

# 分子特性のインタラクティブ可視化法の開発とグラフィックライブラリ基盤の構築

(国立情報学研<sup>1</sup>, SRA 先端技術研<sup>2</sup>,  
東大先端科学技術研究セ<sup>3</sup>)

○佐藤 寛子<sup>1\*</sup>, 青木 淳<sup>2</sup>, 浅岡 浩子<sup>2</sup>,  
山本 恭裕<sup>3</sup>, 中小路 久美代<sup>3</sup>

## 1. はじめに

化学は視覚的要素の強い学問分野である。化学構造式や反応式は分子や反応が抽象的にグラフ描画されたものであり、化学には不可欠な、いわば言語のような役割を担っている。また、プラスチックの分子模型は分子の3次元的な特徴を認識するための極めて重要なツールである。

コンピュータによるモデリングにおいても、ボール&スティック表示や分子軌道表示などの様々なモデルが様々な市販もしくはフリーのモデリングソフトウェアに搭載され、目的に応じて使い分けられている。しかし、こうした既存のソフトウェアの機能を一部変更する必要がある場合や、特化した目的のために新たなモデルや描画を行うためのソフトウェアを構築しようとすると、ほぼ全てのソフトウェアはソースコードが公開されていないために、若干の機能拡張のために化学用のグラフィックソフトウェアを最初から構築しなければならない。また、JMol [1]やiMol[2]などのオープンソースの分子グラフィックスもいくつか報告されているが、化学系にも十分に活用できる国産のオープンソースソフトウェアライブラリは希少である。

一方、可視化の観点から考えると、現在の化学系コンピュータグラフィックスの主要目的は、分子構造や計算結果を表示し、化学者間のコミュニケーションのために用いられることであり、プラスチックの分子模型のような思考のためのツールとは成り得ていない。上記フリーウェア JMol や iMol にしても、これらの機能は通常の視覚化に限られており、ユーザーが思考錯誤するためのインタラクティブな操作性を有しているとは言い難い。

我々は、これらの問題意識から、思考ツールとも成り得る分子情報の可視化法の開発と、こうした多様な目的を有する化学グラフィックスに活用できるグラフィックライブラリソースコード基盤の構築に着手した。本稿では、本プロジェクトの考え方と、これまでに得られている結果について報告する。

## 2. 分子可視化法の開発

分子設計や合成設計などについて思考する際に、構造式や分子模型から視覚的に得られる情報は重要かつ不可欠である。化学者は分子のかたちや性質を様々な観点や角度から「眺め」「見る」ことで新しい事実に「気づき」、知識や経験と照らし合わせて「考察」し、問題解決に結びつけている。すなわち、分子とその特性をいかに表現するかは、問題の本質がどこにあるかを解き、新たな発想に繋げるための重要な鍵であるといえる。

分子の「どのような特性」を「どう表現するか」は、解かれるべき問題によって多様に変化し、問題解決のフェーズによっても刻々と移り変わる。そこで、この問題解決に適した特性化法の開発と、問題解決過程における動的な表現の要求にインタラクティブに応えることのできる可視化システムの開発を両輪とし、両者を効果的に組み合わせた分子可視化システムを開発する。特性化の手法はFRAUシステム[3]を基本として開発を行う。システムの概念図を図1に示した。

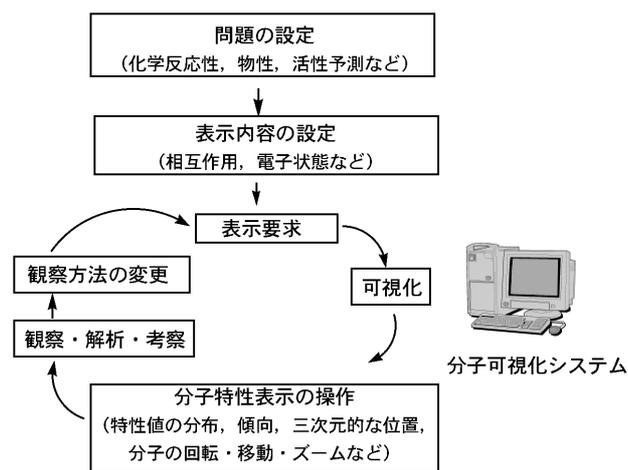


図1 分子可視化システムの概念図

本開発においては、操作性や使い心地を考慮したインタラクションデザインを中心とする開発プロセスを採用している。現在は、認知科学・工学的な観点から見た必要要件の解析や一般化と、化学的な立場からの解釈との擦り合わせを進めている[4]。

### 3. グラフィックライブラリの構築

本分子可視化システムの構築には、多彩な3次元オブジェクトの取り扱いを可能とするグラフィックライブラリが必要である。そこで、本目的に適うものとして、3次元マルチメディアライブラリ JUN[5]を基本として用いることとした。JUNはオブジェクト指向で設計・実装されたグラフィックライブラリであり、3次元グラフィックスと多彩なマルチメディアの両方を同時に扱うことを可能とする。また、幾何だけではなく位相の取扱いや、数値演算のための種々の関数も実装されている。JUNは国産のオープンソースであり、化学系においても汎用的に利用できるソースコード基盤を構築する基本として適していると判断した。

ライブラリは汎用性、特異性の両方に適応できるものを構築する。ここで、特定の目的に特化しすぎると適用範囲が狭くなり、汎用化の度合いが高すぎると、特定の目的に流用することが難しくなるため、両者間のバランスも重要である。

本開発では、上記可視化の目的に特化したライブラリを構築するとともに、それを汎用化させた機能を JUN にフィードバックする手続きを同時に行っている。これにより、可視化システムと JUN の両者を相補的に発展させることを実現している。

上記開発プロセスにより、化学系にも適用できるグラフィックライブラリ基盤の構築を目指して推進中である。

### 4. 結果

これまでに、分子可視化の基本機能の開発を行い、また、FRAU 特性値を表示するために必要な幾何学処理のための基本ライブラリ群を構築し、システムの基本部分を開発した。可視化の例を図2に示す。表示の右から順に分子モデル、FRAUの立体的相互作用特性、FRAUの静電的相互作用特性が表示されている。分子モデルを操作すると左側2つのウィンドウ内の表示も連動して動く。これにより、個々の特性値の詳細と分子構造の両方を同時に確認しながら解析することができる。一方、下段には個々の特性の具体的な数値が表示されている。FRAU 特性値の大きさの差は色の違いで表現されるが、数値と色の対応付けはカラー

バーで設定できる。これにより、特性値の差分量と色の変化量との比率を目的に応じて調整し、表示することができる。こうした表示情報の連動性は、MVC(Model-View-Controller)の考え方でプログラムが構築されていることにより可能となった。今後、本基本システムの上に、種々の機能を実装してゆく予定である。

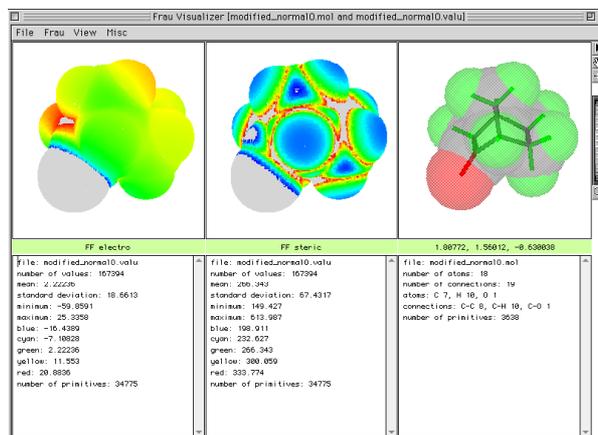


図2 可視化の例

### 5. おわりに

分子特性数値化システム FRAU を対象とし、分子情報の可視化手法とソースコード基盤の構築に着手した。3次元マルチメディアオープンソースライブラリ JUN の多彩なライブラリ群に根ざした目的に適う機能の実装、操作性や使い心地を考慮したインタラクションデザインを中心とする開発プロセス、および必要な要素技術のライブラリへのフィードバックにより、化学分野にも有用なソースコード基盤構築が期待できる。オープンソースは後続のソフトウェア開発者に引き継ぎ、育成するための知的情報基盤の1つであり、情報化学分野の育成と発展の観点からも意義ある研究課題であると考えている。

#### 謝辞

本研究の一部は科学研究費補助金若手研究 A により行われた。

#### 参考文献

- [1] <http://jmol.sourceforge.net/>
- [2] <http://www.pirx.com/iMol/>
- [3] Satoh, H., Itono, S., Funatsu, K., Takano, K., Nakata, T. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 39, 671-678(1999)
- [4] 中小路久美代, 佐藤寛子, 山本恭裕, 青木淳, 浅岡浩子, 情報処理学会研究報告, 2003-HI-106, 2003-MUS-52, 79-86 (2003)
- [5] [http://www.sra.co.jp/people/aoki/Jun/Main\\_e.htm](http://www.sra.co.jp/people/aoki/Jun/Main_e.htm)