

| | | |
|---|---|-----------|
| 演 題 | GTK+による分子構造表示プログラムModrast-Pの開発と改良 | |
| 発 表 者 (所 属) | 村田 一紀・佐々 和洋・*宇野 健・林 治尚・山名 一成・中野 英彦 (姫路工大・工 *広島県立大・経営) | |
| 連 絡 先 | 671-2201 兵庫県姫路市書写 2167 姫路工業大学工学部応用化学科分子設計学講座 | |
| キ ー ワ ー ド | Modrast-P・GUI・分子グラフィックス・GTK+ | |
| 開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど | <ul style="list-style-type: none"> ・ DNA 分子の視覚化 ・ Modrast-P の GUI 化 | |
| 環 境 | 適 応 機 種 名 | PC/AT 機 |
| | O S 名 | UNIX |
| | ソ ー ス 言 語 | C・GTK+ |
| | 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 未定 | 具 体 的 方 法 |

<はじめに>

近年、化学の分野において、コンピュータを用いた分子シミュレーションが盛んになってきている。コンピュータによる理論計算化学は実験化学と相補的に補い合い、化学の進歩を支える重要な柱となっている。この理論計算化学という手法を用いて分子構造を知ることが可能となるが、分子構造に関する情報と分子の反応性や物性、生理活性とを関連させて理解するには、分子の立体構造の座標を数値のままで見ると、適切な図形処理を施し、視覚化の方が好ましいと思われる。

そこで本研究室では、コンピュータを用いた分子構造表示プログラム Modrast-P の開発を進めている。このプログラムは、シェーディングを施した高度な表示形態の分子構造を表示できるものである。Modrast-P は、CUI(Character User Interface)を用いているため、すべてのワークステーションで利用可能である。しかし、GUI(Graphical User Interface)を持ち合わせていないため、コマンド入力が必要な操作方法となっており、若干操作性の悪い箇所がある。そこで今回、X Window System のツールキットの一つである GTK+での GUI の構築により、マウス入力を主な操作法とするためのプログラムを組むことに着手した。

< 概要 >

GTK+はUCBのPeter Mattisら三人によってGIMPを作成するために作成がはじめられたツールキットである。GTK+の特徴として次のような点が挙げられる。

- ・ GPL GUI ライブラリである
- ・ オブジェクト指向であるのでコードの使い回しなどが簡単に行える
- ・ 各種 UNIX マシンや Microsoft Windows など複数のプラットフォーム上で稼働できる
- ・ C 以外への言語へのバインドも開発されており、他言語からの利用も可能である
- ・ ユーザーからのマウス操作やキーボード操作によって駆動する「イベント駆動型」である

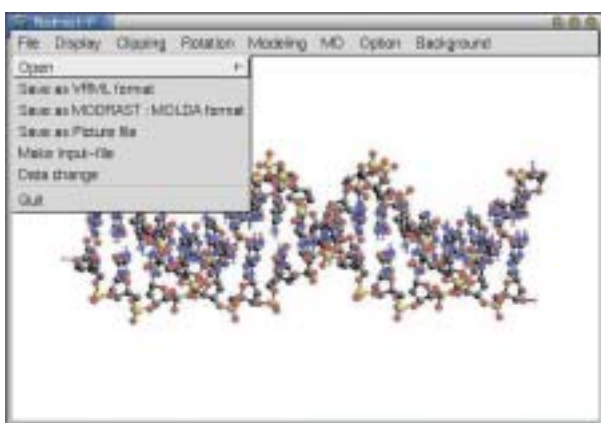


Fig.1 Ball & Stick Model

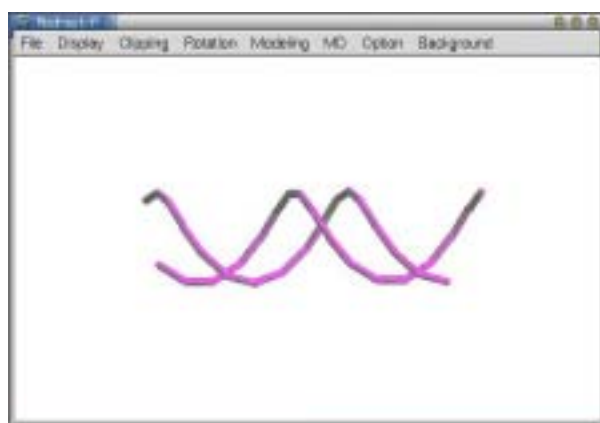


Fig.2 Tubular Model

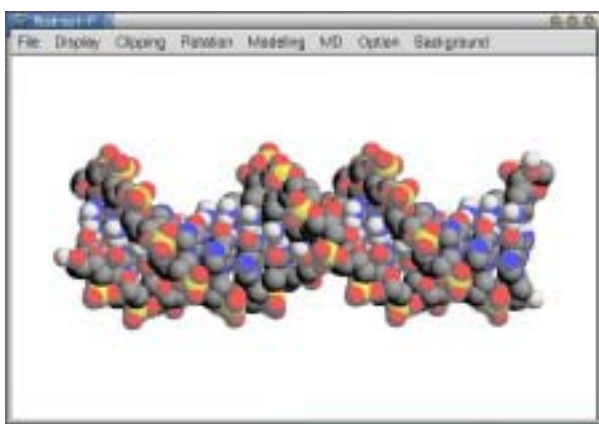


Fig.3 Space-Filling Model



Fig.4 Clipping Space-Filling Model

表記可能な分子モデルは、Wire-Frame モデル、Skeleton モデル、Ball & Stick モデル(Fig.1)、Tubular モデル(Fig.2)、Space-Filling モデル(Fig.3)の5種であり、回転および拡大縮小、平行移動を簡単な操作のみで行うことが出来るようになり、GUI化に成功した。

Modrast-Pの特徴は、分子を切断できることである。3原子を指定することにより切断面を作っている。(Fig.4 参照)

参考文献

分子設計支援システムの開発に関する研究

宇野 健 博士論文 1998

GTK+/GDK による Linux アプリケーション開発

Eric Harlow 翔泳社 1999