

演 題	クライアント・サーバシステムを利用した生体高分子の模型表示	
発 表 者 ( 所 属 )	宇野 健、佐々和洋 <sup>*</sup> 、林 治尚 <sup>*</sup> 、中野英彦 <sup>*</sup> ( 広島県立大学経営学部、 <sup>*</sup> 姫路工業大学工学部 )	
連 絡 先	〒727-0023 広島県庄原市七塚町 56 二番地 広島県立大学経営学部経営情報学科 TEL : 08247-4-1738 E-mail : uno@bus.hiroshima-pu.ac.jp	
キ ー ワ ー ド	クライアントサーバ・システム、VRML、生体高分子、検索システム	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	クライアントサーバ・システムを利用した VRML 分子模型表示システムを開発した。 本システムは、VRML ブラウザがインストールされ、インターネットに接続されて いるコンピュータなら機種・OS を問わず利用可能となっている。	
環 境	適 応 機 種 名	IBM PC/AT 互換機など
	O S 名	Windows、Linux など
	ソ ー ス 言 語	C 言語、Perl
	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 <input type="radio"/> 未定	具 体 的 方 法

## 1 はじめに

インターネットの普及によるネットワーク関連機器の低価格化やフリーのサーバソフトウェアの充実などにより、クライアントサーバ・システムの構築が容易になった。その特長として、データの処理等を全てサーバ側にあるソフトウェアに任せられることができるため、クライアント側は必要最低限のソフトウェアだけを導入すればよく、Web ブラウザなどの一般的なソフトウェアを利用できれば、機種や OS 等のプラットフォームを選ばないことなどが挙げられる。

我々は以前より、機種や OS に依存しない分子模型表示システムの開発をおこなってきた<sup>1)</sup>。その一環として、昨年度からクライアントサーバ・システムの分子模型表示システムへの適用を試みている<sup>2)</sup>。このシステムでは、インターフェースとして一般的な Web ブラウザ、グラフィック表示に VRML ブラウザ用いる。また、データの読み込み、変換等の処理はサーバ側で CGI によって実行されるため、ネットワークに接続されているならば、真に機種・OS 依存しないことが特徴である。

今回は生体高分子の表示に完全対応するため、表示形態の追加や、部分抜き出し表示を追加した。ま

た、サーバ側に保存（ストック）された分子データファイルを検索するシステムも開発した。

## 2 システムの概要

本システムは、インターフェースとして Web ブラウザを利用し、分子模型の表示に VRML (Virtual Reality Modeling Language) を用いた。サーバ側のソフトウェアとして、Apache (Web サーバ)、Perl (CGI 用のスクリプト言語) を利用した。クライアント、サーバ側共に利用するソフトウェアが、全てフリーソフトで済ませることが可能といった点は、このシステムの特長の 1 つである。

クライアント側は VRML ブラウザがインストールされていれば機種は問わないが、描画のためにある程度のマシンパワーが必要である。また、サーバは Linux と Windows 2000/XP (共に IBM PC/AT 互換機) を用いて実験を行ったが、どちらの OS でも問題なく利用できた。他の OS についても Apache と Perl がインストールされていれば動作すると思われるが、今回は動作確認していない。なお、現在利用可能な分子データファイルの形式は、PDB と Modrast/Molda 形式である。

今回の機能拡張によって付加された主な機能を以下に記す。

### (1) 表示形態の多様化

前回の報告では、空間重点模型と球棒模型しか表示できなかったが、今回新たにスケルトン模型を加えた (Fig.1)。これにより、複雑な持つ生体高分子の構造を把握することが可能となった。また、原子ごとの色分けのほかに、アミノ酸・核酸残基ごと、主鎖ごとの色分けができるようになった。

### (2) 抜き出し表示

特定の残基や二次構造などのみを抜き出して表示する機能である。単独で抜き出して表示する以外にも、抜き出した部位を空間重点模型もしくは球棒模型での表示、全体をスケルトンでの表示と、組み合わせることも可能である (Fig.2)。

### (3) データファイルの検索機能

クライアント側から読み込まれた分子のデータファイルは、サーバ側にストックされ、次回以降は一覧から選択するだけで分子模型を表示することが可能となる。しかしストックされたデータファイルが多くなると、ファイル名から目的の分子を見つけるのは困難となる。そこで、サーバ側にストックされたデータファイルのヘッダ部分などのキーワード検索システムを組み込んだ。

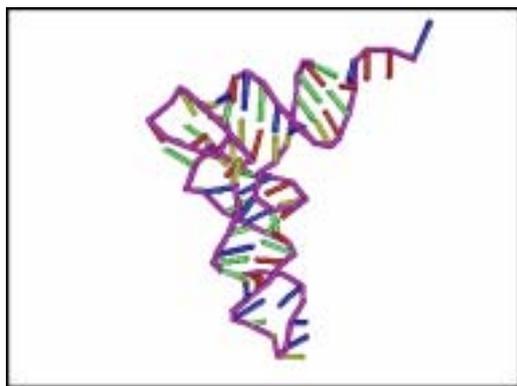


Fig.1 Transfer RNA with skeleton model.

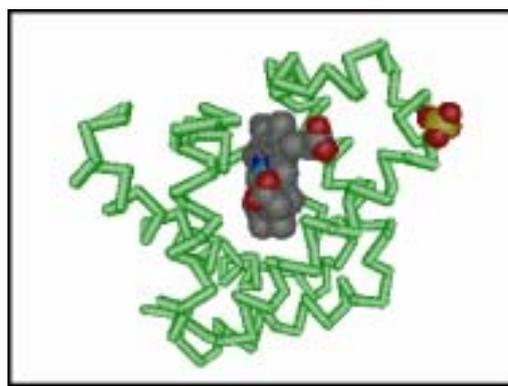


Fig.2 Myoglobin with heteroatoms displayed as skeleton model.

## 参考文献・URL

- 1) 宇野健, 中野英彦 他, *J. Chem. Software*, 4, 1-10 (1997) など.
- 2) 宇野健, 中野英彦 他, 化学ソフトウェア学会年会 2001 研究討論会講演要旨集, 412-413 (2001)