

演 題	分子構造表示プログラムのPDAへの展開	
発 表 者 (所 属)	藤本 裕文・戸根 健輔・佐々 和洋・林 治尚・山名 一成・中野 英彦 (姫路工大・工)	
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 Tel : 0792-67-4884	
キ ー ワ ー ド	PDA、Java、分子構造表示	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	Java3D を用いて分子構造の視覚化を行う、比較的軽量で高速なシステムの開発。 またそのシステムを携帯端末 (PDA、携帯電話等) への移植を目指す。	
環 境	適 応 機 種 名	AT 互換機
	O S 名	Windows、PocketPC
	ソ ー ス 言 語	Java
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い)	・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>

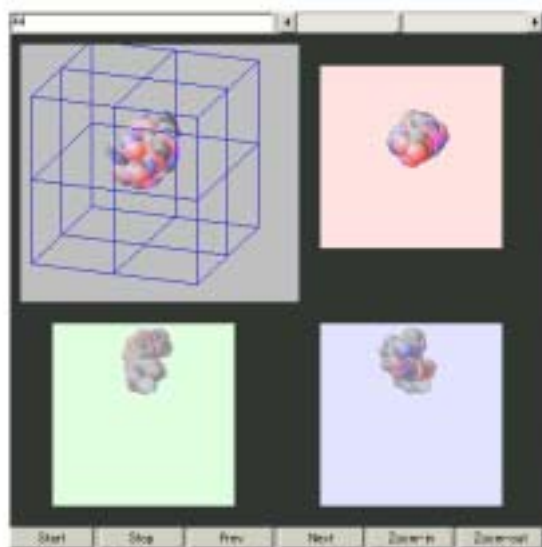
1995 年に Java 言語がリリースされて以来、プログラミングのスタイルは大幅に変更されてきた。Java 言語はオブジェクト指向であり、プラットフォームに依存しないという特徴を持っている。それに加え、Java 言語はインターネットに対し優秀な親近性を持っているため、実際に Java が誕生して以来、World Wide Web (WWW) は劇的に変化してきた。また、携帯電話、PDA 等の移動端末にまで Java はそのシェアを広げ、より身近で数多くの Java アプレットに触れる機会が多くなってきた。

そこで本研究室では Java 言語を用い、プラットフォームに依存しない分子構造表示プログラムの開発を進めている。今回、PDA 等の携帯端末への展開を視野にいたした分子構造表示プログラム開発を行うために、Java 言語によるグラフィックスパッケージ Java3D を用い、よりスムーズな描画ならびにアニメーションを行うことのできるプログラムの開発に着手した。

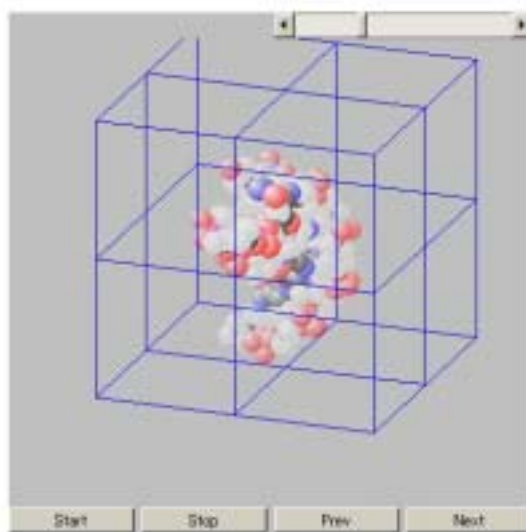
<概要>

近年、化学の分野においてコンピュータを用いた理論計算化学による、分子シミュレーションが盛んに行われるようになってきている。だが、その計算結果の多くは文字や数字の羅列で出力され、複雑な分子構造やその物性をみるには不向きである。そこで出力結果に対して適切な図形処理を施し、視覚を行うことが望ましい。

そこで 本研究室ではこれまでプラットフォームに依存しない分子構造表示プログラムの開発を行ってきた(下図参照)。しかし、座標変更やアニメーションの際に描画速度が遅く、数多くの分子を取り扱うには不都合が生じた。



(4画面表示用)



(シンプルに軽量化したもの)

そこで本研究ではこれまでのプログラムを大幅に改良し、Java3D を用いた分子構造表示プログラムの開発に着手した。

Java3D は Java2 (Java Development Kit 1.2.0 以降 ; jdk) の環境において動作する、Java 言語によるグラフィックスパッケージである。現在、PDA 用の jdk である Java 2 ME(Micro Edition : jdk1.1.8 に相当) に対応したバージョンが開発されつつある。また携帯電話の分野においても J-Phone では開発キットにおいて 3D を扱うことが可能であり、近い将来にこれらが一般的になることは予想に難くない。

Java3D を用いることにより描画速度はもとより、鮮明さ(画像のクオリティ)、視点・光源移動の容易さが飛躍的に向上する。

<参考文献>

- ・ Java3D グラフィックス入門
- ・ Java プログラミング 1001Tips

田中 成典

M.C.Chan, S.W.Griffith, A.F.lasi

森北出版

オーム社開発局