

Computergrafik lässt virtuelle Moleküle Schatten werfen

von Rochus Rademacher, 02. März 2009. Mit der frei verfügbaren Software Ballview der Bioinformatiker aus Saarbrücken und Tübingen lassen sich am Bildschirm Moleküle betrachten und bearbeiten. Durch das Computergrafik-Know-how von Professor Philipp Slusallek werden damit komplexe Moleküle sogar mit Licht, Schatten und Spiegelungen interaktive Weise dargestellt.

Auf der CeBIT (3. bis 8. März) in Hannover können Messebesucher am Forschungsstand des Saarlandes (Halle 9, Stand B 43) an einer 3-D-Leinwand in die Welt der Wirkstoffmoleküle, DNA und Viren eintauchen. Die hochrealistischen 3-D-Bilder werden mit dem aus der Computergrafik bekannten Ray-Tracing-Verfahren erzeugt – ausgewiesene Spezialität von Slusallek, der neben dem Lehrstuhl für Computergraphik an der Universität des Saarlandes neuerdings auch die Forschungsgruppe Agenten und simulierte Realität am Deutschen Forschungszentrum für künstliche Intelligenz (DFKI) leitet.

Mit der Software Ballview können komplizierte Moleküle und deren physikalische Eigenschaften, aber auch umfangreiche biologische Systeme wie etwa Viren berechnet und visualisiert werden. Dies spielt unter anderem dann eine Rolle, wenn Medikamente zu verbessern sind: Das Medikament muss wie ein Schlüssel – sowohl geometrisch als auch chemisch – in das Schloss, also die Bindetasche des biologischen Systems passen. Die Herausforderung ist, auf einem zweidimensionalen Bildschirm oder einer Projektionsleinwand eine anschauliche räumliche Darstellung zu erzeugen.



Forschungsprojekt macht Aspirin verstehbar: Mit der Opensource-Software Ballview werden komplexe Moleküle wie die Acetylsalicylsäure jetzt auch mit Licht, Schatten und Spiegelungen interaktive visualisiert. Foto: Bellhäuser/das bilderwerk/Uni des Saarlandes

In einem Forschungsprojekt mit dem Computergraphik-Team von Slusallek haben die Saarbrücker Bioinformatiker um Andreas Hildebrandt jetzt die neue Visualisierungsbibliothek RTfact mit Ballview kombiniert. Damit werden die räumlichen Strukturen der Moleküle in 3-D in sehr realistischen Darstellungen mit Beleuchtung, Schattenbrechungen und Spiegelungen interaktiv dargestellt. „Durch besondere grafische Effekte wie der Umgebungsverdeckung, der Lichtdämpfung und der reflektierenden Oberflächen entsteht ein starker 3-D-Tiefeneindruck“, so Slusallek. „Dadurch können die räumlichen Moleküle schnell und intuitiv erfasst werden.“

Dabei helfen dann moderne 3-D-Eingabegeräte wie die 3-D-Spacemouse, mit der Benutzer in virtuellen Umgebungen Objekte bewegen, oder das Headtracking, das die Kopfbewegungen des Anwenders über Infrarotsensoren erfasst. Damit können die Forscher die Proteine, DNA-Moleküle und Viren nicht nur virtuell auf dem Bildschirm interaktiv von allen Seiten betrachten: Sie können auch in einzelne Bereiche hineinzoomen und auf diese Weise neue Aspekte erforschen.

Ballview ist im Rahmen eines Forschungsprojektes am Max-Planck-Institut für Informatik in Saarbrücken entwickelt worden. Heute wird das Opensource-Programm von drei Forscherteams an den Zentren für Bioinformatik in Saarbrücken und Tübingen weiter entwickelt. Beteiligt sind unter anderem Hildebrandt, Nachwuchsgruppenleiter im Zentrum für Bioinformatik der Universität des Saarlandes, Professor Hans-Peter Lenhof und Anna Dehof von der Universität des Saarlandes sowie Professor Oliver Kohlbacher von der Uni Tübingen. Die Raytracing-Bibliothek RTfact wird am Lehrstuhl von Slusallek entwickelt – beteiligt sind neben Slusallek auch Iliyan Georgiev und Lukas Marsalek von der Universität des Saarlandes.

Quelle: www.computerzeitung.de