



СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

1072/2-80

10/iii-80

P11 - 12837

А.А.Карлов, Т.Ф.Смолякова

ОРГАНИЗАЦИЯ ДИАЛОГОВОЙ РАБОТЫ  
В ЗАДАЧЕ ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛИ  
МОЛЕКУЛЫ БЕЛКА

1979

Карлов А.А., Смолякова Т.Ф.

P11 - 12837

Организация диалоговой работы в задаче построения модели молекулы белка

Рассматривается организация диалога "Человек-ЭВМ" при программировании задачи построения модели молекулы белка. Описаны функциональные возможности и структура созданной диалоговой программы, в том числе общее управление прохождением задачи, представление на экране и редактирование начальных данных, анализ результатов вычислений и т.п. При организации диалога использовались унифицированные, т.е. не зависящие от прикладной задачи, системные программные средства для задания структуры диалога, обработки сообщений и доступа с терминала к диалоговым переменным в программе пользователя. Работа проводилась с применением удаленной дисплейной станции БЭСМ-6 ОИЯИ.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Karlov A.A., Smolyakova T.F.

P11 - 12837

Organization of the Man-Machine Dialog for Construction of the Protein Structure

The programming of the man-machine dialog for construction space molecular structures is considered. The description of functional possibilities and programme structure, including the general control of the calculation process, representation and edition of initial data, the analysis of calculation results and similar ones are given. In programming the man-machine dialog a general system program facilities for the definition of dialog structure, message processing and an access of the user to his program variables from the terminal have been used. For realization of the man-machine dialog the BESM-6 remote graphic display station have been used.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Молекулярная биология является одной из многочисленных областей науки, где автоматизация проводимых исследований открывает широкие перспективы для повышения их эффективности.

В настоящее время одной из актуальных проблем является расшифровка пространственной структуры молекул. Изучение структур молекул сложных соединений с помощью классических методов представляет собой весьма трудоемкий процесс, который не дает достаточной наглядности получаемых результатов. Применение ЭВМ в исследовании молекулярных соединений позволяет избежать многих недостатков, присущих экспериментальным методам. Одно из направлений по дальнейшему увеличению степени автоматизации этих исследований состоит в использовании интерактивных графических систем<sup>1-3</sup>. Повышение эффективности процесса исследований достигается при этом за счет оперативного анализа результатов, получаемых в удобной графической форме, а также принципиально новых возможностей представления и изучения пространственных структур молекул.

## 2. ОБЩЕЕ ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Данная работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ применительно к задаче построения и анализа белковой молекулы пепсина<sup>4,7</sup>. Построение модели пространственной структуры молекулы белка проводилось в режиме диалога с использованием удаленной дисплейной станции /УДС/, подключенной к ЭВМ БЭСМ-6<sup>5,6</sup>. Данные о картах электронной плотности для сечений по трем координатным осям, а также предварительные данные о пространственной структуре молекулы записывались в виде файлов на магнитном диске. Процесс расчетов для получения этих данных в работе не рассматривается.

Организация диалога "Человек-ЭВМ" во многих случаях предполагает решение следующих основных вопросов:

- управление прохождением исходной /расчетной/ задачи;
- редактирование начальных данных или параметров;
- анализ результатов расчета.

Диалоговая работа пользователя с программой осуществляется посредством вводимых с клавиатуры дисплея команд, через которые обеспечивается доступ к тем или иным возможностям программы.

Использование комплекса программ, разработанных для удаленных дисплейных станций БЭСМ-6<sup>16/</sup>, позволило достаточно эффективно и с минимальными затратами на программирование организовать на языке высокого уровня /ФОРТРАН/ диалог, удовлетворяющий всем перечисленным требованиям.

Унифицированный механизм обработки сообщений<sup>17/</sup>, а также аппарат диалоговых переменных<sup>18/</sup>, входящие в состав математического обеспечения УДС, предоставляют удобные в использовании программные средства для управления прохождением задачи, представления и редактирования параметров. Последнее обеспечивается за счет того, что редактируемые параметры объявляются в программе в качестве диалоговых переменных, в результате чего они становятся доступными для изображения на экране и редактирования с помощью системных сообщений.

Формирование изображений фрагментов карт электронной плотности, построение изолиний, координатных осей и различной вспомогательной графической информации обеспечивается с помощью подпрограмм дисплейной библиотеки, имеющейся на БЭСМ-6<sup>19/</sup>. Подпрограмма построения изолиний<sup>10/</sup> допускает вывод изображения как на экран дисплея, так и на графопостроитель.

### 3. ПРИКЛАДНЫЕ ПОДПРОГРАММЫ

Для построения модели молекулы в режиме диалога было создано программное обеспечение, состоящее из набора модулей. Каждый модуль представляет собой отдельную подпрограмму пользователя, предназначенную для выполнения одного приказа. Эти модули оформлены в виде пакета прикладных подпрограмм, который хранится на магнитном диске. После ввода приказа пользователя в оперативную память ЭВМ загружается соответствующий модуль и производится его выполнение /через системную подпрограмму LOADGO/.

После выполнения модуля занимаемая им оперативная память ЭВМ может быть использована для работы с другим модулем. Такая организация доступа к исполнительным модулям позволяет при ограниченных ресурсах оперативной памяти иметь пакет прикладных подпрограмм, общий объем которых ограничен лишь размером внешней дисковой памяти.

### 4. ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ

Для построения молекулярных моделей в режиме диалога, согласно требованиям задачи, пользователю предоставляются следующие основные возможности:

1. Запуск и перезапуск задачи, прекращение счета, выдача диагностических сообщений в случае особых ситуаций /ошибки в задании данных, сбой аппаратуры и т.п./.

2. Представление на экране дисплея в виде таблицы семи параметров с возможностью их редактирования; эти параметры определяют:

- прямоугольный фрагмент, выбранный на текущей карте электронной плотности /параметры X1, X2, Y1, Y2./;
- начальный и конечный уровни плотности, а также шаг между двумя смежными уровнями /параметры LS, LF, LST соответственно/.

3. Формирование на экране изображения отдельного фрагмента для выбранной карты электронной плотности с изображением изолиний, соответствующих заданным уровням плотности; при этом должна быть предусмотрена возможность наложения фрагментов "соседних" карт с целью обеспечения пространственного анализа информации.

4. Выдача на экран изображения предварительного "скелета" молекулы, совмещенного с изображением выбранного фрагмента карты электронной плотности.

### 5. НАЗНАЧЕНИЕ ПРОГРАММЫ IZLINE

Программа IZLINE является головной программой пакета прикладных программ пользователя.

После запуска на БЭСМ-6 диалогового монитора вхождение в программу IZLINE осуществляется посредством системного сообщения /A,IZLINE /рис. 1/. В программе IZLINE производится начальная установка ряда вспомогательных переменных, задается структура диалога /т.е. набор допустимых сообщений пользователя/, а также описываются в качестве диалоговых те переменные /начальные параметры/, редактирование которых необходимо для данной задачи. Диалоговые переменные объединены в группу, что упрощает пользователю процедуру их представления на экране и редактирование. После этого следует переход к циклу ожидания сообщения от пользователя.

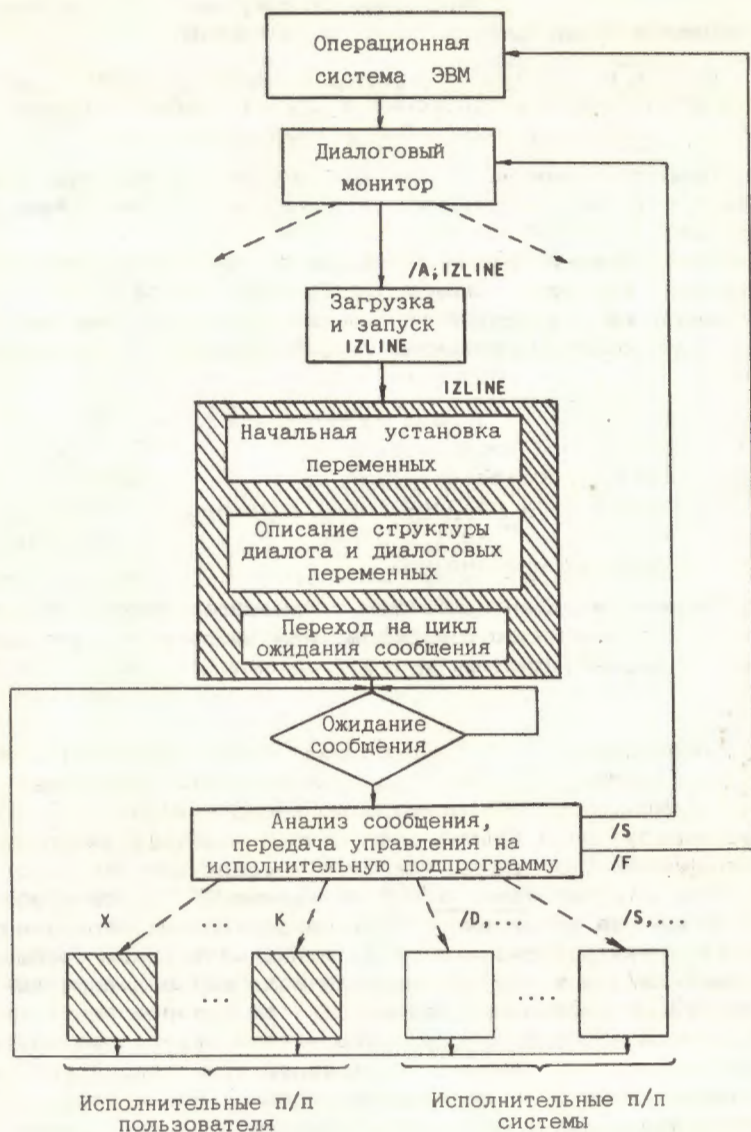


Рис. 1. Структура программы IZLINE.

Часть программы IZLINE, выполняющая перечисленные функции, имеет следующий вид:

```

DIMENSION LT(18), GBUF(32)
      .
      .
DATA(LT(I), I=1, 15)=1HX,...
      .
      .
CALL  BSLT(LT, 18)
CALL  BSGBF(GBUF, 32)
      .
CALL  BSGLR(X1, 2HX1)
      .
CALL  BSGLR(Y2, 2HY2)
      .
CALL  BSGLI(LS, 2HLS)
CALL  BSGLI(LF, 2HLF)
CALL  BSGLI(LST, 3HLST)
      .
CALL  BSGRP(4)
      .
CALL  BSWAIT
      .
END

```

- выделение массивов для задания структуры диалога и диалоговых переменных.
- Описание структуры диалога /т.е. задание соответствия между сообщениями пользователя и исполнительными подпрограммами/.
- Задание таблицы диалоговых переменных.
- Объявление диалоговых переменных X1, X2, Y1, Y2, определяющих границы фрагмента.
- Объявление диалоговых переменных, определяющих диапазон изменения уровней плотности и шаг.
- Объединение объявленных диалоговых переменных в группу с номером 4.
- Переход на цикл ожидания сообщения.
- Выход.

После перехода на цикл ожидания сообщения диалог пользователя с программой осуществляется посредством системных сообщений и сообщений пользователя, выбранных соответственно требованиям данной задачи.

#### 6. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ НА ЭКРАНЕ И РЕДАКТИРОВАНИЕ НАЧАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Начальными данными являются следующие параметры:

X1, X2, Y1, Y2

- прямоугольный фрагмент, выбранный на текущей карте электронной плотности;

LS, LF

- начальное и конечное значения уровня плотности;

LST

- шаг между двумя смежными значениями уровня плотности.

Для простоты и удобства представления в виде таблицы на экране перечисленные начальные данные объединены в группу диалоговых переменных с заданным номером /в данном случае с номером 4/.

Задание перечисленных начальных условий определяет выбор размера фрагмента и задания значений линий уровня на текущей карте электронной плотности.

- |     |  |   |
|-----|--|---|
| /D, | < номер группы >                       | - Выдача на экран группы диалоговых переменных /например: /D,4 /  |
| /D, | < имя переменной >                     | - Выдача отдельной диалоговой переменной в стандартное место на экране /например: /D,X1/                            |
| /S, | < имя переменной >, < новое значение > | - Присвоение нового значения диалоговой переменной с выдачей в стандартное место на экране /например: /S,LST,200 /. |

Выбор формата представления чисел в приведенных выше сообщениях производится системой автоматически по правилу умолчания. При необходимости в сообщении пользователь может указать требуемый ему формат /например: /D,4, 'E15.6' или /D,X1, 'F5.2' /.

## 7. АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ

Для выдачи на экран изображения отдельного фрагмента выбранной карты электронной плотности /рис. 2/

используются следующие сообщения:

- |    |                     |   |
|----|---------------------|---|
| X, | < номер плоскости > | - Выдача на экран изображения фрагмента для плоскости с заданным номером в прямоугольной системе координат для X=CONST, Y=CONST, Z=CONST. |
| Y, | < номер плоскости > |   |
| Z, | < номер плоскости > |   |
| N, | < номер плоскости > | - Выдача на экран фрагмента для плоскости X в косоугольной системе координат.   |

С целью обеспечения пространственного анализа информации предусмотрена возможность наложения фрагментов "соседних" карт:

- |    |  |
|----|--|
| NN | - выдача на экран изображения следующего фрагмента с наложением на изображение предыдущих. |
| NB | - выдача на экран изображения фрагмента, предшествующего уже представленным на экране.     |

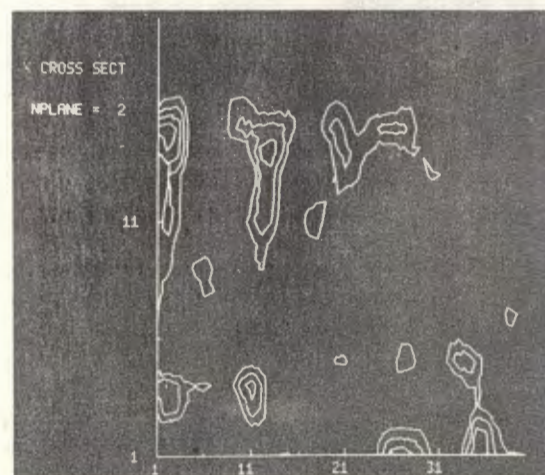
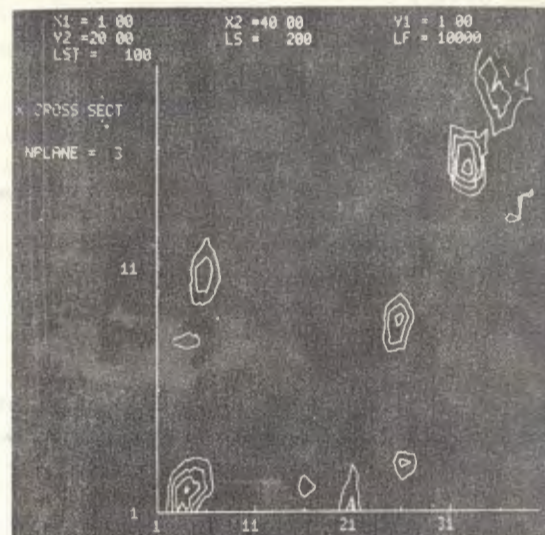


Рис. 2. Примеры изображений фрагментов карт электронной плотности.

Сообщения NN и NB используются для последовательного просмотра группы изображений фрагментов в прямом и обратном направлениях вдоль выбранной оси. Одновременно можно наблюдать несколько смежных фрагментов.

Для улучшения пространственного эффекта предусмотрено сообщение:

K - выдача на экран изображения следующего фрагмента со стиранием невидимых линий.

Приказ K идентичен приказу NN. Режим наложения фрагментов в обратном порядке со стиранием невидимых линий, аналогичный действию приказа NB, не предусмотрен в связи с ограничениями, накладываемыми алгоритмом стирания невидимых линий.

После нахождения путем просмотра изображений отдельного фрагмента, с которого можно начать "подгонку" предварительного скелета к картам электронной плотности, визуальный анализ изображения производится при помощи следующего сообщения:

S - выдача на экран изображения предварительного скелета молекулы, совмещенного с изображениями фрагментов для нескольких карт электронной плотности.

#### 8. ПОВТОРНЫЙ ЗАПУСК И ВЫХОД ИЗ ДИСПЛЕЙНОЙ ПРОГРАММЫ

Для возврата в диалоговую систему /т.е. на системный цикл ожидания/ используется системное сообщение /S. После этого возможен повторный вызов программы IZLINE через системное сообщение /A, IZLINE.

Системное сообщение /F предназначено для прекращения работы с диалоговой системой.

#### 9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, на программирование диалога для данной задачи потребовались следующие затраты:

1. Составление головной части программы (IZLINE), которая включает:

- а/ описание набора из восьми сообщений пользователя;
- б/ описание набора из семи диалоговых переменных с объединением их в группу;
- в/ переход на цикл ожидания сообщений.

2. Составление /с использованием подпрограмм дисплейной библиотеки/ восьми исполнительных подпрограмм, соответствующих сообщениям пользователя.

Все остальные функции: формирование запросов на ввод сообщений, проверка сообщений на корректность, организация вызова исполнительных подпрограмм, обработка системных сообщений, выдача сопроводительных сообщений и диагностики и т.п. - обеспечиваются диалоговой системой, их реализация скрыта от пользователя и не требует от него никаких затрат.

Организация диалога в данной задаче позволяет легко расширять функциональные возможности программы путем добавления новых сообщений пользователя и соответствующих исполнительных подпрограмм. В частности, в настоящее время проводится работа, в результате которой появится возможность редактирования скелета молекулы на основе анализа карт электронной плотности.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Wright W.V. An Interactive Computer Graphic System for Molecular Studies. Ph.D. Dissertation. Dep. Comput. Sci., Univ. of North Carolina, Chapel Hill, 1972.
2. Нигматуллин Р.С., Одеанко Б.Н. Автометрия, 1978, 5, с.54.
3. Карлов А.А. и др. ОИЯИ, P11-9881, Дубна, 1976.
4. Андреева Н.С. и др. ДАН СССР, 1976, 228, 2, с.480.
5. Кавченко А.В. и др. ОИЯИ, 10-9325, Дубна, 1975.
6. Карлов А.А., Кирилов А.С., Смолякова Т.Ф. ОИЯИ, P11-12160, Дубна, 1979.
7. Карлов А.А., Смолякова Т.Ф. В кн.: Second Hungarian Computer Science Conference, Preprints v.11, Budapest; ОИЯИ, P11-10440, Дубна, 1977.
8. Карлов А.А., Смолякова Т.Ф. ОИЯИ, D10,11-11264, Дубна, 1977, с.485.
9. Карлов А.А. и др. ОИЯИ, B1-10-11999, Дубна, 1978.
10. Щенкова Г.Б. ОИЯИ, 10-11343, Дубна, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел  
4 октября 1979 года.