

2P11

演 題	XyMTeX を用いる書籍出版	
発 表 者 (所 属)	藤田眞作 (京都工芸繊維大学工芸学部物質工学科)	
連 絡 先	606-8585 京都市左京区松ヶ崎御所海道町 京都工芸繊維大学工芸学部物質工学科	
キーワード	化学構造式, 化学書籍, 出版	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 など	化学構造式を TeX/LaTeX 文書の中に組み込み, 本格的な化学書籍を出版することを目的として, XyMTeX を PostScript 対応としてレベルアップした.	
環 境	適 応 機 種 名	TeX/LaTeX が稼動する環境があれば, 機種を問わない.
	O S 名	TeX/LaTeX が稼動する環境があれば, OS を問わない.
	ソース言語	TeX/LaTeX
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い)	<ul style="list-style-type: none"> ・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ○ 独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 	<p style="text-align: center;">具 体 的 方 法</p> <p>http://imt.chem.kit.ac.jp/fujita/fujitas/fujita.html</p>
	<ul style="list-style-type: none"> ・未定 	

要旨

筆者は 1993 年に TeX/LaTeX の処理系で化学構造式を描くためのソフトウェア(マクロ集)として, XyMTeX を公開した [1]. その後, バージョンアップを繰り返して, 現在 XyMTeX Version 3.00 として公開している [2]. この間, XyMTeX のコマンドを化学構造式の線形表現として捉えなおして, XyM Notation として再編成し, 処理系を選ばずに利用できるようにした [3]. この観点からは, XyMTeX は, XyM Notation の TeX/LaTeX 処理系によるアプリケーションとみなすことができる. さらに, XyM Notation を Java Applet として利用できるようにした XyMJava を開発している [4]. これによって, XyM Notation を HTML 文書の中に書きこんだ文書を作成すれば, インターネットブラウザの画面上に構造式を表示できるようになった. さらに, XyM Notation の仕様をもとに, マークアップ言語で

ある XyMML (XyM Markup Language)を開発した [5]. 当初のシステムは, SGML (Standard Generalized Markup Language)による文書の中に XyMML を書き込んだ文書を作成し, SGML-LaTeX トランスレーターにより, XyMTeX を含む LaTeX 文書に変換したのち, TeX/LaTeX 処理系で印刷するというものであった. XML (Extensible Markup Language)および XSLT (Extensible Stylesheet Language Transformations)が発展してきたことにより, XyMML を XML 文書の中で利用できるよ
うにし, 構造式を含む化学文書を XyMJava によってブラウザ表示するシステムと TeX/LaTeX によ
って印刷が可能なシステムを開発した [6].

最近の動向として, PostScript 文書の発展した PDF (Portable Document Format)により印刷および
デジタル配信をおこなう方法が普及してきており, 構造式を含む化学文書の流通のためのもう一つの選
択肢として有力である. XyMTeX を PostScript 対応とすれば, PDF への変換が容易であり, デジタル
時代の構造式描画システムとして, 利用拡大が見込める. さらに, PostScript 対応とすることにより,
TeX/LaTeX の描画環境の限界を回避することができるので, 印刷品質上も有利である.

このような観点から, PostScript 対応にした XyMTeX Version 4.00 を開発した. 今回のシステムは,
XyM Notation を文書中に書き込み, TeX/LaTeX 処理をおこなうことは従来のバージョンと同じである.
ただし, 内部では, PsTricks (マクロ集)により, 構造式のデータは PostScript のデータに変換され,
TeX/LaTeX の出力ファイルである dvi ファイル (device-independent file)の中に埋め込まれる. このフ
ァイルを dvips フィルターで PostScript ファイルに変換し, この段階で印刷工程にまわすことができる.

XyMTeX Version 4.00 の有効性を実証するため, 多数の化学構造式を含む書籍(S. Fujita, *Organic
Chemistry of Photography*, Springer, 2004)の出版に XyMTeX を利用した. 索引まで含めて約 600 ペ
ージの書物であるが, レイアウト情報も含めて約 10MB の PostScript ファイルとして完成することが
できた. このファイルは, 構造式のデータも PostScript 形式に変換されているので, 高品質の印刷が可
能である. 校正などの作業は, PostScript ファイルを PDF ファイルに変換し, これを E-メールなどで
やり取りすることで遅滞なくおこなうことができた. これにより, XyMTeX Version 4.00 が実際の書
籍出版にも十分対処できることが実証された. この PDF ファイルは, Acrobat Reader でブラウザ表
示することができるので, インターネット上での情報伝達にも有効である. オンデマンド印刷などデジ
タル化を踏まえた化学書籍出版において, 今後有力な手段となろう.

文献

- [1] S. Fujita, *Computer Chem.*, **18**, 109-116 (1994).
- [2] S. Fujita and N. Tanaka, *TUGBoat*, **21** (1), 7-14 (2000); S. Fujita and N. Tanaka, *TUGBoat*, **22**
(4), 285-289 (2001)
- [3] S. Fujita and N. Tanaka, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **39**, 903-914 (1999).
- [4] N. Tanaka and S. Fujita, *J. Comput. Aided Chem.*, **3**, 37-47 (2002).
- [5] S. Fujita, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **39**, 915-927 (1999).
- [6] N. Tanaka, T. Ishimaru, and S. Fujita, *J. Comput. Aided Chem.*, **3**, 81-89 (2002).