

オープンソースによる化学反応情報共有システムの構築

○ 湯浦 慶子、来住 伸子

津田塾大学大学院理学研究科情報科学専攻
(〒187-8577 東京都小平市津田町 2-1-1)

はじめに

有機合成実験において既知の実験事実の共有は実験の成否を左右する。近年では化学データベースや化学ソフトウェアなどといった、コンピュータ技術による研究支援が進められている。企業の研究機関などには情報共有に有効な電子実験ノートや有償のデータベースが普及している。しかし大学の研究室ではコストの高さや運用の難しさの点からあまり普及していない。これは異なる組織間の大規模な協調作業やデータの統合的な管理の実現の障害となっている[1]。そこで本研究ではこれらの課題を解決すべく、オープンソースのツールを用いて情報共有および意見交換できるシステム、COSORI(COMmunity for Sharing Organic synthesys Results & Ideas)を提案することにした。想定する主なユーザーは化学の学生とし、大学の研究室単位で手軽に運用できる化学反応情報共有システムを目指している。

機能

本システムはコンテンツ管理システム (CMS) として Word Press[2]を採用し、プラグインにより機能を拡張して構築している。COSORI は組織ごとに任意の管理者が運営することを想定する (図 1)。ユーザーは化学反応情報として反応物、試薬、溶媒、触媒、生成物、温度、収率などをデータベースに登録できる。本システムの検索機能では、システム内のデータベースに加えて既存のオープンアクセスの反応データベースも検索できるようにする予定である。また組織を越えた情報共有のためにコンテンツにはアクセス制限機能を設けた。ユーザーに割り当てられたロールおよびグループごとに公開設定を制御することができ、未発表データやネガティブデータも扱える。更に、意見交換のために記録データに対して他のユーザーがコメントを書き込んだり、データやコメントに対する評価を付加する機能を設けた。これにより研究者同士のコミュニケーションを促進させ、新たな発見や更なる研究に発展することを狙いとしている。

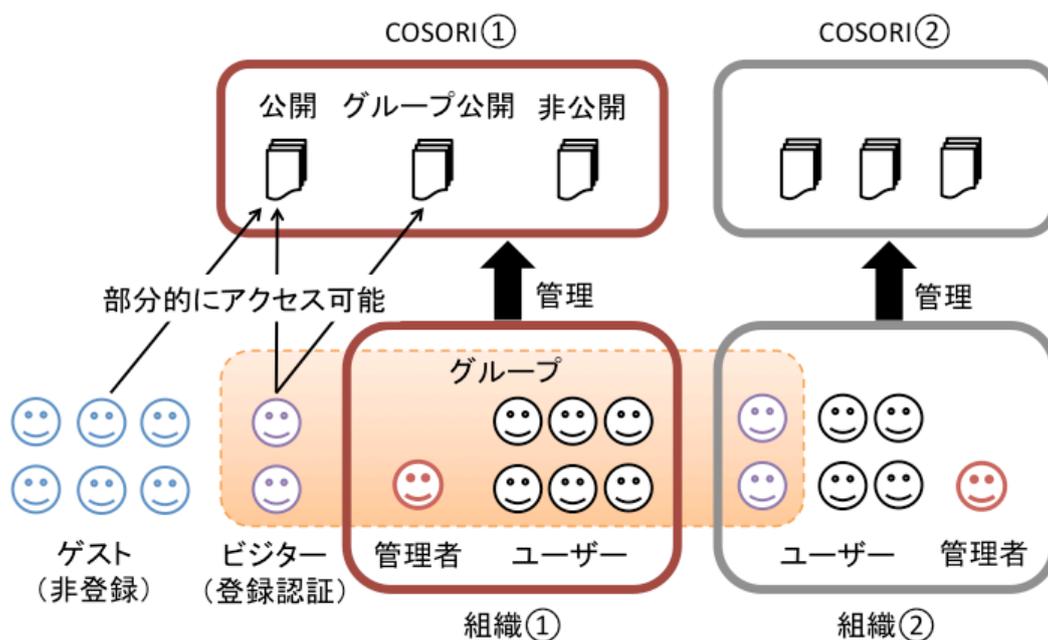


図1 COSORI の管理・利用モデル

展望

今後は既存のオープンアクセスの反応データベースも検索できるようにすると共に、化学構造検索機能も搭載する予定である。そのためにデータベースに拡張カートリッジ MyChem[3]を組み込み、化学構造情報を格納できるようにする。化学構造フォーマット変換および構造検索にはフリーソフト OpenBabel[4]を用いる。またデータの入力を容易にするために、フォーム形式やテンプレートの利用を検討中である。最終的には実際に本システムを大学の研究室で運用し、化学の学生・教員による評価を行う予定である。

参考

- [1] Joerg K.W., et al. Open-source chemistry software and molecular databases broaden the research horizons of drug discovery. *Communications of the ACM*, Vol.55, No.11 (nov, 2012), 65-75.
- [2] <http://wordpress.org/>
- [3] <http://mychem.sourceforge.net/>
- [4] <http://openbabel.org/>