

| | | |
|------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|
| 演 題 | Web ブラウザを用いた分子シミュレーション支援システムの開発 | |
| 発 表 者 (所 属) | ○宇野 健、佐々和洋*、林 治尚*、中野英彦* (広島県立大学経営学部、*姫路工業大学工学部) | |
| 連 絡 先 | 〒727-0023 広島県庄原市七塚町 562 番地 広島県立大学 経営学部 経営情報学科 TEL : 08247-4-1711 E-mail : uno@bus.hiroshima-pu.ac.jp | |
| キーワード | クライアントサーバ、CGI、Web ブラウザ、AMBER、シミュレーション | |
| 開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 など | Web ブラウザ上で GUI を使い、容易に各モジュールに対する入力ファイルの作成などを可能とする。また、クライアント・サーバシステム特徴から、のネットワークが接続されている PC であれば、場所を問わずに利用可能。 | |
| 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、JavaScript |
| | 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 | 具 体 的 方 法 |
| | ・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 | |

1 はじめに

インターネットの基幹を成すクライアント・サーバシステムは、計算処理等を全てサーバ側で起こさない、クライアント側、つまり利用者は必要最低限の汎用ソフトウェアだけを導入すればよい。このため、ネットワークに接続され、Web ブラウザなどを利用できれば、機種や OS 等のプラットフォーム、利用場所を選ばない理想的なシステムを構築することが可能となる。

そこで我々は以前より、Web 上での分子の 3 次元表示システムの開発をおこなってきており、昨年度はクライアント・サーバシステムを利用した生体高分子の分子模型表示システムを開発したことを報告した¹⁾。今回はシステムをさらに拡張し、AMBER²⁾を用いた DNA の分子シミュレーションの支援システムを開発に着手したこと報告する。

2 システムの概要

本システムは、Web 上での分子シミュレーションの支援を目的としている。今回は特に、Web ブラウザ上で AMBER の各モジュールに対する入力ファイルの作成を作成する機能などを CGI (Common Gateway Interface) を用いて開発した。これにより、テキストエディタ等での入力・作成が煩雑な入力

ファイルを、Web ブラウザ上で、インタラクティブに作成することが可能となった。

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、サーバ側のソフトウェアとして、Apache (Web サーバ) を利用した。また、サーバ側に置く CGI は、Perl と C 言語によって作成した。また、ブラウザ上での入力に対しては、JavaScript を用いてエラー処理をおこなった。なお、グラフィック機能を利用する場合は、VRML プラグインが必要となる。今回の機能拡張によって付加された主な機能を、以下に説明する。

(1) NUCGEN の実行支援機能

AMBER には、塩基配列を元に DNA の座標データを PDB 形式で生成するモジュール「NUCGEN」がある。ただし、入力ファイルの作成は煩雑であり、入力ミスの場合でもそのまま不適切なデータ形式で出力される場合がある。そのため、入力ミスをなくし、イレギュラーな配列を排除し、出力データを即座に VRML 形式に変換・表示し、確認することを可能とした。

(2) 各モジュールの入力データ作成支援機能

LINK、EDIT、PARM、SANDER 等の AMBER の各モジュールの入力データファイルの作成を、WEB ブラウザ上から実行することが可能である。入力データは、サーバ上に生成され、クライアント側にダウンロードすることも可能である。

(3) 実行中のシミュレーションのリアルタイム情報表示機能

AMBER のシミュレーション実行中は、任意のステップでシミュレーションのデータを出力させることができる。このデータを Web サーバのフォルダに出力し、リアルタイムで Web ブラウザ上で表示させることを可能にした。これにより、ネットワークが接続されている PC 上さえあれば、時間場所を選ばずにシミュレーションの状態をリアルタイムに把握することが可能となる。



図 1 Web ブラウザ上でのインターフェース

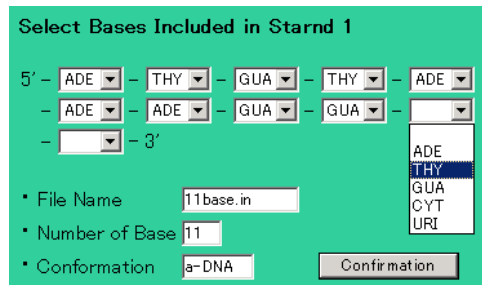


図 2 NUCGEN 入力ファイル生成画面の一部

3 今後の予定

本システムはまだ作成に着手したところであり、シミュレーション支援として利用するには付加すべき機能は多い。その中でも、シミュレーションに際しての初期構造を Web ブラウザ上で作成する機能と、リアルタイム情報表示での分子構造のグラフィック表示機能、さらにはシミュレーション結果のアニメーション機能などの付加をおこなう。また、今回は対応する AMBER のバージョンが 4.1 であるため、最新の 7.0 への対応を速やかに行いたい。

参考文献・URL

- 1) 宇野健, 中野英彦 他, 化学ソフトウェア学会秋季年会 2002 講演予稿集, 78-79 (2002)
- 2) <http://www.amber.ucsf.edu/amber/amber.html>