

携帯情報端末による生命情報可視化技術の開発

○鈴木貴洋, 後藤仁志

豊橋技術科学大学 大学院工学研究科 情報・知能工学専攻

(〒441-8580 愛知県豊橋市天伯町雲雀ヶ丘 1-1)

1. はじめに

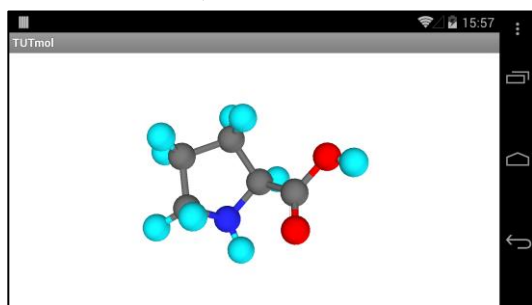
多くの化学者は、PC を使用して分子構造の化学的解析を行う際に、何らかの分子描画や分子構造モデリング支援ソフトウェアを使用する。複雑な分子構造であっても破綻無く三次元立体構造を描画できるこれらの分子描画ソフトは、分子シミュレーションの結果の解析に大きく貢献し、時には、重要な知見を示唆することもある。スマートフォンやタブレットなど携帯端末の普及に伴い、それに対応したいくつかの分子描画ソフトが存在するが、分子描画が遅い、あるいは対応可能な分子構造ファイル形式が限られているなどそれぞれに課題を抱え、期待される機能を十分に提供できていないことがある。本研究では、当研究室で開発してきた分子表示アプリケーション BARISTA の機能の一部を携帯情報端末で実現し、分子を指先で操作し、観察できる新しい分子表示 Android アプリケーション TUTMOL を開発する。そして、携帯端末を使った分子表示における利点と欠点について実践的に検討する。

2. 方法

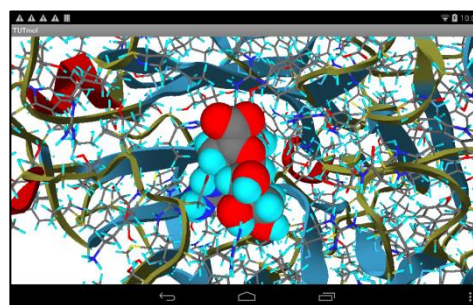
Android アプリケーションの開発は一般に JAVA 言語を使用するが、描画を高速に行うため、ここでは、JAVA だけでなく C++ を TUTMOL の開発言語として用いる[1]。基本仕様として、端末の記憶装置から分子の立体構造ファイル (PDB や MOL 形式) を読み込み、BARISTA と同じイメージで分子を描画する[2]。また、携帯情報端末に固有の指の動きを検出し処理を行い、指一本で画面をフリックすると分子構造の回転、二本で移動を行い、また、画面をピンチイン・アウトすることで表示分子の縮小・拡大を行うようにする。

3. 結果

TUTMOL で分子を表示した例を下に示した。ボールアンドスティック描画モデルでプロリンを表示した左図から、BARISTA と同じイメージを描画できることを確認した。また、右図に示したように、タンパク質の主鎖をリボン、側鎖をスティック、およびリガンド分子を空間充填のそれぞれの描画モデルで表示できることを確認した。ポスター発表では、TUTMOL の操作性と認識性等について議論し、追加予定のネットワークを介したダウンロード機能等について報告をする。



(a) ボールアンドスティック描画モデルによる表示例 (プロリン)



(b) 複数の描画モデルを用いたタンパク質と阻害薬の表示例 (ノイラミニダーゼとオセルタミビル)

図 1 TUTMOL による分子表示

参考文献

- [1]. 江川崇, 竹端進, 山田暁通, 麻野耕一, 山岡敏夫, 藤井大助, 藤田泰介, 佐野徹郎, 「Google Android プログラミング入門」, アスキー・メディアワークス社, pp 648, 2009.
- [2]. J.D.Foley, A.van Dam, Morgan Mcguire, Kurt Akeley, David F. Sklar, S.K.Feiner and J. F. Hughes, "Computer Graphics: Principles and Practice", Third Ed., Addison-Wesley, 2012.