

КРАТКЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 681.3.068 : 54

Т. А. БОРОВИНА, О. С. КИСЛЮК
(Владивосток)

**ИНТЕРАКТИВНАЯ СИСТЕМА ПОЛУЧЕНИЯ ИЗОБРАЖЕНИЙ
И АНАЛИЗА СТРОЕНИЯ СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛ
С ПОМОЩЬЮ РАСТРОВЫХ ГРАФИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ**

Физические, химические и биологические свойства молекул тесно связаны с их пространственным строением. Поэтому изучение трехмерной структуры соединений — важная задача многих областей современной химии. Мощные средства такого анализа предоставляет сегодня интерактивная машинная графика [1—6]. Наибольший эффект достигается в тех случаях, когда с помощью ЭВМ получают изображения молекулы, соответствующие различным моделям ее строения (химические связи; объемные ван-дер-ваальсовы модели; поверхность, доступная растворителю) и дающие исследователю взаимно дополняющую информацию.

Диалоговая система МОЛЛЮСК-11 предназначена для получения цветных растровых изображений молекул. Наиболее употребительными из возможных в системе являются следующие типы изображений:

а) атомы представлены цветными шарами ван-дер-ваальсова радиуса, цвет обозначает тип атома — номер элемента по таблице Менделеева, химическим связям соответствует пересечение шаров-атомов;

б) атомы даны в виде цветных шаров произвольного радиуса, связи — в виде полос в трехмерном пространстве;

в) изображены только связи между атомами.

Диалоговая система предоставляет следующие возможности: 1) загрузка описания молекулы в виде списка атомов с их декартовыми координатами и списка связей; 2) выбор типа изображения «а — в»; 3) вращение молекулы в трехмерном пространстве вокруг осей X, Y, Z; 4) изображение молекулы целиком (увеличение выбирается автоматически); 5) изображение части молекулы для более детального изучения; 6) изменение размеров шаров-атомов и ширины полос, описывающих связи; 7) построение сечения молекулы (или ее части) плоскостью; 8) вывод только атомов указанных типов; 9) вывод таблицы соответствия элементов таблицы Менделеева и цветов на экране; 10) получение твердой копии.

Для создания растрового изображения используется сканирующий алгоритм. На первом этапе работы алгоритма осуществляется адресная сортировка атомов и связей так, что каждой строке изображения соответствует список атомов и связей, проекции которых пересекаются с данной строкой, но не пересекаются с предыдущими.

На втором этапе работы алгоритма осуществляется построчное сканирование экрана, причем за счет предварительной сортировки анализируются только те шары и полосы, которые заведомо пересекаются с данной строкой.

Рассмотрим обработку сканирующей прямой $y = y_0$. Число сканирующих ячеек по x -координате равно NX , x изменяется от x_0 до x_1 . Результатом обработки данной прямой является формирование буферов глубины (z -буфер) и цвета, соответствующих объектам, видимым в участках экрана с координатами (x_0, y_0) , $(x_0 + (x_1 - x_0)/NX, y_0)$, ..., $(x_0 + (NX - 1)(x_1 - x_0)/NX, y_0)$, (x_1, y_0) . Первоначально в z -буфер и буфер цвета помещены величины, соответствующие глубине и цвету «фона» (цвет представлен тремя значениями составляющих R , G и B). При рассмотрении пересечения строки $y = y_0$ с проекцией атома (полосы) на экранную плоскость определяется участок z -буфера и буфера цвета, в котором возможны изменения. Модификация буфера глубины ведется по формуле $z(x, y) = \min(z(x, y), z_1(x, y))$, где $z_1(x, y)$ — глубина, соответствующая участку x, y проекции рассматриваемого атома (полосы); изменение в аналогичной ячейке буфера цвета происходит, только если изменилось значение глубины.

При вычислении освещенности сцены предполагается, что источник света совпадает с точкой наблюдения. Для каждой световой компоненты яркость свечения

элемента экрана считается по упрощенной формуле
$$c = \frac{c_0}{1 + \left(\frac{dz}{dx}\right)^2 + \left(\frac{dz}{dy}\right)^2}.$$

дающей для подобных изображений вполне удовлетворительный визуальный эффект.

Диалог с системой МОЛЛЮСК-11 ведется с алфавитно-цифрового дисплея, изображения выводятся на цветную растровую систему PERICOLOR и устройство цветной печати COLORPLOT (для перехода на другую конфигурацию УВВ требуется незначительная настройка системы). Используется метод доступа, описанный в [7].

Для получения изображения необходимо задать информацию о молекуле, таблицу цветов атомов (можно воспользоваться стандартной), таблицу радиусов атомов (для изображений типа «б»), ширину и цвет полос-связей (для изображений типа «б, в»).

Подробнее рассмотрим структуру информации о самой молекуле. В версии МОЛЛЮСК-11 предусмотрен ввод сведений о молекуле в виде списка атомов и их декартовых координат и списка связей — файлы АТОМ и СВЯЗЬ.

Формат записи в файле АТОМ:

$\langle T \rangle \langle X \rangle, \langle Y \rangle, \langle Z \rangle$ [*комментарий*],

где $\langle T \rangle$ — тип атома (номер по таблице Менделеева);

$\langle X \rangle, \langle Y \rangle, \langle Z \rangle$ — координаты атома.

Формат записи в файле СВЯЗЬ:

$\langle N1 \rangle, \langle N2 \rangle$ [*комментарий*],

где $\langle N1 \rangle, \langle N2 \rangle$ — номера строк в файле АТОМ, описывающих нужные атомы.

Ширина и цвет полос-связи, радиусы и цвета атомов — информация для построения изображения — задаются в файле ТАБ.

В начале сеанса пользователь системы МОЛЛЮСК-11 выдает команду GET, которая загружает в оперативную память описание молекулы. Выводу изображения на экран должна предшествовать команда VV — команда спецификации типа вывода:

$VV\langle \text{тип вывода} \rangle, \{, \langle \text{тип атома} \rangle\}$,

где $\langle \text{тип вывода} \rangle$ — целое 1 — тип «а»,

2 — тип «б»,

3 — тип «в»;

$\langle \text{тип атома} \rangle$ — целое (типы атомов, которые не нужно выводить).

Команды SCA $\langle \text{коэффициент} \rangle$; и SCV $\langle \text{коэффициент} \rangle$; служат для изменения радиуса атомов (своеобразное изменение «прозрачности») и ширины полосы-связи в течение сеанса при работе с изображениями типа «б» и «в».

Поворот молекулы в пространстве осуществляется командой R $\langle \text{ось} \rangle, \langle \text{угол} \rangle$, где $\langle \text{ось} \rangle$ — X, Y или Z, $\langle \text{угол} \rangle$ — угол поворота в радианах. Происходит последовательный поворот вокруг указанных осей на указанные углы.

Команды DA, DM и D служат для непосредственного вывода изображений на растровое устройство. Все они могут иметь параметр $0 \leq \langle z \rangle \leq 1$, определяющий положение плоскости сечения XY относительно протяженности молекулы по глубине (выводятся только атомы, лежащие за плоскостью сечения).

DA $\langle z \rangle$; — вывод с автоматическим увеличением;

DM $\langle z \rangle$; — вывод без автоматического увеличения;

D $\langle z \rangle, \langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle d \rangle$; — вывод увеличения участка уже имеющегося изображения для более детального рассмотрения, здесь $\langle x \rangle, \langle y \rangle$ и $\langle d \rangle$ — параметры, определяющие положение и размеры квадратного окна в системе координат растрового устройства (могут быть легко получены с помощью курсора системы PERICOLOR).

Время работы алгоритма $t = a + bN + cN^{2/3} + dN^{1/3}$, где N — количество атомов в молекуле. Команда DA выполняется на ЭВМ ЕС-1033 для молекулы из пяти атомов за 70 с, для 200 атомов за 90 с, для 1000 атомов за 135 с (изображения типа «а»).

В настоящее время ведется работа по созданию 2-й версии системы. Добавятся следующие возможности: 1) операция вращения вокруг оси, соединяющей два атома молекулы (атомы задаются указанием на экране с помощью курсора), например, вращение вокруг химической связи; 2) построение стереопары; 3) другие типы ввода информации о молекулах; 4) построение и вывод поверхности, доступной растворителю и др.

Представленная работа выполнена в лаборатории машинной графики Института автоматики и процессов управления ДВНЦ АН СССР и в настоящее время используется в Институте химии и Тихоокеанском институте биоорганической химии Дальневосточного научного центра. Разработка новых версий системы МОЛЛЮСК также происходит в контакте с сотрудниками этих институтов.

Авторы благодарят В. А. Бобкова и В. Л. Перчука за поддержку в проведении работы, А. К. Мазура и М. Г. Петухова за участие в обсуждении проекта.

ЛИТЕРАТУРА

1. Connolly M. L. Solvent-accessible surfaces of proteins and nucleic acids.— Science, 1983, v. 221, N 4612, p. 709.
2. Connolly M. L. Analytical molecular surface calculation.— Appl. Crystallography, 1983, v. 16, p. 548.
3. Max M. L., Malhotra D., Hopfinger A. Computer graphics and the generation of DNA conformation for intercalation studies.— Computer and Chemistry, 1981, v. 5, p. 19.
4. Egan J. T., Hast J., Burt S. K., Macelroy R. D. The display of molecular models with the AMES interactive modeling system (AIMS).— Computer and Graphics, 1982, v. 6, p. 177.

5. Bash P. A., Pattabiraman N., Huang C. e. a. Van der Waals surfaces in molecular modeling: implementation with real-time computer graphics.— Science, 1983, v. 222, p. 1325.
6. Одеянко Б. Н., Нигматуллин Р. С. Построение объемных молекулярных моделей с помощью вычислительной машины.— ЖСХ, 1977, т. 17, № 1.
7. Васильев А. А. Метод доступа для цветной растровой дисплейной системы PERICOLOR.— Владивосток, 1981. (Препринт/ДВНЦ АН СССР, ИАПУ; 27).

Поступило в редакцию 29 января 1985 г.

УДК 681.3.06

А. И. ОСТРОВНОЙ
(Дубна Московской)

МЕТОДИКА ПРОГРАММИРОВАНИЯ СИСТЕМ АВТОМАТИЗАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ НА ЯЗЫКЕ ПАСКАЛЬ

В работе описывается методика программирования систем автоматизации спектральных экспериментов на языке Паскаль, основанная на использовании набора типовых решений для поставленных перед программистами задач. В качестве таких типовых решений предлагается: 1) использовать унифицированную организацию программного обеспечения систем автоматизации; 2) представлять алгоритмы обработки в виде параллельных процессов; 3) программировать операции с аппаратурой КАМАК с помощью набора процедур в соответствии с предложениями комитета ESONE [1]; 4) для архивизации данных и интеграции программ накопления с программами обработки использовать простую базу данных [2].

Перечисленные типовые решения коротко описаны ниже. Они определяют лишь форму решения задач и позволяют концентрировать внимание и усилия на прикладных аспектах проблемы разработки программного обеспечения конкретных экспериментов.

Унифицированная организация программных систем (рисунок) включает процедуры обработки прерываний; алгоритмы обработки, представленные в виде параллельных процессов; таблицу переменных состояния процессов (ПСЦ); интерпретатор интерактивных приказов и монитор. Все программные компоненты имеют доступ к глобальным переменным, к базе данных и специальному файлу, в котором хранится информация о текущем состоянии аппаратуры, программной системы и проводимых измерений.

Процедуры обработки прерываний обеспечивают передачу информации между оперативной памятью (набором глобальных переменных) и аппаратурой КАМАК. Они выполняют минимально необходимые действия, а если требуется дальнейшая обработка поступившей информации, то устанавливается флаг готовности в переменной, отражающей состояние нужного процесса. Монитор, просматривая таблицу ПСЦ, обнаруживает готовый к работе процесс и инициирует его. Одновременно монитор обеспечивает прием приказов с терминала пользователя, и если приказ введен, то инициирует интерпретатор.

Специальный файл, содержащий информацию о состоянии системы, автоматически создается в момент первого запуска программной системы. В дальнейшем ра-

