

PetiChimiste

Frédéric LEGER

Copyright © 1996-1998 Frédéric LEGER

COLLABORATORS

	<i>TITLE :</i> PetiChimiste		
<i>ACTION</i>	<i>NAME</i>	<i>DATE</i>	<i>SIGNATURE</i>
WRITTEN BY	Frédéric LEGER	June 12, 2022	

REVISION HISTORY

NUMBER	DATE	DESCRIPTION	NAME

Contents

1	PetiChimiste	1
1.1	Modo de empleo de 'PetitChimiste'	1
1.2	Mejoras futuras	2
1.3	Información sobre el programa	2
1.4	Instalación	3
1.5	Preguntas y respuestas	3
1.6	Sección de referencia	4
1.7	Abrir...	5
1.8	Guardar	5
1.9	Generar	5
1.10	Salir	6
1.11	Formato de fichero Molec3D	6
1.12	Cálculos	6
1.13	Teclas	7
1.14	Ventana de control	7
1.15	Ventana de visualización	7
1.16	Aspectos legales	8
1.17	¿Errores?	9
1.18	Agradecimientos	9
1.19	ledj	10
1.20	Historia	10
1.21	Novedades	10
1.22	Sobre este documento...	12

Chapter 1

PetiChimiste

1.1 Modo de empleo de 'PetitChimiste'

PetitChimiste versión 1.45

~¿Novedades de esta versión?~
Herramienta para presentación 3D de moléculas
escrita para AMIGA WB 3.0+ con CPU 020 como mínimo

© Copyright 1996-1998
Frédéric LEGER
Traducción al español de
Dámaso D. Estévez

Introducción
¿Qué es PetitChimiste?

Instalación
¿Cómo instalar el programa?

Preguntas y respuestas
¿Soluciones a problemas comunes?

Sección de referencia
Consultas sobre el uso

Derecho de copia
Aspectos legales

Futuras mejoras
¡Espero que muchas!

Errores conocidos
¿Ninguno?

Créditos
El autor desea agradecer a...

El autor
Dirección del programador

Historia
Evolución histórica

1.2 Mejoras futuras

- Posibilidad de guardar las imágenes generadas y animaciones.
- Generación de imágenes utilizando una paleta de 65535 colores.
- Imágenes de síntesis con movimiento en tiempo real (;muy pronto!).
- Editor integrado.
- Espero añadir gran cantidad de prestaciones de interés...
PERO NUNCA:

[1]~la selección de átomos con el ratón: aunque ya he escrito el código, considero que su interés real es nulo... sólo sirve para que el programador demuestre que lo sabe hacer... de hecho el manual "Los verdaderos programadores" indica en su capítulo nº~26 que "Los verdaderos programadores jamás utilizan el ratón ni ningún otro instrumento similar. El ratón sólo sirve para los analfabetos que no saben reconocer las letras impresas sobre las teclas."

[2]~movimientos controlador por ratón: jamás lo implantaré en Petitchimiste, ya que no se puede trabajar más que con dos ejes de rotación, por lo que no todos los movimientos son posibles.

En realidad, todo esto depende en gran medida del éxito de sociedades como ProDad, Pios y Phase5. Realmente espero que la próxima versión de PetitChemiste podrá ejecutarse sobre pOS, A\BOX o PiosONE :-))

1.3 Información sobre el programa

PetitChimiste es una herramienta para presentación 3D de ←
moléculas ya sea de
forma simplificada como esqueleto o como imagen de síntesis, que además le permite obtener alguna información útil (longitudes de enlaces y ángulos). Para ello, el programa utiliza el
formato de fichero
del programa Molec3D
(copyright 1990 Stefan Abrecht) con algunas variaciones (por ello un fichero generado con PetitChemiste ya no podrá ser leído por Molec3D); además ahora PetitChimiste puede cargar ficheros en formato Alchemy (programa de PC) ayudado (filtrados) por CrossDOS así como ficheros PDB sin sus cabeceras.

1.4 Instalación

***** ←

ATENCIÓN: Esta versión de PetitChimiste necesita
la biblioteca IXEMUL.LIBRARY >=41.3.

Puede encontrar ésta en Aminet en /dev/gcc.

- 1) Pinche con el puntero del ratón doblemente y con rapidez sobre el icono de instalación (es el fichero Install-PetitChimiste: necesitará disponer del programa Installer de Commodore/Amiga International: hay al menos una versión disponible en Aminet). Conteste a las preguntas que se le hagan durante la instalación: PetitChimiste será instalado donde usted indique.
- 2) Consulte la
sección de referencia
del programa.
- 3) ~Si dispone de una potente tarjeta gráfica, puede promocionar la pantalla de PetitChimiste a resoluciones más elevadas con el programa de promoción suministrado con su tarjeta (procure elegir un modo que visualice pixels cuadrados para que la imagen visualizada sea lo más coherente posible).
- 4) ~Puede modificar la prioridad de la tarea y el entrelazado de la pantalla a través de los tipos de herramienta (icono de PetitChimiste). Consulte para más información la sección
Preguntas y respuestas
.
- 5) Ejecute PetitChimiste (seguramente en el idioma elegido,
sino...
).
- 6) Abra (cargue) una molécula...

1.5 Preguntas y respuestas

--¿Mi Amiga se bloquea cuando ejecuto PetitChimiste desde una ventana SHELL!

DEBE ejecutar PetitChimiste SOLO desde el WB pinchando doblemente y con rapidez sobre su icono (el programa necesita una pila de 16~KB).

--¡¡¡La multitarea no funciona!!!

--¡¡¡PetitChimiste es increíblemente lento en mi A4060PPC604!!!

Probablemente ha estado jugando con el tipo de herramienta PRIORITY:
defínalo como PRIORITY=-1.

--¿Porqué se abre una pantalla entrelazada?

Por defecto, el programa se ejecuta abriendo una pantalla entrelazada para que los pixels sean cuadrados. Cambie el tipo de herramienta del icono de PetitChimiste INTERLACED=YES por INTERLACED=NO.

--¿Porqué PetitChimiste dice que no puede abrir la pantalla para la imagen de síntesis?

Es necesario disponer de como mínimo AGA para abrir dicha pantalla, y así, por ejemplo en mi A500, no pude abrirse ésta y he tenido que probar esta prestación sobre un A1200.

--¿Mi ordenador dispone de 8~MB de RAM y sin embargo PetitChimiste me dice que no es capaz de reservar 3.7~MB!

PetitChimiste utiliza siempre largos bloques de RAM contiguos: probablemente la memoria está demasiado fragmentada, así que deberá reiniciar su equipo.

- ¿Porqué PetitChemiste produce un fallo de software ('software failure') en mi Amiga?

Pues porque seguramente su ordenador dispone de una CPU 68000: lo siento, pero este programa requiere al menos una CPU 68020.

- ¿Porqué aparece el mensaje "Imposible abrir biblioteca 'asl.library'"?

Pues porque debe instalar su Workbench correctamente.

- ¿Porqué aparece el mensaje "Imposible abrir biblioteca 'locale.library'"?

Pues porque debe instalar su Workbench correctamente.

Las siguientes preguntas son resultado de
una incorrecta instalación manual

--¿Porqué PetitChemiste falla en mi ordenador bajo WB 2.1? Dispongo de todas las bibliotecas y una CPU potente.

Yo tengo el mismo problema: creo que es debido a que debe disponer de una biblioteca 'graphics.library' < 3.0 (Kickstart)... de hecho, en el código hago uso de la función AllocBitmap() que aparece en la versión 3.0 del SO.

--¿Porqué PetitChemiste no utiliza el idioma correcto?

Porque el programa usará el elegido en el proceso de instalación (debe de haber instalado mal el catálogo correspondiente).

1.6 Sección de referencia

Menús

Abrir...

Molec3D

Alchemy
PDB
Guardar
Generar
Modo rápido
Modo lento
Sobre
Salir
Ventanas

Ventana de control

Ventana principal
o de visualización

1.7 Abrir...

Permite abrir y cargar un fichero en uno de los siguientes los ↔
formatos:

- PC Alchemy
- PetitChimiste o MOLEC3D
 - PDB (sin cabecera).

1.8 Guardar

Le permite guardar un fichero en
formato PetitChimiste

.

1.9 Generar

Esta opción permite obtener una imagen de síntesis ("raytracing") de la molécula, lo cual es muy interesante, ya que visualizar el esqueleto de la molécula no permite distinguir qué átomo está delante y cual detrás. Las imágenes actualmente generadas son de 256 colores.

- * Modo rápido : usa mucha más memoria RAM.
- * Modo lento : generación utilizando el método de versiones anteriores.

Debido a que el modo rápido consume mucha más memoria, el único modo

disponible en equipos básicos será el modo lento (usuarios de A1200).

Recuerde que la memoria reservada para la generación de la imagen es función directa del modo de pantalla (por ejemplo $640 \times 512 \times 8 = 3.72 \sim \text{Mb}$).

Percátese que presionando la tecla ESC se detendrá el proceso de generación de la imagen de síntesis 3D.

1.10 Salir

Termina con la ejecución de PetitChimiste.

1.11 Formato de fichero Molec3D

Ejemplo: un cubo

ETIQUETA	X	Y	Z
C1	0.0	0.0	0.0
C2	0.0	0.0	0.5
C3	0.0	0.5	0.0
C4	0.5	0.0	0.0
C5	0.0	0.5	0.5
C6	0.5	0.5	0.0
C7	0.5	0.0	0.5
C8	0.5	0.5	0.5

C1-C2	C1 está conectado con C2
C1-C4	
C1-C3	
C6-C3	
C7-C8	
C2-C5-C3	C2 está conectado con C5 y C5 con C3
C2-C7-C4	
C4-C6-C8-C5	

1.12 Cálculos

El campo de texto le permite obtener ciertas informaciones.

Por ejemplo: si introduce...

C1-C2	El programa le ofrecerá la longitud de enlace entre ambos átomos de carbono (C1 y C2). Dichas longitudes estarán expresadas en picometros ($1 \text{ pm} = 1 \text{E-12m}$).
-------	--

C1-C2-C3	El programa le ofrecerá el ángulo que forman la terna de átomos de carbono C1, C2 y C3. Los ángulos serán expresados en grados y minutos.
----------	---

1.13 Teclas

Rotaciones: teclado numérico separado

Eje X: 7 ángulo negativo
 8 ángulo = 0
 9 ángulo positivo

Eje Y: 4 ángulo negativo
 5 ángulo = 0
 6 ángulo positivo

Eje Z: 1 ángulo negativo
 2 ángulo = 0
 3 ángulo positivo

Tamaño molécula: teclado numérico separado

+ acerca la cámara a la molécula (ésta aumenta de tamaño)
- aleja la cámara a la molécula (ésta disminuye de tamaño)

Desplazamientos: flechas/teclas de cursor

Desplaza la molécula en el sentido indicado.

1.14 Ventana de control

[Reinicio] o [Reset] Restaura las preferencias (valores por defecto). ↔

Con etiquetas Muestra u oculta los nombres
Sin etiquetas de los átomos (o grupos de átomos).

Mov. rápido Velocidad de movimiento de la molécula
Mov. lento y/o punto de vista de la cámara.

Manual V.A.O.N.C.
Automático Visualización Asistida o no por ordenador.

Cálculos Campo de texto para cálculos.

Teclas Para modificar la vista de la molécula.

1.15 Ventana de visualización

¡¡¡¡~No la seleccione !!!! Esta ventana no tiene asociada ninguna función ↔

ni menú... la

ventana de control
es la que debe estar siempre activa.

1.16 Aspectos legales

Todos los programas y ficheros son propiedad de:

Copyright ©1996-98 LEGER Frédéric Gilles
FRANCIA

Licencia de uso

Esta licencia se aplica al producto denominado PetitChimiste, una colección de programas para el ordenador Amiga, publicados por Frédéric LEGER bajo la denominación de Freeware (software gratuito), lo mismo que la documentación que lo acompaña. Los términos "programa" y "PetitChimiste" que aparecen a lo largo de la documentación se refieren a este producto. La licencia de uso es válida únicamente para usted (personal).

Puede copiar y distribuir copias del código ejecutable del programa y de la documentación, tal como las recibe, a través de cualquier medio, con la condición de que debe distribuir siempre el programa original, sin modificar, con todas las referencias de copyright y las limitaciones de las garantías intactas, así como la documentación que lo acompaña, lo mismo que los ejemplos y cualquier otro fichero que recibiese con el original.

Salvo mención en contra en esta documentación, no puede copiar y/o distribuir este programa sin la documentación y los ficheros adicionales que lo acompañan originalmente. Tampoco puede copiar y/o distribuir versiones modificadas de este programa.

No puede copiar, modificar, sub-licenciar, distribuir o transferir el programa excepto en las formas indicadas de forma expresa en esta licencia de uso. Cualquier intento que contradiga esto es nulo y además cancela su licencia (y por lo tanto su derecho de uso del programa), aunque esto no afectará a aquellos que han recibido copias de usted mientras sigan cumpliendo con las condiciones estipuladas en esta licencia.

Por el mero hecho de copiar, distribuir o usar del programa, usted acepta esta licencia de uso en todos sus términos y condiciones.

Cada vez que redistribuya el programa, los usuarios-receptores reciben automáticamente una licencia procedente del licenciataro original, para copiar, distribuir y/o usar el programa sujeto siempre a los términos y condiciones aquí indicados: usted no puede imponer restricciones adicionales a los derechos aquí garantizados.

No puede desensamblar, descompilar, reconstruir el fichero fuente ni realizar ningún tipo de ingeniería inversa del programa.

También está obligado a cesar la distribución del programa y de sus ficheros asociados si el autor se lo solicita.

Garantías/responsabilidades

NO SE OFRECE NINGUNA GARANTÍA SOBRE EL PROGRAMA, SALVO LA QUE SE OBLIGUE POR LA CORRESPONDIENTE LEY O EN ACUERDO POR ESCRITO. EL POSEEDOR DEL COPYRIGHT Y/O TERCERAS PARTES PROPONEN EL PROGRAMA "TAL CUAL" SIN NINGUNA GARANTÍA, NI IMPLÍCITA NI EXPLÍCITA, NI, PERO NO LIMITÁNDOSE A ELLO, LAS GARANTÍAS IMPLÍCITAS DE COMERCIO Y CONVENIENCIA PARA UN PROPÓSITO PARTICULAR. TODO EL RIESGO EN CUANTO A CALIDAD Y PRESTACIONES DEL PROGRAMA ES ASUMIDO POR EL PROPIO USUARIO: DE MANERA QUE SI EL PROGRAMA FALLASE, TODOS LOS COSTES DE REPARACIÓN, ASISTENCIA O CORRECCIÓN IRÁN A SU CARGO.

EN NINGÚN CASO, SALVO EL OBLIGADO POR LA LEY O POR ACUERDO ESCRITO, EL POSEEDOR DEL COPYRIGHT, O CUALQUIER OTRA PARTE QUE PUEDA REDISTRIBUIR EL PROGRAMA CON LAS CONDICIONES ESPECIFICADAS CON ANTERIORIDAD, SERÁ RESPONSABLE DE LOS DAÑOS, INCLUYENDO DAÑOS GENERALES, PARTICULARES, INCIDENTALES O QUE SURJAN COMO CONSECUENCIA DEL USO O DE SU FALTA DE PERICIA EN EL USO DEL PROGRAMA (INCLUYENDO, PERO NO LIMITÁNDOSE A, LA PÉRDIDA DE DATOS O A LA GENERACIÓN U OBTENCIÓN DE DATOS IMPRECISOS/ERRÓNEOS O PÉRDIDAS HABITUALES POR USTED O DE TERCERAS PARTES O UN FALLO DEL PROGRAMA CUANDO ESTE INTERACCIONA CON OTROS PROGRAMAS), INCLUSO SI CADA PROPIETARIO O TERCERA PARTE HA SIDO ADVERTIDA DE LA POSIBILIDAD DE ESTOS DAÑOS.

Todos los nombres y marcas mencionadas en esta documentación son propiedad de las respectivas empresas/sociedades.

1.17 ¿Errores?

PetitChimiste ha sido probado en:

- A500+, A530 2Mb CHIP 8Mb FAST
KICK 3.1 WB 3.1
- A1200, MTEC 68030 2Mb CHIP 8Mb FAST
KICK 3.1 WB3.1

1.18 Agradecimientos

Quiero dar las gracias a ... hmmm... hmmm...

- a mi padre, quien :
 - * me ha dado la idea de crear este programa.
 - * ha encontrado un error (división por cero) en mi gestor gráfico.
 - * me ha ayudado en la parte matemática.
 - * ha sido el primer usuario que ha utilizado PetitChemiste.
 - * me ha ayudado con los catálogos alemán e catálogo.
- a mi madre, quien :
 - * me ha ayudado a co-escribir el catálogo en alemán.
- Vincent ROUKINE :
 - * por sus útiles consejos sobre la interfaz gráfica.

-

Dámaso D. Estévez

:

* por su enorme trabajo de traducción al español de toda la documentación y del catálogo.

- La redacción de la publicación francesa AMIGANEWS por su tenacidad e imparcialidad (cualidades cada día más difíciles de encontrar hoy en día en la informática). Y por las líneas dedicadas a este programa en los números de mayo de 1997 y de enero de 1998.

^1\$ Ejem... evidentemente Mr. Leger exagera :D
Errr... obviously, Mr. Leger exaggerate something :D

1.19 ledj

Apellido : LEGER
Nombre : Frédéric
Email : fleger@istg-ens.ujf-grenoble.fr

Este programa ha sido escrito en mi A500+, Kickstart 3.1, A530, 8Mb 60ns, 2Mb de memoria CHIP, 1 Giga AMI, 1 Giga PC y 58 Mb MAC.

Otros programas realizados :

- * UnixGuide : un conversor de ficheros AmigaGuide->HTML
AMINET:UTIL/CONV/
- * AMIGHP : un compilador RPL->ASM para HP48G
AMINET:MISC/EMU/

1.20 Historia

- Abril 98 : Versión 1.45 en Aminet
- Marzo 98 : Versión 1.43 en Aminet
- Febrero 98 : Versión 1.31 en Aminet
- Diciembre 97 : Versión 1.30 en Aminet.
- Marzo 97 : Versión 1.24 en Internet.

1.21 Novedades

1.45

- Corregidos algunos errores con la gestión de memoria.

1.43

- Nuevo modo de generación de imagen denominado 'compacto'.
 - Reserva de memoria dinámica.
 - Carga más rápida.
 - Presionar 'ESC' detiene
-

el proceso de generación
de la imagen de síntesis 3D.
- Suprimidos algunos errores.

1.40

- Una nueva función de síntesis que consume más memoria.
- Algunos cambios en los menús.
- El formato PDB (sin cabecera) ahora es soportado.

1.31

- Corregidos algunos errores en el soporte local.
Traducción completa al español:

¡gracias

Dámaso D. Estévez

! :-)

1.3

- Creación de esta versión (1.29 -> 1.3), debido a la gran
cantidad de cambios realizados desde la versión 1.24
(y además 1.3 es la denominación más lógica
para una segunda distribución en Internet).
Por si eso no fuese suficiente, los ejecutables distribuidos
en el paquete están optimizados (para una vez que funciona...).

1.29

- Importante optimización en el módulo de generación de imagen 3D:
la zona a generar es automáticamente detectada.
- Error corregido en la elección de colores (Cloro).

1.28

- Soporte de la promoción de modos de pantalla
- Añadidos tipos de herramienta.

1.27

- Reescritura completa de las rutinas gráficas (166 líneas).
- Reescritura completa de la rutina de rotación.

1.26

- Aparición del módulo de síntesis de la imagen 3D.
- La biblioteca matemática antes FFP, ahora es IEEE:
la velocidad se multiplica por diez con
el coprocesador matemático 68882
("Bueno, Scotty, ¿cómo responden los reactores?").

1.25

- Pequeños errores corregidos.
- El desplazamiento de la molécula se efectúa
a partir de ahora en el sentido de las flechas.

1.24

- Carga transparente del formato (PC) Alchemy.
- Soporte local.
- Ejecutable compilado con cadenas en inglés.

Consulte la sección

Historia

para más información.

1.22 Sobre este documento...

Traducción al español 1.5 (14.4.98)

Este documento es de copiado y distribución gratuita no pudiendo ser modificado\$^1\$, salvo directamente por el autor de PetitChemiste o por el traductor original (o sea, yo :D). Su utilización es siempre bajo la responsabilidad del propio usuario asumiendo éste todos los riesgos: de hecho ni siquiera me hago responsable de la corrección de esta traducción, así que por favor, consulte la documentación original.

Dámaso D. Estévez - Email: amidde@arrakis.es - Fidonet: 2:348/613.44
Traducciones y noticias en español - <http://www.arrakis.es/~amidde/>

\$^1\$ Esto incluye su forma de distribución.
