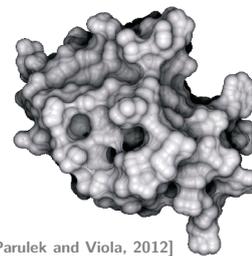


BSc-/MSc-Arbeit: Interaktive Visualisierung von Moleküloberflächen



[Parulek and Viola, 2012]

Hintergrund

Darstellungen von Moleküloberflächen sind ein wichtiges Werkzeug, um die Entstehung und Interaktion von Molekülen zu analysieren und zu verstehen. Zum Verständnis der diversen molekularen Wechselwirkungen muß die räumliche Gestalt beziehungsweise die Hülle des Moleküls betrachtet werden. Für solche molekularen Hüllen gibt es viele Definitionen. Man kann sie zum Beispiels als die Vereinigung der Sphären aller Molekülatome mit ihrem jeweiligen Van-der-Waals-Radius auffassen (siehe Abbildung 1a).

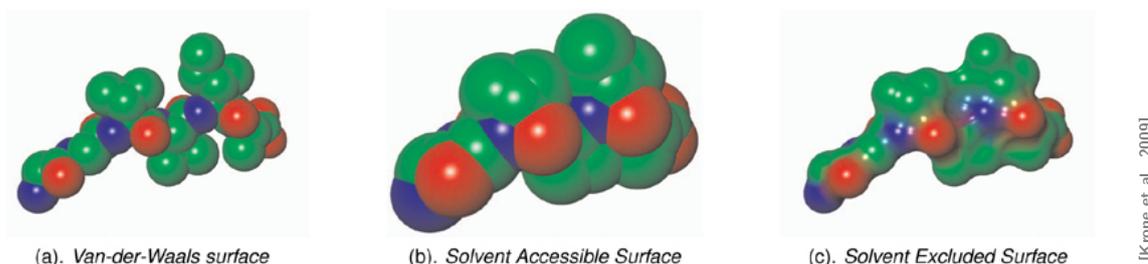


Abbildung 1: Verschiedene Darstellungen von Moleküloberflächen

Fred Richards hat molekulare Oberflächen 1977 als wasserzugängliche Hüllen beschrieben. Anschaulich erhält man diese Hülle, indem man ein Wassermolekül oder ein Molekül eines anderen Lösungsmittels (Englisch: *solvent*), approximiert als Probenkugel, über die Van-der-Waals-Oberflächen der Molekülatome abrollt (vergleiche Abbildung 2, blaue Oberfläche). Das Zentrum der Probe definiert die Lee-Richards-Oberfläche (LRS) oder auch *Solvent-Accessible Surface (SAS)*, abgebildet in Abbildung 1b. Es ist zugleich die Grenzfläche der um den Probenradius vergrößerten Van-der-Waals-Sphären.

Eine der interessantesten und meist verwendeten Darstellungen ist die Conolly-Oberfläche oder auch *Solvent Excluded Surface (SES)*, zu sehen in Abbildung 1c. Mit ihr kann man sehr gut untersuchen, welche Teile der Moleküloberfläche von zum Beispiel Enzymen für andere Biomoleküle, den Liganden, erreicht werden können, wo diese anbinden können und wie diese Bindungsstellen sich über die Zeit verändern können. Die SES erhält man wie die SAS durch Abrollen eines Probenmoleküls über die Van-der-Waals-Oberfläche. Sie wird allerdings nicht durch das Probenzentrum beschrieben, sondern durch die Punkte der Probenoberfläche, die jeweils zum Molekül gewandt sind (vergleiche Abbildung 2, rote Oberfläche).

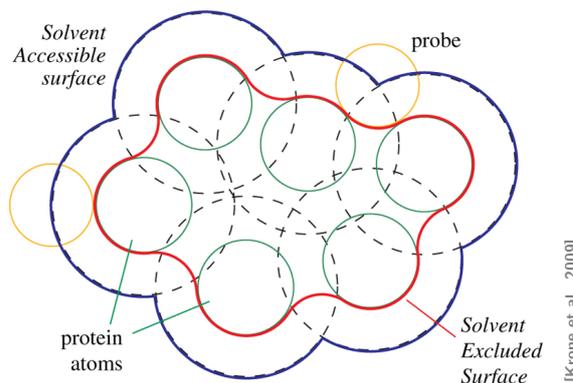


Abbildung 2: Erzeugung der SAS- und SES-Oberflächen durch eine rollende Kugel

Man kann sich leicht vorstellen, daß die Berechnung der SES etwas aufwendiger ist; allein schon, weil die resultierende Oberfläche aus zwei verschiedenen Oberflächenarten zusammengesetzt ist. Sie besteht zum einen aus dem Teil der Van-der-Waals-Oberfläche, die direkt das Lösungsmittel berührt, und zum anderen aus Abschnitten der Probensphäre, der beim Übergang zwischen den beteiligten Molekülatomen jeweils anliegt; dieser Teil wird auch *Hinterschneidungsoberfläche* (Englisch: *reentrant surface*) genannt.

Unmittelbares Rendering anhand impliziter Darstellungen

Ein großes Problem beim Einsatz der SES ist somit, daß die geometrische SES-Darstellung substantielle Vorberechnungen bedingt. Dieser Aufwand erschwert den interaktiven Einsatz bei der visuellen Erforschung von Molekülen. Wann immer die Auswahl der darzustellenden Atome eingeschränkt oder auch nur der Probenradius verändert wird, muß die Geometrie neuerstellt werden. Bei der visuellen Exploration von zeitlich variierenden Proteinsimulationen verhindert die Vorberechnung jegliche Interaktion.

Neuere Ansätze versuchen nun die Oberfläche nicht explizit geometrisch darzustellen, sondern durch implizite Flächen anhand von Distanzfeldern zu beschreiben. Mit diesem Ansatz kann die SES-Oberfläche ohne Vorberechnung unter Verwendung aktueller GPU-Techniken dargestellt werden. Die Oberflächengeometrie wird dazu als implizite Oberfläche beschrieben, die mit Ray-Casting-Methoden direkt visualisiert wird. Parulek and Viola [2012] stellen genau diesen Ansatz vor. Mit der beschriebenen Implementierung werden unmittelbare Darstellung auch komplexer Moleküle mit tausenden Atomen bei zeitlicher Veränderung möglich. Die Darstellungsqualität wird dabei sukzessive erhöht. Es werden auch ohne Geometrie Vorberechnungen ein bis zweistellige Bildwiederholraten bei Proteinen mit 2.720 bis 14.744 Atomen erreicht:

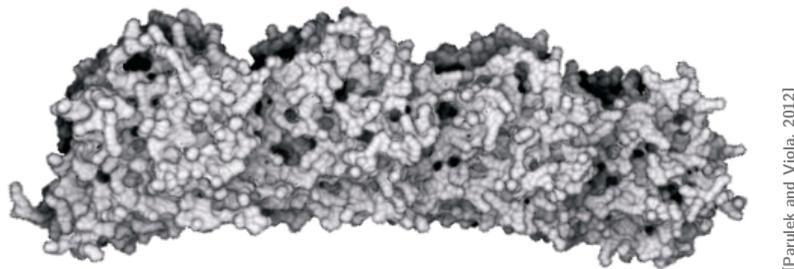


Abbildung 3: Unmittelbare Darstellung eines Proteins mit 14.744 Atomen

Konkrete Aufgabenstellung

Im Rahmen dieser Arbeit soll dieses in [Parulek and Viola, 2012] beschriebene Verfahren implementiert werden. Die Moleküloberflächen werden anhand von Distanzfunktionen als implizite Oberflächen beschrieben. Natürlich sind auch hier die Übergangsbereiche zwischen benachbarten Atomen etwas aufwendiger; in Abbildung 4 sind die Übergänge zwischen zwei beziehungsweise drei Atomen skizziert. Die Distanzfunktionen sollen mit aktuellen GPU- und GPGPU-Methoden per Ray-Casting ausgewertet und mit Ambient-Occlusion interaktiv dargestellt werden. Entsprechend sollten Sie mit diesen Techniken und den dafür notwendigen Hintergründen (GLSL, CUDA etc.) bereits umfangreich vertraut sein.

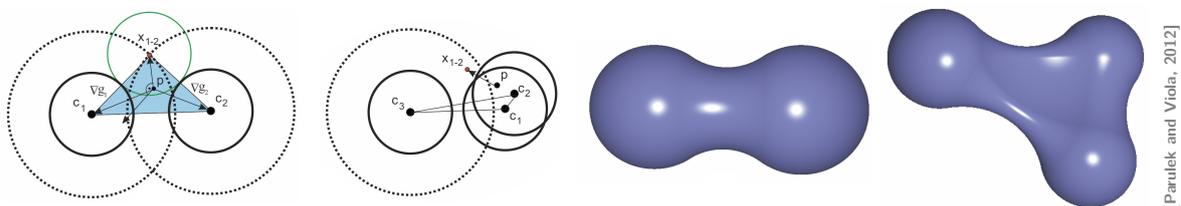


Abbildung 4: Verbindungsflächen zwischen zwei beziehungsweise drei Atomen

Quellen

M. Krone, K. Bidmon, and T. Ertl. Interactive visualization of molecular surface dynamics. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 15(6):1391–1398, 2009.

Frank Oellien. *Algorithmen und Applikationen zur interaktiven Visualisierung und Analyse chemiespezifischer Datensätze*. Friedrich-Alexander-Univ. Erlangen-Nürnberg., 2002. Abschnitt 3.1.3 Molekulare Oberflächen.

Julius Parulek and Ivan Viola. Implicit representation of molecular surfaces. In *Proceedings of the IEEE Pacific Visualization Symposium (PacificVis 2012)*, pages 217–224, March 2012.