

DIPLOMARBEIT

UNIVERSITÄTSZENTRUM INFORMATIK

Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

**Zur Molekülmodellierung von PDB-Beispielen auf der Basis
von OpenGL**

Cornelia Odin

(2005)

Allgemeine Angaben

Die Diplomarbeit wurde in der Arbeitsgruppe "Allgemeine Informatik, Computergraphik" von Doz. Dr. Peter Schenzel, Institut für Informatik, Fachbereich Mathematik und Informatik der Martin-Luther-Universität angefertigt.

Zur Kontaktaufnahme benutzen Sie bitte die Email-Adresse direktor@uzi.uni-halle.de.

Zusammenfassung

Die Anzahl strukturell aufgeklärter Moleküle, die in der RCBS Protein Datenbank (PDB) [1] veröffentlicht sind, wächst immer schneller. Deshalb ist interaktive Molekülvisualisierung in letzter Zeit immer wichtiger geworden. Pharmazeuten, Mediziner und Biologen nutzen die in der PDB abgelegten Strukturinformationen, um das therapeutische Potential der Moleküle abzuschätzen und um die biochemischen Abläufe natürlicher Prozesse zu entschlüsseln.

Die dreidimensionale Visualisierung von Molekülen hat in zahlreichen Anwendungsgebieten große Bedeutung, da das Verständnis der Struktur dieser Moleküle ein wichtiger Schritt ist, um ihre Funktion zu verstehen. Daher werden neben den eigentlichen Strukturdaten auch Programme zur Visualisierung benötigt. Pymol, Rasmol und Chimera sind nur einige der bekannteren Anwendungen zu dieser Thematik.

Im Rahmen dieser Diplomarbeit [2] wurde untersucht, ob die am Institut für Informatik der Martin-Luther-Universität eingesetzte Graphikbibliothek OpenGL [3] zur Entwicklung eines Programms zur Visualisierung von Strukturdaten genutzt werden kann. Grundlage bildete ein Programm der California State University [4]. Als Ausgangsdaten dienten Makromoleküle aus der PDB.

Um die zum Verständnis des Moleküls wichtigsten Informationen, die in einer PDB-Datei enthalten sind, visualisieren zu können, wurde das Programm "MoleculeViewer" entwickelt. Die Forderung nach einer benutzerfreundlichen Oberfläche in Verbindung mit OpenGL führte zur Verwendung der beiden C++-Bibliotheken GLUT [5] und FLTK [6]. Aus diesem Grund standen am Ende der Entwicklung zwei Implemen-

tierungen des MoleculeViewers. Dem Nutzer stehen somit zwei verschiedene Versionen zur Visualisierung zur Verfügung.

Auszug aus dem Funktionsumfang des MoleculeViewer

- Drehen und Verschieben des Moleküls
- Darstellung der Atomgröße proportional zum Kovalenzradius des Atoms
- Farbdarstellung der Atome analog zum Kalottenmodell
- Festlegung eines Farbcodes für die Aminosäuren und Nukleotide
- Legende mit Hinweisen auf die Farbkodierung der Atome, Aminosäuren und Nukleotide
- Darstellung der Heteroatome isoliert oder im Verbund mit dem Molekül
- Darstellung der Aminosäurestruktur des Moleküls
- Darstellung der Nukleotidstruktur des Moleküls
- Generierung der Bindungen zwischen den Atomen aufgrund der Aminosäure- bzw. Nukleotidabfolge
- Darstellung der Sekundärstruktur des Moleküls isoliert oder als Einblendung über dem Molekül
- Möglichkeit zur Variation der Transparenz ausgewählter Atomgruppen, um verdeckte Atome sichtbar zu machen, ohne den Blickwinkel zu ändern
- Möglichkeit zur Variation der Größenverhältnisse im Molekül (z. B. Größe aller Sauerstoffatome ändern)
- Einblendung des Molekülnamens in der Titelleiste des Fensters
- Einführung eines Bezugssystems, das die Orientierung im Molekül bei Drehungen erleichtert
- Speicherung der Anzeige als Bitmap
- Kurzeinführung zur Benutzung des Programms

Systemanforderungen

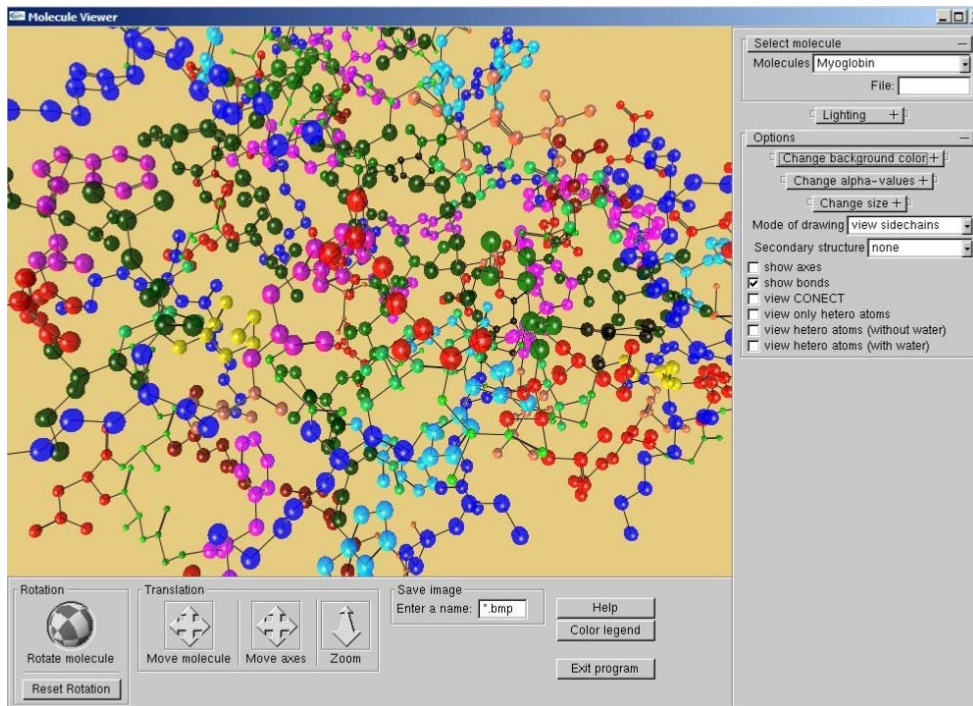
Microsoft Windows XP - Minimum 256 MB RAM, OpenGL-fähige Graphikkarte

Das Programm MoleculeViewer muss nicht installiert werden. Geöffnet wird es durch einen Doppelklick auf die Datei MoleculeViewer.exe. Das Programm kann sowohl

von CD als auch von der Festplatte aus gestartet werden, allerdings ist die Performance von der Festplatte aus deutlich besser.

Anwendungsbeispiel

Die Abbildung zeigt als Beispiel die GLUI-Oberfläche des MoleculeViewers. Zu sehen ist ein Ausschnitt aus der Aminosäuredarstellung des Makromoleküls Myoglobin.



Jede Kugel symbolisiert ein Atom. Innerhalb einer Aminosäure tragen alle Atome dieselbe Farbe. Für Aminosäuren mit ähnlichen chemischen Eigenschaften wurden Farben eines Farbtones verwendet. Aminosäuren können nach ihrer Größe eingeteilt werden. Entsprechend wurden die Radien für die Kugeln gewählt. Außerdem werden die vom MoleculeViewer errechneten Bindungen zwischen den Atomen als Linien dargestellt.

Ausblick

In der aktuellen Version des MoleculeViewers werden die wichtigsten Informationen einer PDB-Datei verarbeitet. Das Ergebnis der Diplomarbeit zeigt, dass OpenGL ein geeignetes Werkzeug zur dreidimensionalen Visualisierung von Makromolekülen ist. Die verwendete Programmstruktur erlaubt eine Weiterentwicklung des MoleculeView-

wers, um momentan ungenutzte Informationen aus den Strukturdaten verarbeiten zu können.

Literatur

- [1] RCBS Protein Data Bank. <http://www.rcsb.org/pdb/>
- [2] Cornelia Odin: Zur Molekülmodellierung von PDB-Beispielen auf der Basis von OpenGL, Diplomarbeit Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 2005
- [3] OpenGI Architecture Review Board: OpenGL-Programming Guide: The Official Guide to Learning OpenGL, Version 1.2, 3. Auflage, 1999, Verlag Addison-Wesley
- [4] Computer Graphics: Programming, Problem Solving, and Visual Communication. <http://www.cs.csustan.edu/~rsc/NSF/>
- [5] GLUT User Interface Library:
<http://www.cs.unc.edu/~rademach/glui/>
- [6] The Fast Light Toolkit Home Page. <http://www.fltk.org/>