SCCJ Cafe –Season 4– 分子のかたち (5) 「分子閲覧ソフト」

工藤 高裕

大阪大学蛋白質研究所 日本蛋白質構造データバンク 〒565-0871 大阪府吹田市山田丘3-2

E-mail: t-kudou@protein.osaka-u.ac.jp

(Received: November 24, 2015; Accepted for publication: December 10, 2015; Online publication: December 18, 2015)

キーワード: 分子閲覧ソフト, 分子ビューアー, Java, JavaScript, WebGL, モバイル, jV

1 分子を見るためのソフトウェア

これまでに、いくつものタンパク質立体構造を示してきましたが、これらの図は「分子閲覧ソフト」(分子ビューアー, molecular viewer)と呼ばれる分子視覚化ソフトウェアを使って作成したものです。今回はそのソフトウェアについて紹介します。

2 入力データ

分子閲覧ソフトの入力データである「分子構造データ」にはいくつかの書式があります [1]。現在、多くのソフトウェアが対応している「PDBフォーマット」ですが、廃止の方向性が示されている書式であることに注意してください。将来的には入出力データの書式に「PDBx/mmCIF」や「PDBML」を使うようになりますので、これらに対応したソフトウェアを利用することをお勧めします。

3 ソフトウェアの動作環境と特徴

ソフトウェアを動作させる上で必要とされる環境にいくつかのタイプがあります。以下に特徴などを示します。

3.1 Java系

コードがJavaで書かれているソフトウェアです。実行

にはJava実行環境(Java Runtime Environment, JRE)が必要ですが、逆にJREさえあればOSに依存なく使えるところが利点です。これまで単独ソフトウェアとして、あるいはウェブページに埋め込むアプレット(applet)としても広く使われてきました。一方、短所はモバイル環境に対応していないことや、最新のブラウザにおいてアプレット実行に対する制約が厳しくなっていることが挙げられます。PDBjで開発しているjV [2]や、オープンソースで開発が進められているJmol [3]がこの系列のソフトウェアになります。なおJmolは多言語対応が進んでいて、メニューなどを日本語などで表示することができます。

3.2 JavaScript系

コードがJavaScriptで書かれているソフトウェアです。JREは必要とせず、基本的にはウェブブラウザが動作すればモバイル環境も含めOSの種類に関係なく動作しますが、大きな分子の動作がスムーズにいかないなどパフォーマンス面でJava系より見劣りします。JmolをJavaScriptに移植したJSmol [3]がこのタイプになります。

3.3 WebGL系

JavaScriptにWebGL (Web Graphics Library)を追加したものです。ウェブブラウザ上で動作するという点では前項と同じです。動作は前項のタイプより軽快ですが、コ

マンドで細かく表示を調整する機能を備えたソフトウェアはまだないようですので、今のところ気軽に分子を眺める用途が中心になると思います。また、一部古い環境には対応していません。PDBjで開発しているmolmil [4]や、オープンソースのGLmol [5]などがこれに該当します。

3.4 モバイル端末用

AndroidやiOSなどのモバイルOSにアプリをインストールして使うタイプのもので、Google PlayやApp Storeなどのアプリ提供サイトから入手できます。GLmolのAndroid版であるESmolやNDKmol [5]、後述するPyMol [6]のiOS用アプリPyMol on the iPad [7]、Android/iOS用がそれぞれ提供されているRCSB PDB Mobile [8]などがあります。展示などでタブレット端末を使い、手軽に分子を見てさわってもらおうといった用途にも使えます。

3.5 パソコン用

その他パソコンにインストールして使うタイプのものがあります。原則として追加のソフトウェアは必要としません。RasMol [9]、PyMOL [6]、UCSF Chimera [10]などが挙げられます。これまで紹介したものに比べ高度な細かい操作ができますが、フリーウェアではないものもあります。例えば、UCSF Chimeraは大学などに所属する人に限りフリーで使えるソフトウェアです。

4 どれを使えばいいのか

いくつかソフトウェアを挙げましたが、実際のソフトを使ったらいいか迷われるかも知れません。どれがいいかというのは目的や人の好みにも依存しますが、大まかに次のようなことは言えるのではないかと思います。

ちょっとパソコンで分子を見てみたいという程度であれば、第1回 [11]で紹介した万見 [12]などウェブサービスを使うのがいいでしょう。ソフトウェア本体をインストールする必要はなく、ウェブブラウザさえあればみるができます (Java系のソフトウェアが使われている場合はJREの事前インストールが必要です)。

モバイル端末であれば、利用するOS環境に対応したアプリをインストールしてみるのもいいかも知れません。

Figure 1. The procedure to get jV application.

Table 1. The scripts for jV startup

OS	Startup Script
Windows	startup.bat
Mac OS	startup.command
Linux	startup.sh

論文に掲載するなどより詳細な説明図を作成するのであれば、パソコン用ソフトウェアをインストールして作図するという方法がよく用いられているようです。

5 図の作り方-jVの場合

では、第2回 [13]Figure 4で示したヘモグロビンの図をjVで作成する具体的事例を紹介することにします。JREは既にインストールされているものとします。

jVポータルページ [2]にアクセスし、Figure 1に示すように「バイナリファイル(jar版)」リンクをクリックし、利用規約に合意して頂くと、ダウンロードページにアクセスできます。

zipとtar.gzの2種類の圧縮形式で提供されていますが、どちらも内容は同じです。Windowsの場合はzipの方が追加ソフトをインストールする必要がなく便利かと思います。

圧縮ファイルを解凍し展開して、起動スクリプトを実行すればjVを起動することができます。利用する起動スクリプトはOSによって異なります。各OSの起動スクリプトをTable 1に示します。環境に応じた起動スクリプトを実行すればjVを起動することができます。

Table 2. The commands and menu actions to create the image in the Figure 2.

Commands	Comments
load ftp 2hbb	PDBID 2hbb の構造データを
[Open – Remote]-[PDBID]	読み込む
background white	背景を白にする
wireframe off	針金表現を消す
select protein	タンパク質だけを選択する
[Display]-[Backbone]	主鎖表現にする
select protein & *:A	A 鎖のタンパク質部分を選択する
color magenta	赤紫色にする
select protein & *:B	B 鎖のタンパク質部分を選択する
color gold	金色にする
select protein & *:C	C 鎖のタンパク質部分を選択する
color skyblue	水色にする
select protein & *:D	D 鎖のタンパク質部分を選択する
color blue	青色にする
select [HEM]	ヘム部分を選択する
cpk	各原子を球で表示する
select 6:B 6:D	B 鎖 6 番残基と D 鎖 6 番残基を選択する
[Display]-[Ball & Stick]	棒と球で表現する
color cpk	原子別配色にする
rotate z 90	Z 軸を中心に 90°回転する
rotate y 180	Y 軸を中心に 180°回転する
[File]-[Save]-[JPEG]	表示内容を jpeg 形式の画像に保存する

Table 2. に操作コマンドによる操作を紹介します(一部メニュー操作). jV の操作コマンドについて詳しくはマニュアルページ [14] を参照下さい.

これまで全5回に渡ってタンパク質を始めとする生体分子の構造データに関して紹介させて頂きました. 紹介しきれなかった部分もたくさんありましたが, 今後はオンラインヘルプの充実化をより進めるなど何らかの形で更に情報をご提供して行きたいと考えています. 最後になりましたが, このような機会を与えて下さった

Figure 2. The static image created by the procedure described in the table 2.

日本コンピュータ化学会の皆さまに感謝します.

References

- [1] T. Kudou, SCCJ Cafe –Season 4– Shape of Protein Molecules (4) 'Description of Molecular Structural Information in PDB', *J. Comput. Chem. Jpn.*, **14**, A13 (2015). [[CrossRef](#)]
- [2] jV <http://pdbj.org/jv/>
- [3] Jmol/JSmol <http://jmol.sourceforge.net/>
- [4] molmil <http://pdbj.org/help/molmil>
- [5] GLmol/ESmol/NDKmol <http://webglmol.osdn.jp/>
- [6] PyMOL <http://www.pymol.org/>
- [7] PyMol on the iPad <http://pymol.org/mobile>
- [8] RCSB PDB Mobile <http://www.rcsb.org/pdb/static.do?p=mobile/RCSBapp.html>
- [9] Rasmol <http://www.openrasmol.org/>
- [10] UCSF Chimera <http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>
- [11] T. Kudou, SCCJ Cafe –Season 4– Shape of Protein Molecules (1) 'Protein Data Bank', *J. Comput. Chem. Jpn.*, **13**, A14 (2014). [[CrossRef](#)]
- [12] Yorodumi <http://pdbj.org/yorodumi/>
- [13] T. Kudo, SCCJ Cafe –Season 4– Shape of Protein Molecules (2) 'Explore Hemoglobin', *J. Comput. Chem. Jpn.*, **13**, A21 (2014). [[CrossRef](#)]
- [14] jV manual http://pdbj.org/jv/manual/index_ja.html

SCCJ Cafe –Season 4– Shape of Protein Molecules (5) ”Molecular Viewer”

Takahiro KUDOU

E-mail: t-kudou@protein.osaka-u.ac.jp

Some molecular viewers that can visualize molecular structural data have been introduced. Those viewers can be generally classified into some categories, such as Java based, JavaScript based, WebGL based, for mobile and for PC. The Java based software that requires the Java Runtime Environment (JRE) is widely used both for a local application and an embedding one in web pages. The JavaScript based software only requires a web browser without JRE but the response speed is lower than the Java based one. The WebGL based softwares work more lightly than the formers, but I think so far there is no software with an advanced display controller such as a command interface. For mobile devices, some molecular viewers are provided from application distribution sites, such as Google Play and App Store. Many viewers for PC environment have some advanced controllers for changing expressions of molecular modeling images and drawing them in detail. As an example, a series of operating procedure scripts for creating a molecular image using a stand-alone application, called "jV", was introduced here.

Keywords: molecular viewer, Java, JavaScript, WebGL, mobile, jV