

EPMV – Embedded Python Molecular Viewer

Mit ePMV ist es möglich, professionelle 3D-Hosts wie z.B. Blender oder Cinema4D mit einer Modellierungssoftware für Moleküle zu erweitern. Durch die einfache Bedienung ist es so auch für “Nicht-Biologen” möglich, schnell, exakte Darstellungen von Molekülen zu produzieren. Der Vorteil von ePMV liegt darin, dass sich der Nutzer den Host aussuchen kann, mit dem er ePMV benutzt. Das bedeutet, wenn ein Nutzer bereits Erfahrungen mit einer 3D-Modellierungssoftware gemacht hat, muss er sich nicht in eine aufwendige Umgebung einarbeiten, sondern kann sich auf das Erlernen der zusätzlichen Funktionalitäten von ePMV beschränken. Dadurch kann er schneller, qualitativ hochwertige Ergebnisse erzielen, als wenn er sich zunächst in eine komplizierte Modellierungssoftware einarbeiten müsste.

Ein weiterer Vorteil liegt darin, dass die Funktionalitäten des Hosts auch ePMV zur Verfügung stehen. Ein Beispiel ist der im 3D-Host bereits integrierte Mehrwinkel-Viewport, durch welchen es einfacher ist, die Szene zu überblicken und auch aufwendige Szenen, bestehend aus mehreren Molekülen, zu erstellen. Außerdem können aufwendige Schatten- und Shadingsimulationen, die der Host bereitstellt, ebenfalls von ePMV genutzt werden. Diese können dazu genutzt werden, Details von Molekülen besser hervorzuheben.

Um sich mit ePMV vertraut zu machen, kann folgende Quelle verwendet werden:

<http://epmv.scripps.edu/documentation/tutorials>. Hier sind einige Workshops für Cinema4D+ePMV aufgelistet.

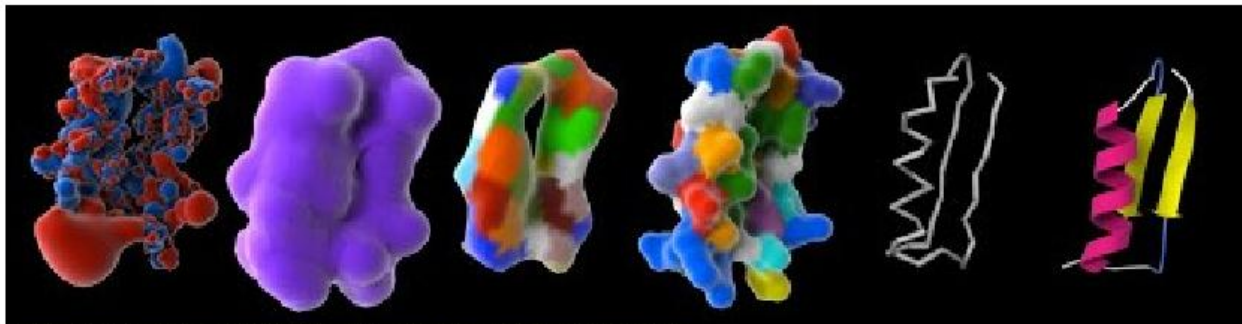
ePMV ist in der Lage, 3D-Modellierungsdaten in diversen Formaten zu importieren, darunter .pdb, .pdbqt, .cif, .mol, .dlg, .pqr. Die Daten können also direkt aus einem Proteinverzeichnis, z.B. Uniprot, heruntergeladen werden und von ePMV angezeigt werden.

Für die Darstellung des Moleküls stehen verschiedene Farb- und Strukturschemata zur Verfügung, mit denen u.a. Atome oder Aminosäuren spezifisch dargestellt werden können oder eine minimalistische Backbone-Ansicht, in der nur ein abstraktes Grundgerüst des Moleküls gezeichnet wird. In diese Ansicht können auch Helix- und Faltblatt-strukturen integriert werden.

Zum besseren Verständnis sind in Abb.1 noch einmal die wichtigsten Darstellungsformen verdeutlicht.

Attachment:

File comment: Darstellungsformen für Moleküle in ePMV



https://picasaweb.google.com/113555173765054343931/EPMVgallery?authkey=Gv1sRgCjVvuhO2_a67AE&gl=true&cl=195541363385653189218

anwendung2.png [112.56 KiB | Viewed 14 times]

ePMV kann in unterschiedlichsten Modellierungskontexten genutzt werden. Es ist z.B. möglich, zelluläre Abläufe mit Strukturen, die aus PDB-Dateien erstellt wurden, darzustellen. Solche Darstellungen können z.B. in wissenschaftlichen Publikationen oder in Schulbüchern verwendet werden.

Des Weiteren bietet ePMV eine Reihe von Manipulatoren, welche auf dem simulierten Modell angewendet werden können. Unter anderem kann eine physikalische Engine innerhalb der Visualisierung benutzt werden, wodurch z.B. Proteine in einer Zellmembran dargestellt werden können, zusammen mit einer Simulation ihrer Wechselwirkungen. Außerdem bieten die Manipulatoren dem Nutzer eine Möglichkeit direkt mit der Visualisierung zu interagieren, was insbesondere sehr gut in Kombination mit „Augmented reality“ Umgebungen genutzt werden kann,

also virtuellen Umgebungen die in die reale Welt eingebettet sind. Der Nutzer kann dann beispielsweise mit seinen Händen ein Substrat und Enzym zu einem Komplex zusammenfügen. Mit Hilfe des PyRosetta Plugins für ePMV ist es sogar möglich, Skripte zur Strukturvorhersage von Molekülen einzufügen und diese dann auf dem Modell ausführen zu lassen.

Ein weiterer Vorteil von ePMV liegt darin, dass die Visualisierung jederzeit geändert werden kann. Das ist insbesondere nützlich, wenn die Darstellungsform der Moleküle verändert werden soll, z.B. von einer Backbone-Ansicht eines Proteins in eine Ansicht, in der die Aminosäuren sichtbar sind. Dies lässt sich in ePMV mit einem Mausklick erledigen!

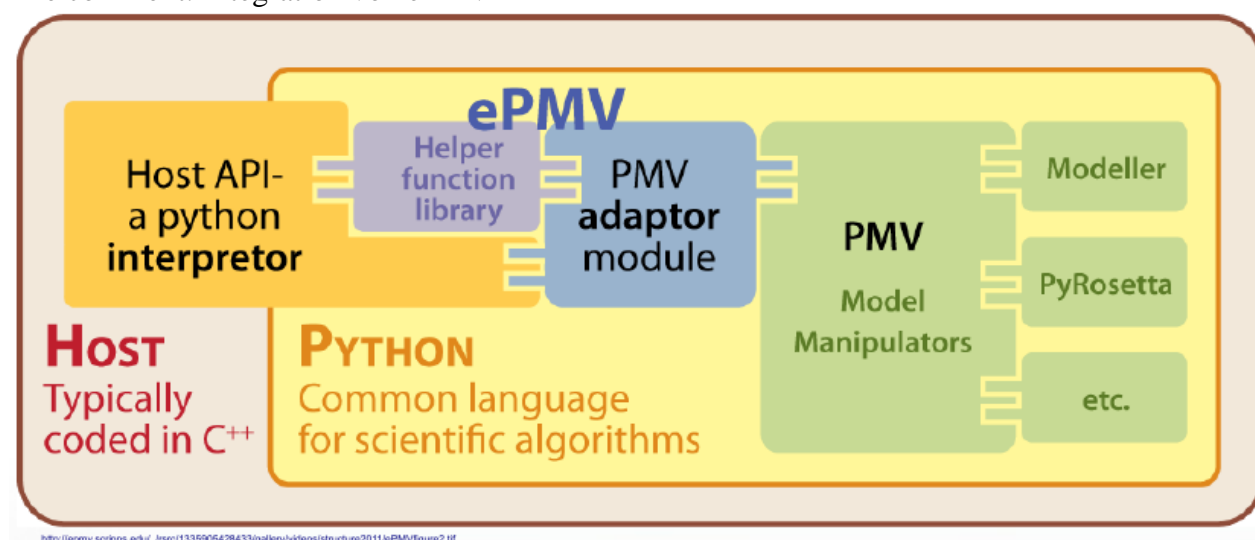
Neben ePMV gibt es noch andere Modellierungstools, wie zum Beispiel jMol/pyMol sowie BioBlender und PDB2Surface. Im Gegensatz zu jMol bietet ePMV aber eine deutlich plastischere Ansicht der dargestellten Moleküle, wohingegen jMol dafür eine interaktive Darstellung (auch im Browser) ermöglicht. Dadurch dass ePMV nur in einem 3D-Host verwendbar ist, steigen somit auch die Hardwareanforderungen für die Benutzung. Hier sind kleinere Softwarepakete wie jMol im Vorteil, falls schwächere Hardware genutzt wird.

Integration

Da alle modernen 3D-Hosts einen Python-Interpreter besitzen, ist es möglich, Zusatzfunktionalitäten zu programmieren, ohne in der low-level Sprache des Hosts zu programmieren. Aus diesem Grund wurde ePMV in Python entwickelt, um eine einfache Integration in den Host zu ermöglichen. Neben ePMV gibt es daher auch noch eine Reihe weiterer Plugins für Blender oder Cinema4D, die auch in Python entwickelt wurden. In Abb. 2 sind die Bestandteile dargestellt, die ePMV in einen Host eingliedern. Zu erkennen ist, dass es sich um ein flexibles Modulsystem handelt, in dem Komponenten je nach Umgebung und Einsatzgebiet austauschbar sind. Das PMV adaptor module dient als Schnittstelle zwischen der Syntax des Hosts und der Modellsyntax von ePMV. Hierbei ermöglicht die Helper function library, welche die spezifische Host Syntax beinhaltet, die einfache Implementierung von ePMV in verschiedene Hosts. Für alle gängigen Hosts liegen bereits Implementierungen dieser Bibliothek vor. Soll ePMV in einem neuen Host eingebunden werden, müssen lediglich die entsprechenden Methoden aus der Bibliothek eingebunden werden, sodass die Befehle von ePMV in die neue Hostsyntax übersetzt werden können.

Attachment:

File comment: Integration von ePMV



http://epmv.scripps.edu/_hsrc/1335905428433/gallery/videos/structure2011/ePMVfigure2.tif

anwendung1.png [50 KiB | Viewed 14 times]

Quellen

Anwendung2.png

https://picasaweb.google.com/113555173765054343931/EPMVgallery?authkey=Gv1sRgCJjVvuHO2_a67AE&fgl=true&pli=1#5541363385653189218

Anwendung1.png

http://epmv.scripps.edu/_/rsrc/1335905428433/gallery/videos/structure2011/ePMVfigure2.tif

Literatur & Weblinks

Johnson, G. T., L. Autin, D. S. Goodsell, M. F. Sanner, and A. J. Olson. "ePMV Embeds Molecular Modeling into Professional Animation Software Environments." *Structure* 19, no. 3 (2011): 293–303.

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC2828115/>

<http://epmv.scripps.edu/gallery/videos/structure2011>

[http://epmv.scripps.edu/documentation/t ... -tutorials](http://epmv.scripps.edu/documentation/t...-tutorials)