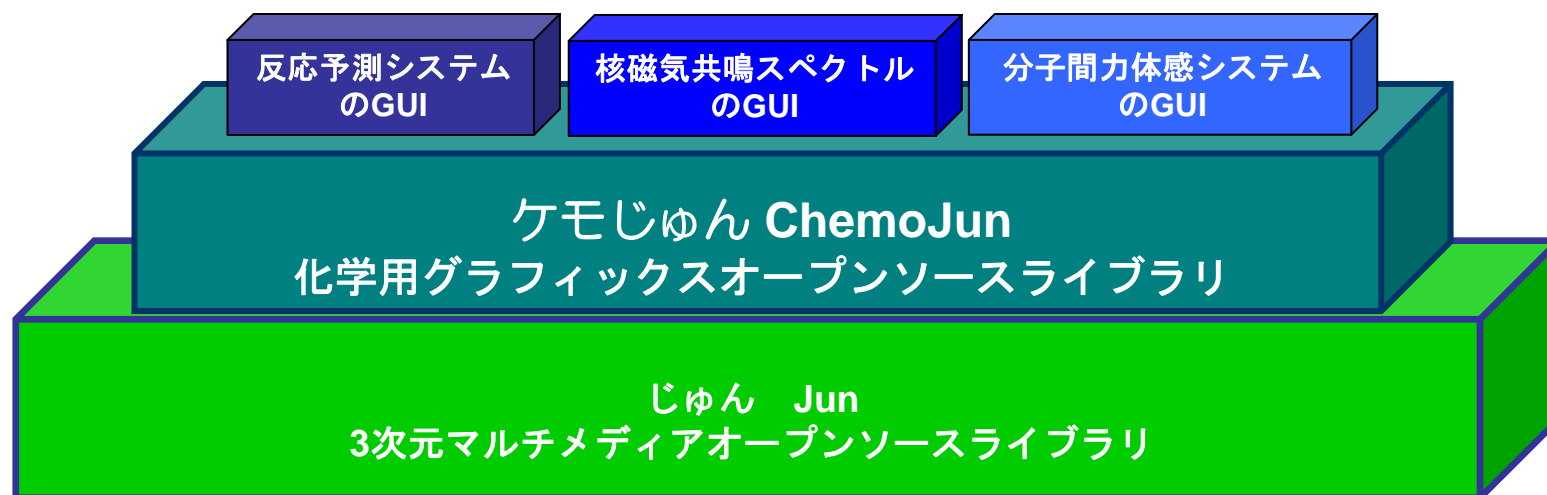
『ケモじゅん』の特長

2. 汎用性と特異性を兼ね備えたライブラリ

特異性



汎用性



3. 動的・インタラクティブな化学GUIを指向

現在の化学系グラフィックス：

主として結果の確認と
プレゼンテーションに利用



思考ツールとしての**動的GUIを指向**した
新たな発想のグラフィックスライブラリ



4. わかりやすいソースコードとドキュメント

ソースコードの機能の**独立性**

マニュアルやドキュメントの充実



『ケモじゅん』の特長

5. 継続して発展するソフトウェア






小さく生んで大きく育てる

着実に活動を**継続**させる



『ケモじゅん』の機能

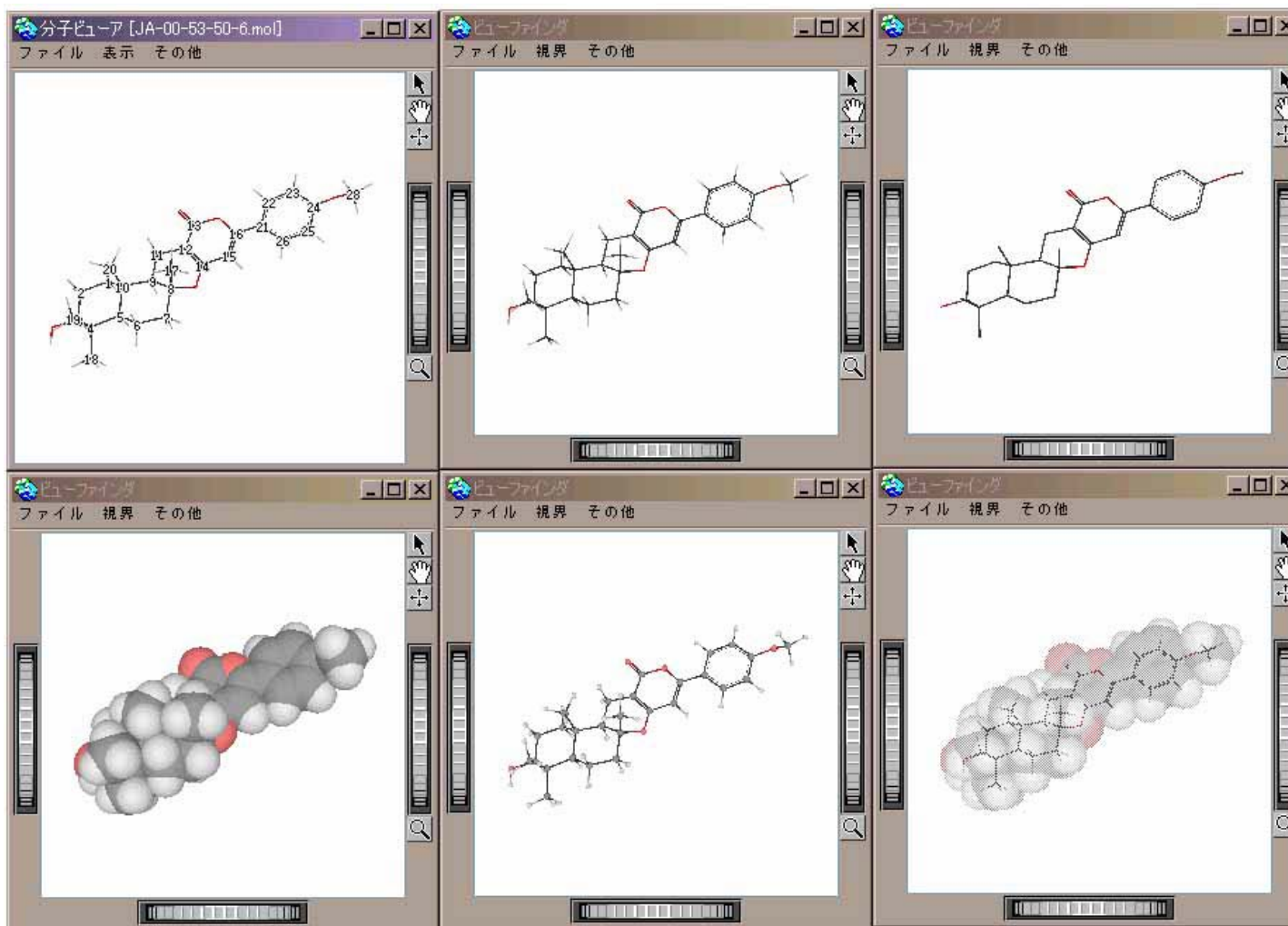
ライブラリ構成

-  分子オブジェクト
-  分子ビューア
-  分子ファイルの読み書き
-  グラファ
-  化学メディアナビゲータ

最新版: ver.030



分子オブジェクト



分子オブジェクトの3次元オブジェクト描画



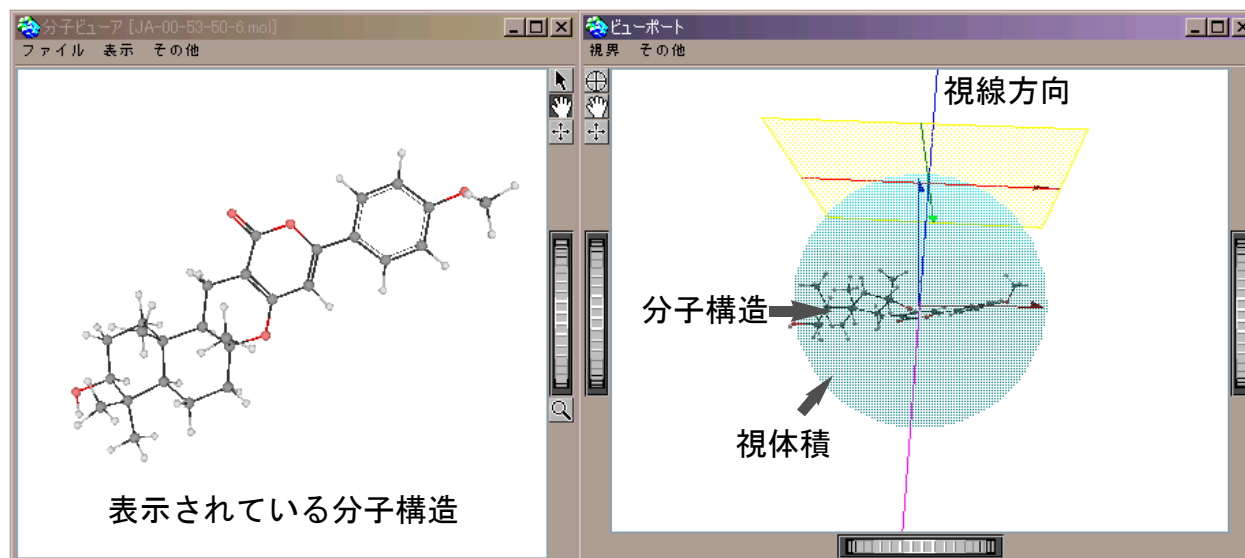
じゅんのビューファインダーを継承



MVC (Model-View-Controller)の考え方で構築



分子ビューア



ビューファインダ メタビュー（ビューポート）

- 表示対象の拡大縮小，回転，平行移動，視線・上方・右方ベクトル，視野角，描画投影面etc. の操作・表示が可能



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

- 現バージョンでは, MDL-Molファイル(標準的な分子ファイルフォーマット)をサポート



グラフ（=点と線の集合）の操作系

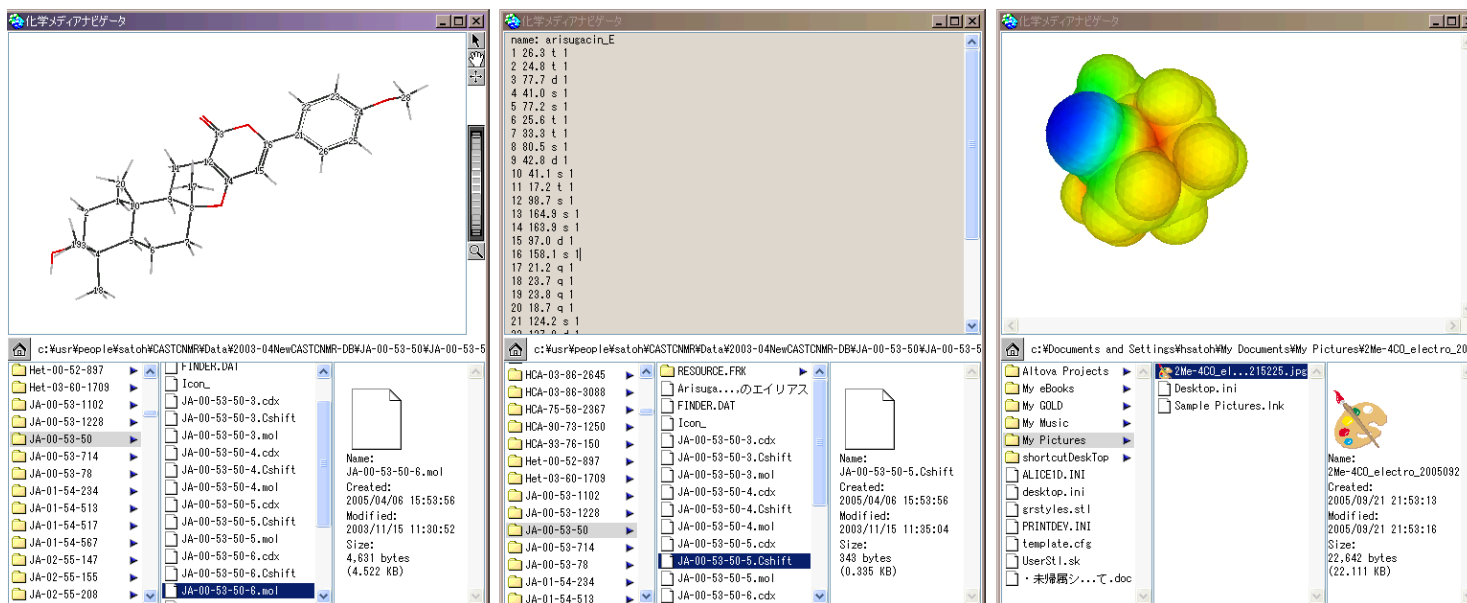
分子構造 ← グラフ変換メソッド
(分子オブジェクト)



様々なグラフ操作



種々の形式のファイルを開覧するツール

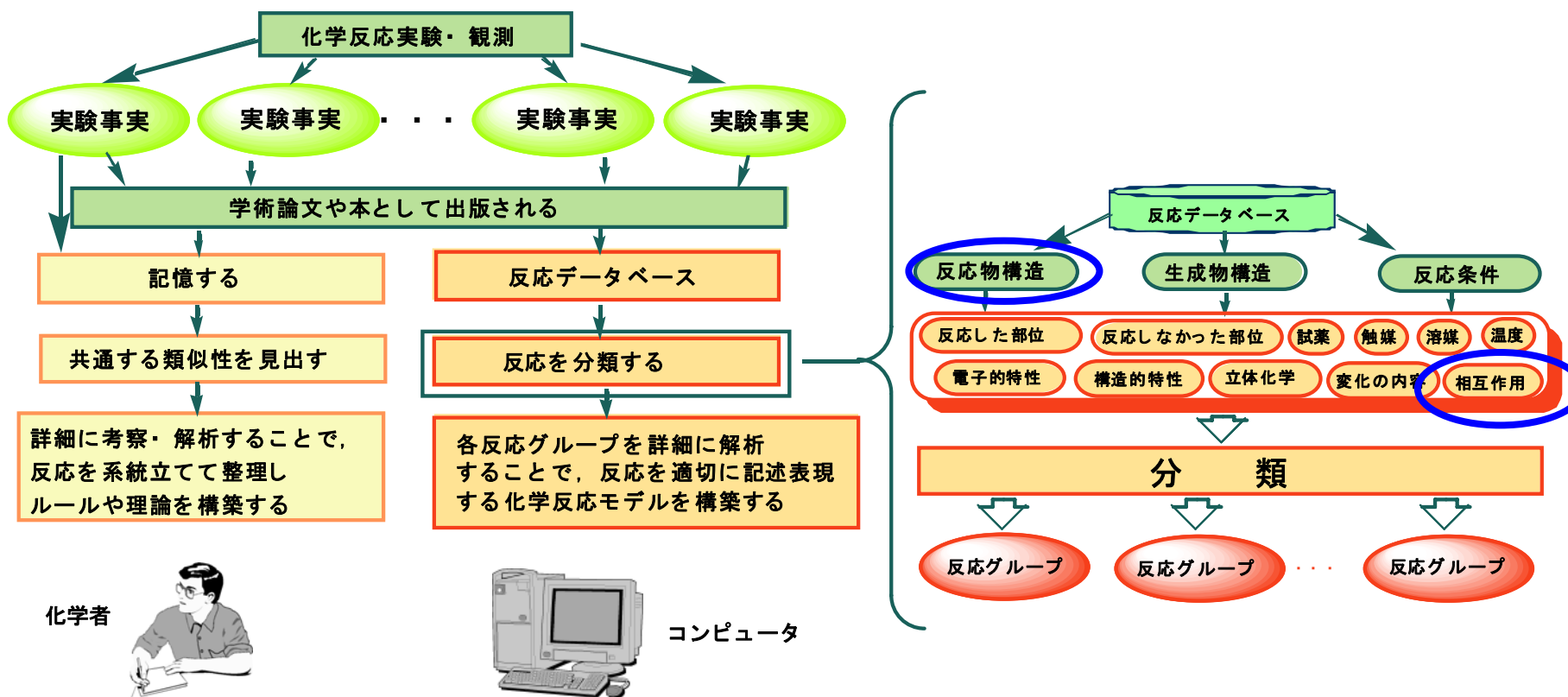


モルファイル

テキストファイル

画像ファイル

実施例 — 化学反応予測



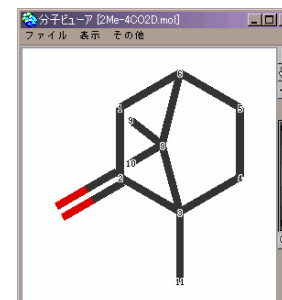
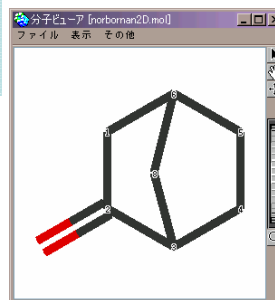
「化学情報学－化学反応の系図と反応予測」 佐藤寛子, 丸善(2003)

実施例 — 化学反応予測

反応物の分子構造

```

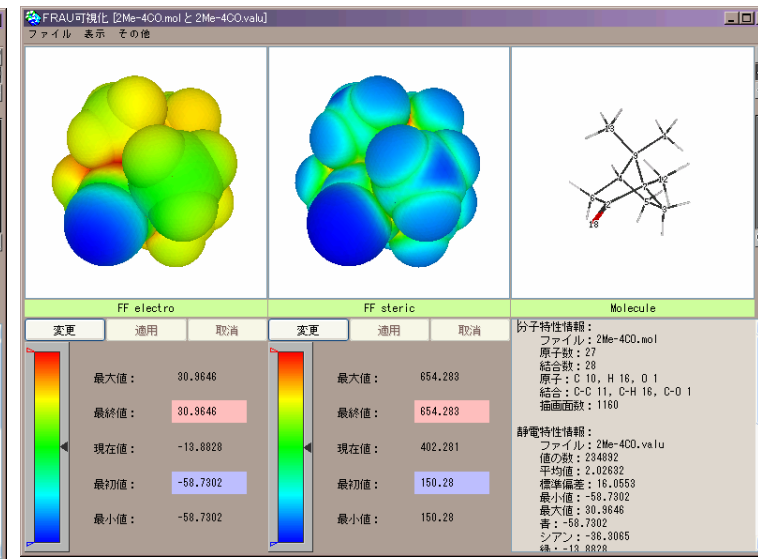
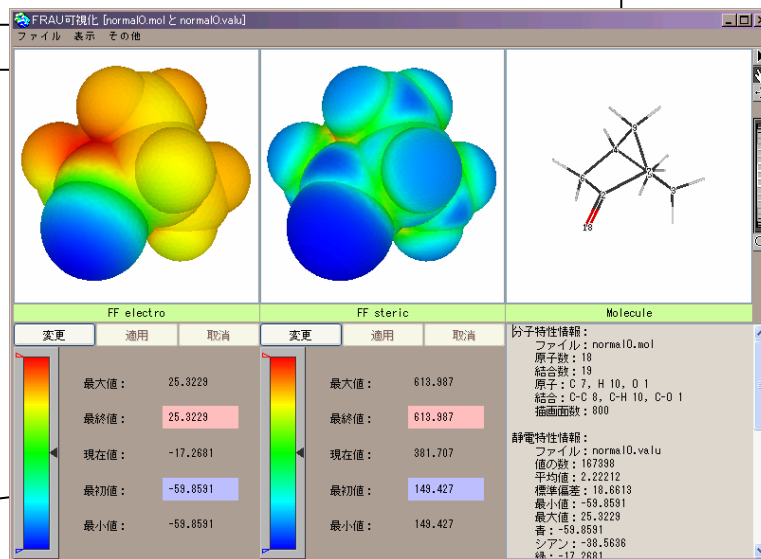
8 9 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
-0.3572 0.4125 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.3572 -0.4125 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.3572 -0.8250 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.0717 -0.4125 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.0717 0.4125 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.3572 0.8250 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.0717 -0.8250 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.1437 -0.0281 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 2 1 0 0 0
2 3 1 0 0 0
    
```



反応場の特徴の数値化

Atom no.: 1

0.95634	-0.98284	2.89080
1.00659	-0.98284	2.88975
0.98348	-0.94055	2.88975
0.93540	-0.93716	2.88975
0.90659	-0.97579	2.88975
0.92354	-1.02091	2.88975
0.97067	-1.03101	2.88975
1.05676	-0.98284	2.88659
1.04443	-0.93465	2.88659
1.01050	-0.89828	2.88659
0.96327	-0.88267	2.88659
0.91434	-0.89163	2.88659
0.87572	-0.92298	2.88659
0.85688	-0.96902	2.88659
0.86245	-1.01845	2.88659
0.89106	-1.05914	2.88659
0.93569	-1.08111	2.88659
0.98539	-1.07896	2.88659

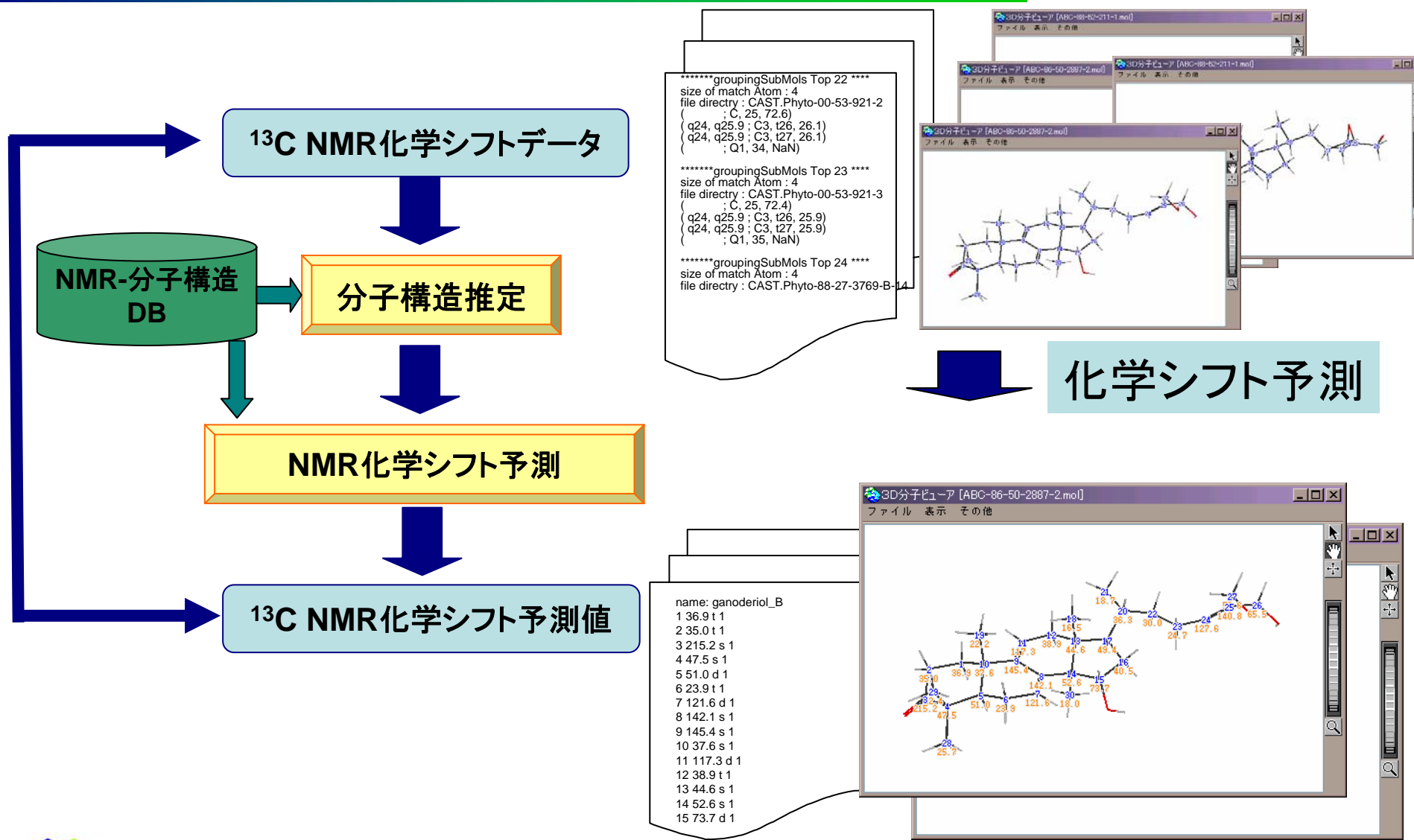


どこが反応するか？ どの方向から反応相手が近づくか？



実施例

一分子構造推定・NMRスペクトル予測



マニュアル・ドキュメント



ChemoJunManuals - Microsoft Internet Explorer

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

戻る 進む 検索 お気に入り

アドレス(D) C:\usr\people\satoh\Smalltalk\HapticChem4vw74nc\Manuals\ChemoJun\index.html

移動 リンク

 [目次]  [ケモじゅんランチャー] [分子ビューア] [化学メディアナビゲータ]

[ビューファインダ] [ビューアのウインドウ操作] [フォルダ・ファイルの指定] [トロッカー]

2005年11月07日 文責: 浅岡 浩子

「ケモじゅんシステム」 取り扱い説明書

- インストール、設定
 - ランタイム版のインストール (Windows & Mac OS X 版)
 - 開発版のインストール (Windows & Mac OS X 版)
- 「ケモじゅん」
 - ケモじゅんシステムの使いはじめに
 - ケモじゅんランチャー
 - 分子ビューア
 - 化学メディアナビゲータ
- 共通
 - ビューファインダ
 - ビューアのウインドウ操作
 - フォルダ・ファイルの指定
 - トロッカー
- 「じゅん」
 - じゅんの画面録画

参照 (see also)

- 「じゅん」の公開ページ




マニュアル・ドキュメント

ChemoJunManuals - Microsoft Internet Explorer

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)

戻る 検索 お気に入り

アドレス(D) C:\usr\people\satoh\Smalltalk\HaptiChem4vw74nc\Manuals\ChemoJun\index.html


 [\[目次\]](#) [\[ケモじゅんランチャー\]](#) [\[分子ビューア\]](#) [\[化学メディアナビゲータ\]](#)
[\[ビューファインダ\]](#) [\[ビューアのウィンドウ操作\]](#) [\[フォルダ・ファイルの指定\]](#) [\[トラッカー\]](#)

2005年11月07日 文責: 浅岡 浩子

ケモじゅんシステムの使いはじめに

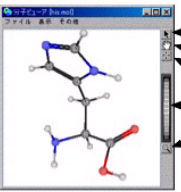
詳しく知るためには、文字の部分をクリックしてください。

ケモじゅんランチャー



ケモじゅんのさまざまな機能へアクセスする

分子ビューア

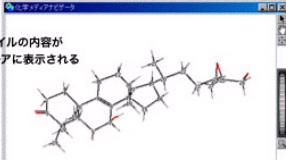


下記のボタン等を利用してウィンドウ操作する

- ピックボタン: 選択する
- グラフボタン: つかんで回転する
- ドラッグボタン: 平行移動する
- Zホイール: 拡大/縮小する
- フォーカスボタン: 拡大/縮小する

分子の様々な表示やシリアル番号の表示などを行う

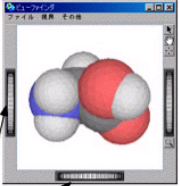
化学メディアナビゲータ



選択されたファイルの内容がすぐに上部のビューアに表示される

ファイルナビゲータでファイルを選択する

ビューファインダ



Xホイール
Yホイール
回した方向へ回転する

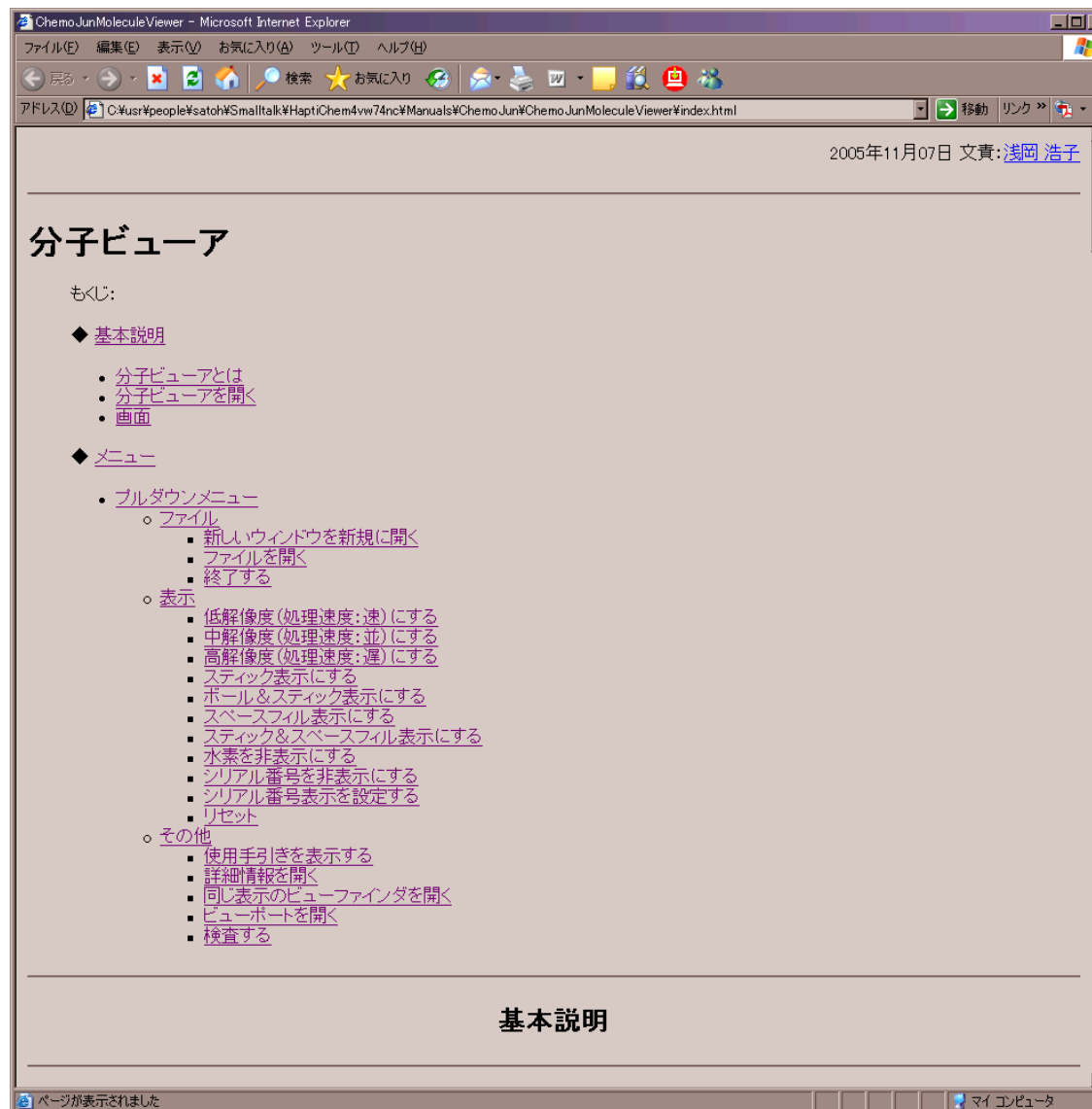
分子ビューアから開き、画像の保存に便利

このページの TOP ^

マイコンピュータ



マニュアル・ドキュメント



2005年11月07日 文責: 浅岡 浩子

分子ビューア

もくじ:

- ◆ [基本説明](#)
 - [分子ビューアとは](#)
 - [分子ビューアを開く](#)
 - [画面](#)
- ◆ [メニュー](#)
 - [プルダウンメニュー](#)
 - [ファイル](#)
 - [新しいウィンドウを新規に開く](#)
 - [ファイルを開く](#)
 - [終了する](#)
 - [表示](#)
 - [低解像度\(処理速度:速\)にする](#)
 - [中解像度\(処理速度:並\)にする](#)
 - [高解像度\(処理速度:遅\)にする](#)
 - [スティック表示にする](#)
 - [ボール&スティック表示にする](#)
 - [スペースフィイル表示にする](#)
 - [スティック&スペースフィイル表示にする](#)
 - [水素を非表示にする](#)
 - [シリアル番号を非表示にする](#)
 - [シリアル番号表示を設定する](#)
 - [リセット](#)
 - [その他](#)
 - [使用手引きを表示する](#)
 - [詳細情報を開く](#)
 - [同じ表示のビューファインダを開く](#)
 - [ビューポートを開く](#)
 - [検査する](#)

基本説明

ページが表示されました

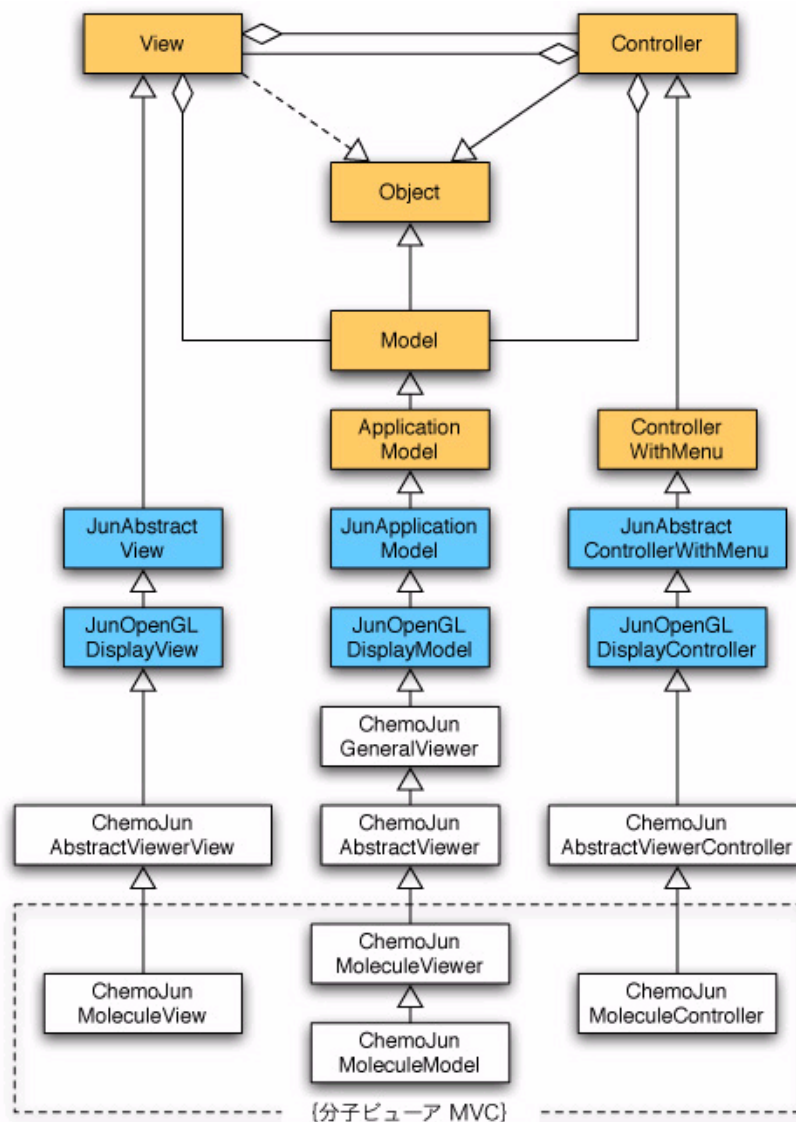


マニュアル・ドキュメント

VisualWorks
のクラス

Jun
のクラス

ChemoJun
のクラス



開発言語・稼働環境

開発言語

Smalltalk版

平成17年12月26日公開

Java版

計画中

稼働環境

稼働OSは問わない
再コンパイル必要なし



ライセンス

ライセンス

GPL版（GNU一般公有使用許諾書）

LGPL版も提供可.



『ケモじゅん』の公開

公開日

平成17年12月26日(月)

公開サイト

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

