V"D" ChemVis

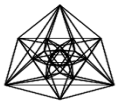
Chemische Visualisierung im Internet

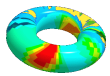
Wolf-Dietrich Ihlenfeldt
Frank Oellien
Computer-Chemie-Centrum
Institut für Organische Chemie

Thomas Ertl
Klaus Engel
Lehrstuhl für Graphische Datenverarbeitung
Institut für Mathematische Maschinen
und Datenverarbeitung (IMMD IX)

Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

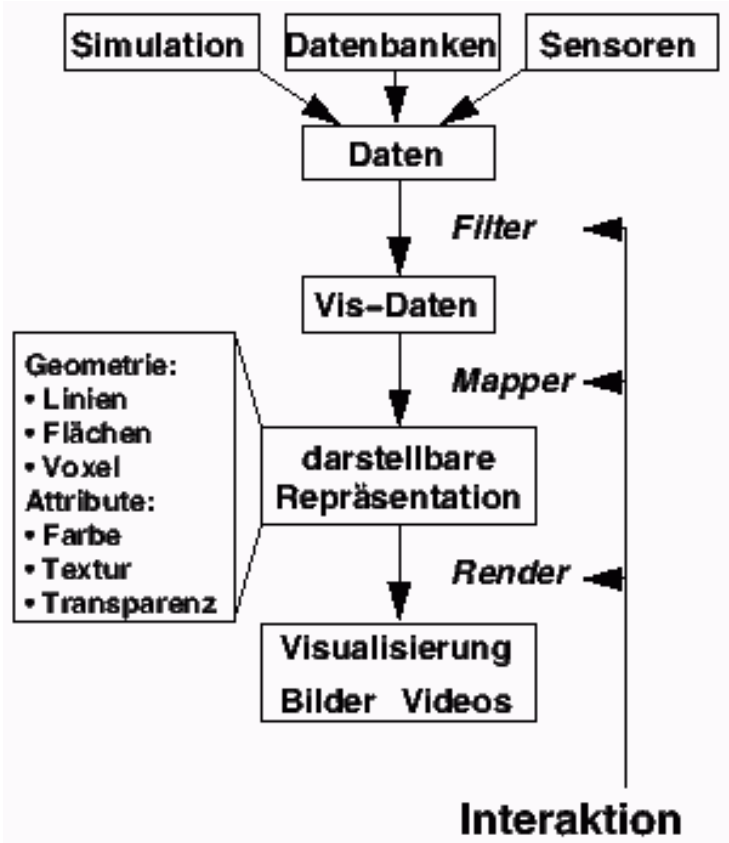
© Ihlenfeldt, Ertl, Oellien, Engel





Visualisierungspipeline

Visualisierungspipeline



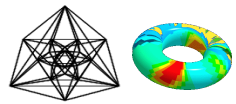
Mapping-Klassifikation

je nach Gittertypen → verschiedene Algorithmen

Skalarfelder
kartesisch
Medizinische Visualisierung

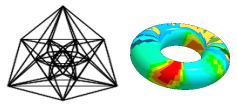
Vektorfelder
un/strukturiert
Strömungs-visualisierung

Bäume, Graphen
Tabellen
Informations-visualisierung



Forschungsziele im SPP V3D2

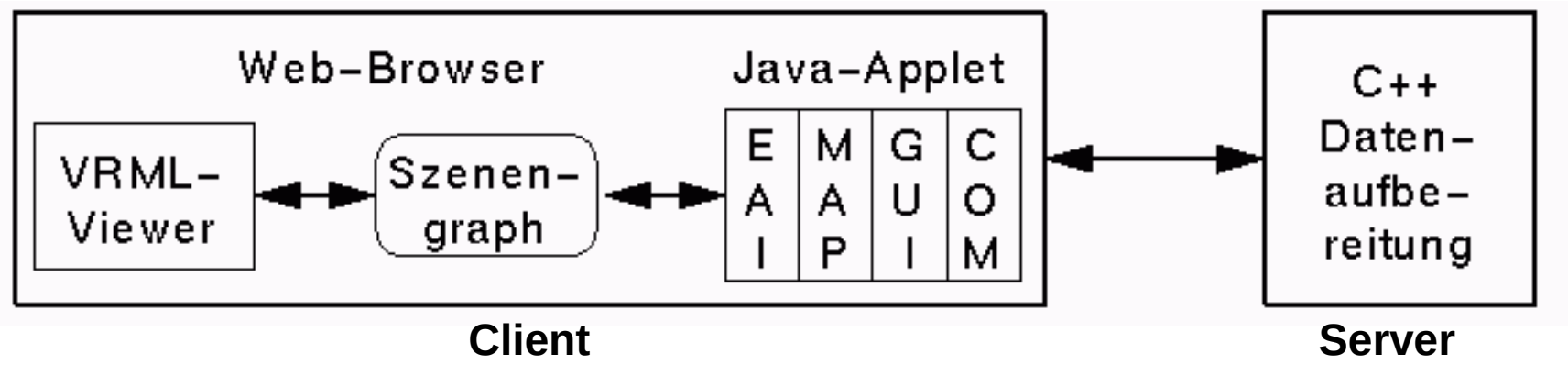
- Visualisierung im Internet
  - welche 3D Graphik APIs (VRML, Java3D, ...) ?
  - effiziente Nutzung lokaler Graphikhardware ?
  - 3D Interaktion, dynamische Szenen, Parameteränderung
  - Client/Server-Schnittstelle im Datanminimum der Vis.-Pipeline ?
  - verteilte und progressive Algorithmen
- Anwendung in der Chemie
  - Molekülstrukturen (→komplexe Geometrie + Attribute)
  - 3D Skalarfelder (→VolVis)
    Isoflächen und direktes Volume Rendering (semitransparent)
  - Reaktions-/Struktur-Datenbanken (→InfoVis)
- Digital Libraries
  - Aufbau von zentralen Visualisierungsdiensten
  - interaktive Publikationen
  - Aus- und Weiterbildung



Ergebnisse

Realzeit-Interaktion erfordert lokale Verarbeitung
→ verlagere möglichst viel Funktionalität in den Client

- Typische Architektur



ermöglicht High-End-Anwendungen am PC bei mittlerer Datengröße

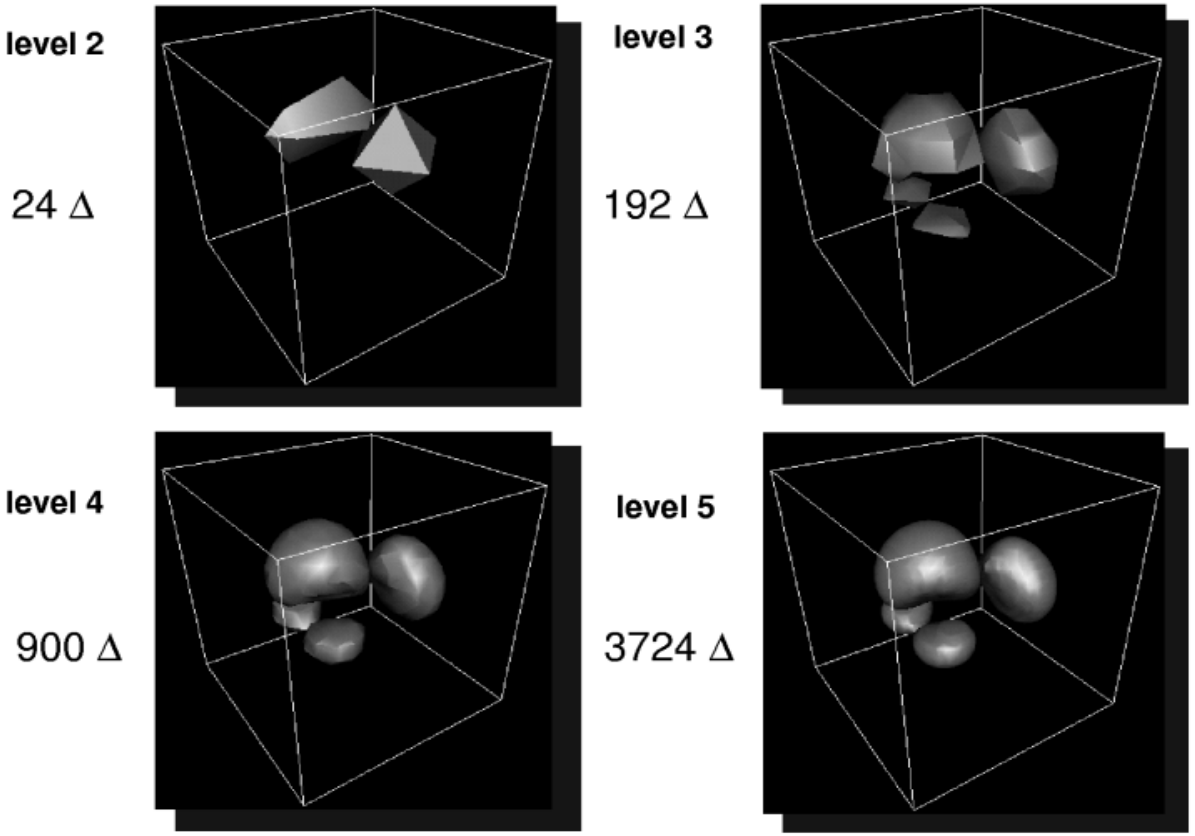
- 3D APIs:

VRML 97/EAI
– heterogen verfügbar
– teilweise unstabil und langsam
– wenig Rendering-Kontrolle

Java3D
– wenig Plattformen
– noch Performanz-Probleme
– viele Graphikoptionen

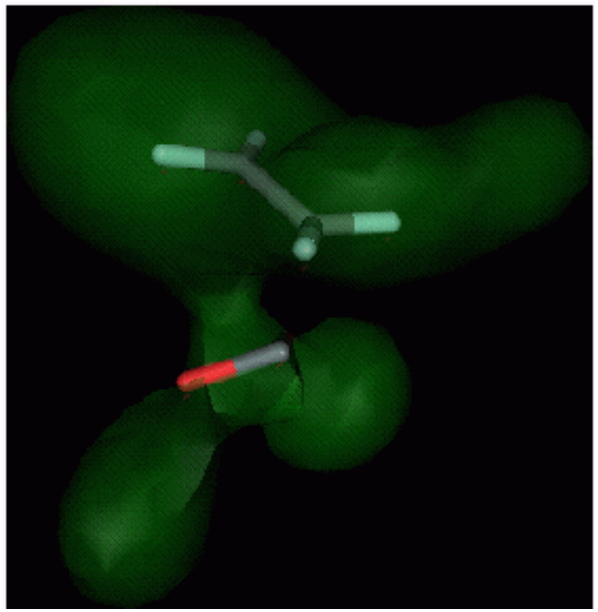
PROLET (PROgressive isosurface appLET)

- Isoflächenextraktion aus extrem großen 3D Skalardatensätzen
- Kompression und hierachische Repräsentation am Server
- Progressive Generierung und Übertragung der Flächengeometrie

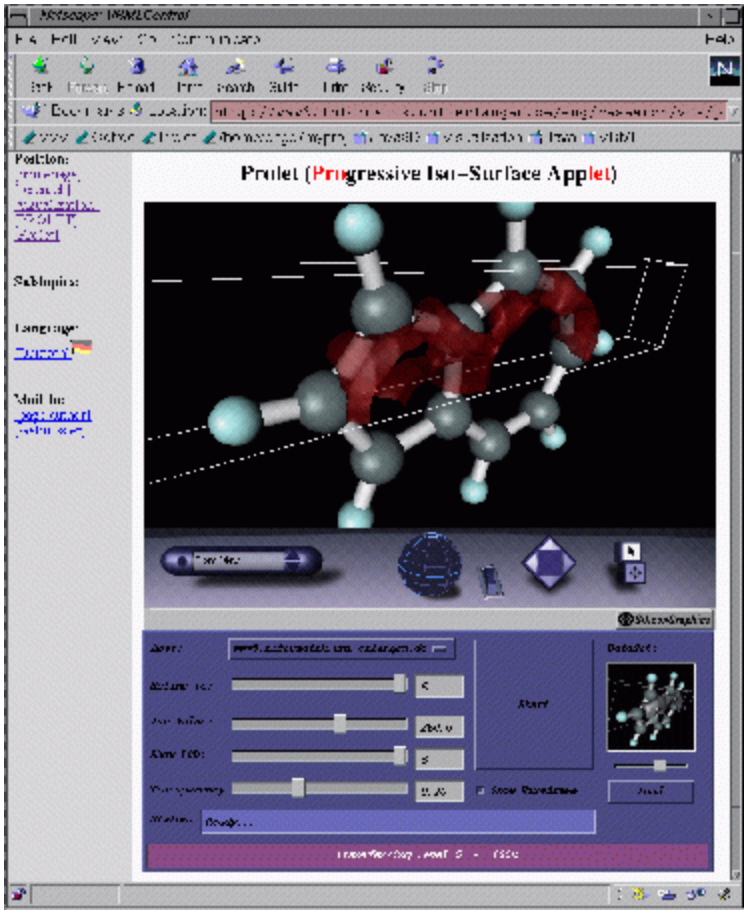


PROLET (cont.)

- Integration mit Molekülgeometrie
- Semitransparente Flächen
- Focus-gesteuerte Verfeinerung
- Geometriekompression



HOMO-Orbital 1.1-Difluorpropen-2



Isotroper Anteil des NMR Abschirmungs-Tensors

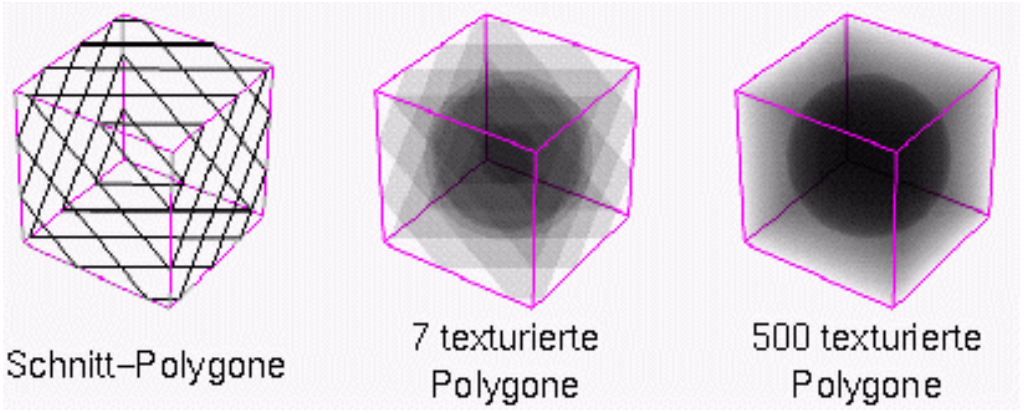
VVV (VRML Volume Viewer)

Volume Rendering:

– semitransparente Darstellung des Volumens
– Merkmale mit Farbe und Transparenz

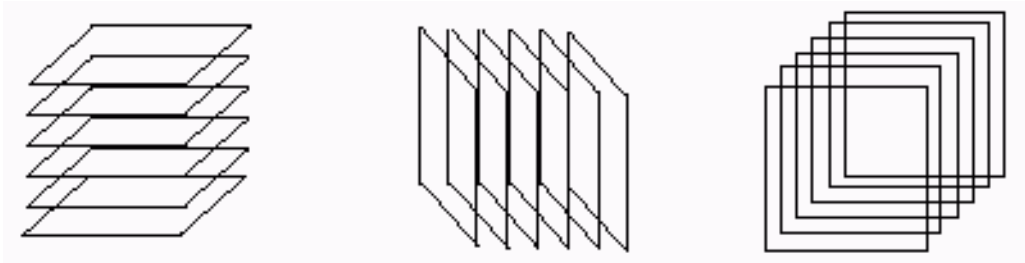
Verfahren:

– Software-Raycasting
– Spezialhardware
– Textur-basiert

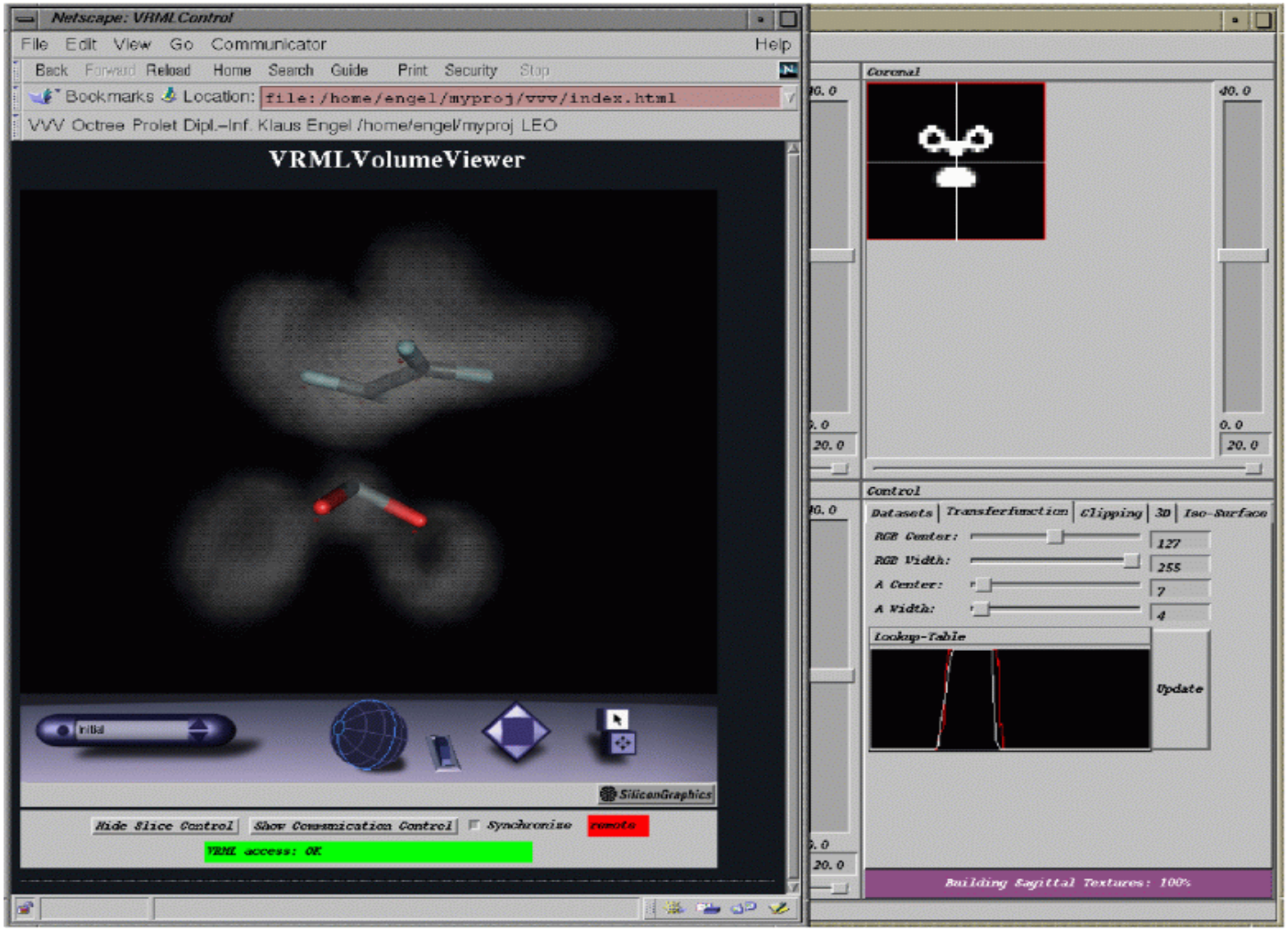


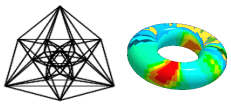
VRML:

– nur 2D-Texturen
– Stapel orthogonaler Schichten
– neue Transferfunktionen erfordern neue Textur-Stapel
– zusätzliche Schichtdarstellung

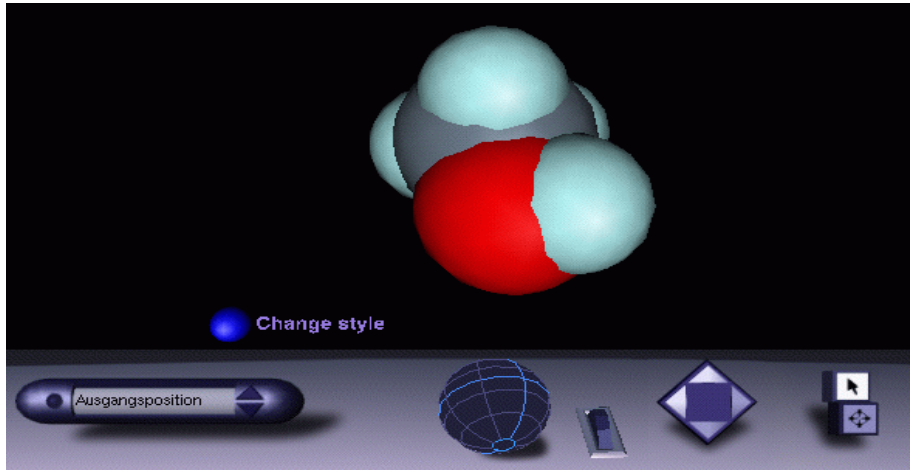


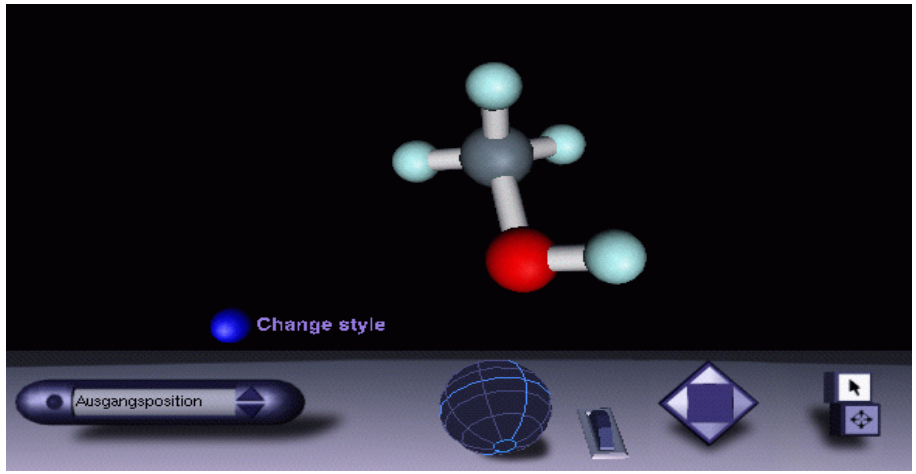
VVV (cont.)

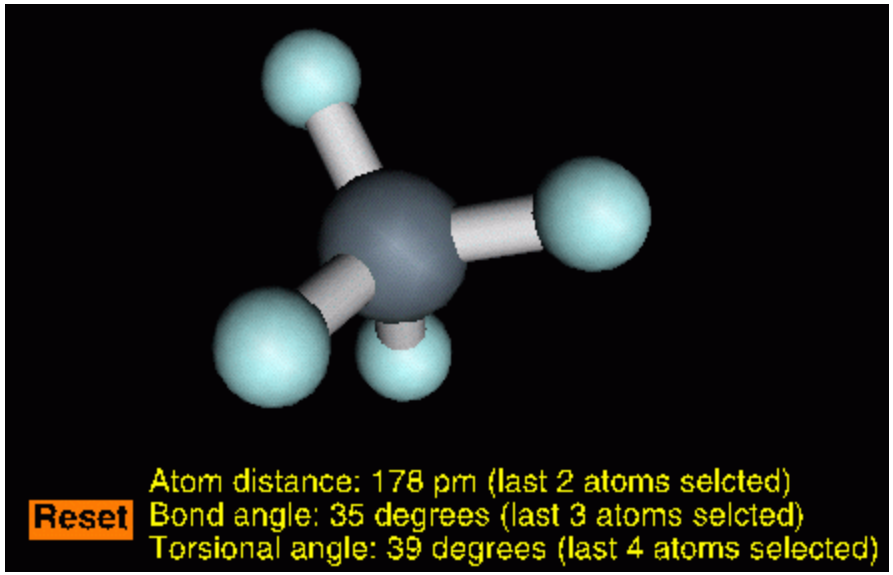

Netscape: VRML Control
File Edit View Go Communicator Help
Back Forward Reload Home Search Guide Print Security Stop
Bookmarks Location: file:/home/engel/myproj/vvv/index.html
VVV Octree Prolet Dipl.-Inf. Klaus Engel /home/engel/myproj LEO
VRMLVolumeViewer
Initial
SiliconGraphics
Hide Slice Control
Show Communication Control
Synchronize
remote
VRML access: OK
Coronal
Control
Datasets
Transferfunction
Clipping
3D
Iso-Surface
RGB Center:
RGB Width:
A Center:
A Width:
127
255
7
4
Lookup-Table
Update
Building Sagittal Textures: 100%

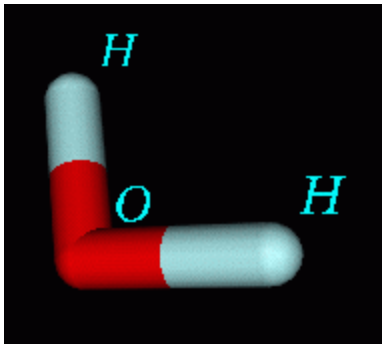


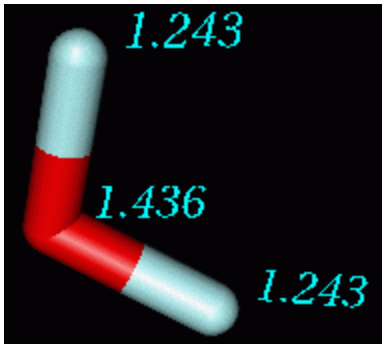
VRML Creator für Chemische Strukturen





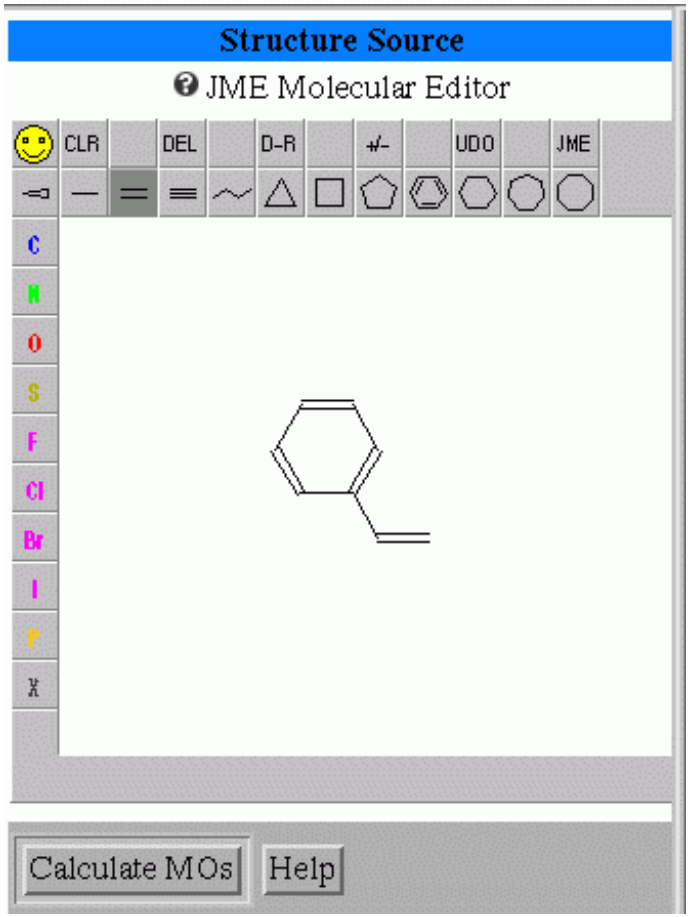




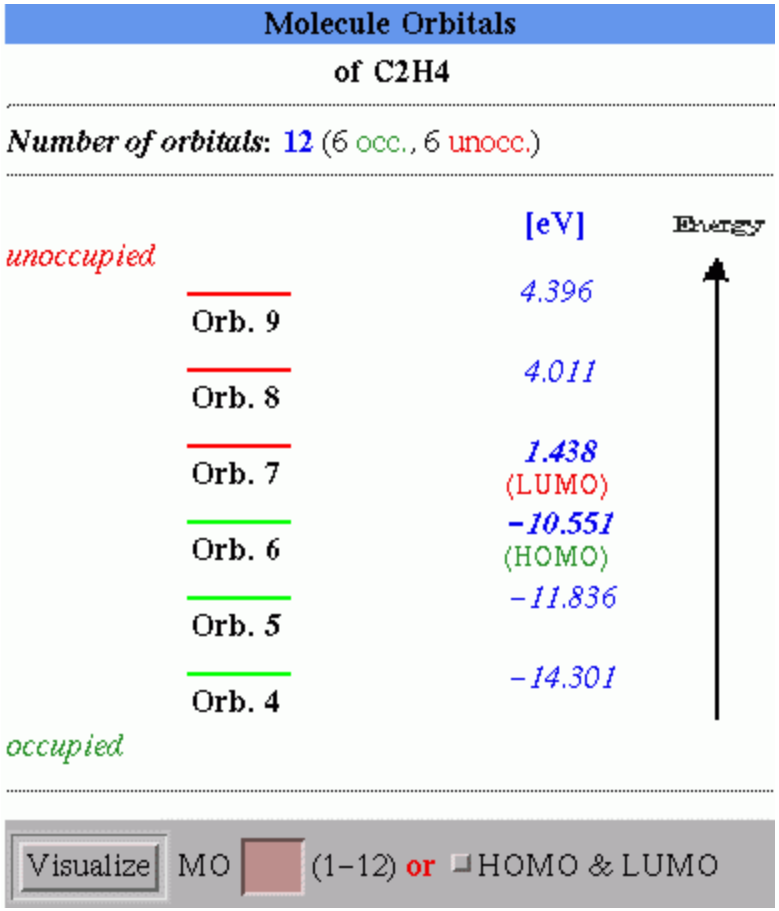


Darstellungsvarianten

ORBVIS (ORBital VISualisierung)



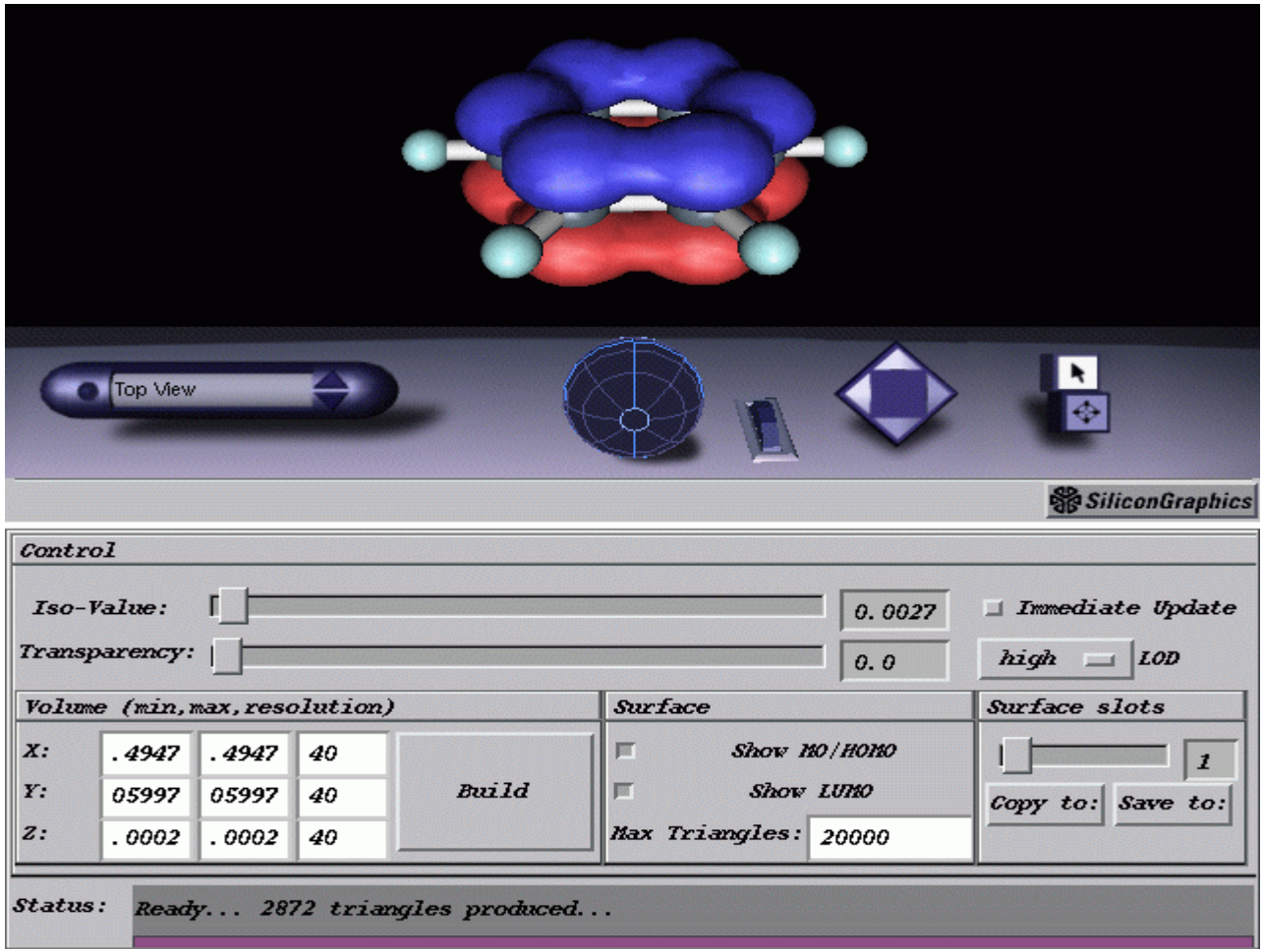
Editor



Orbital-Auswahl

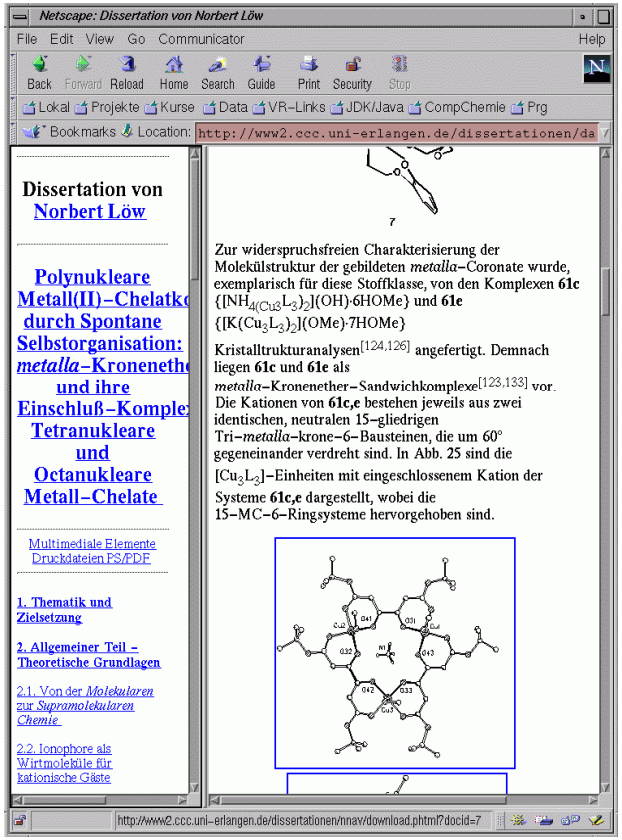
© Ihlenfeldt, Ertl, Oellien, Engel

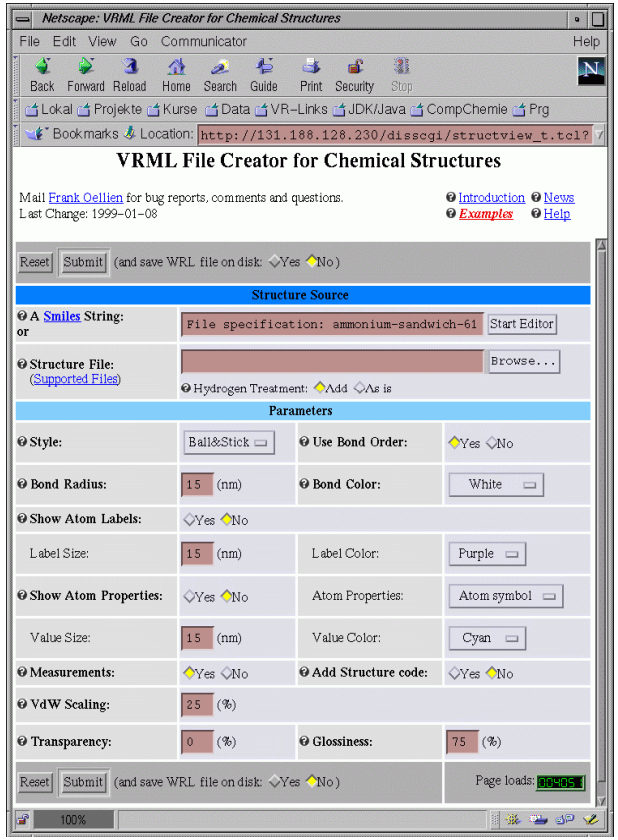
ORBVIS (cont.)

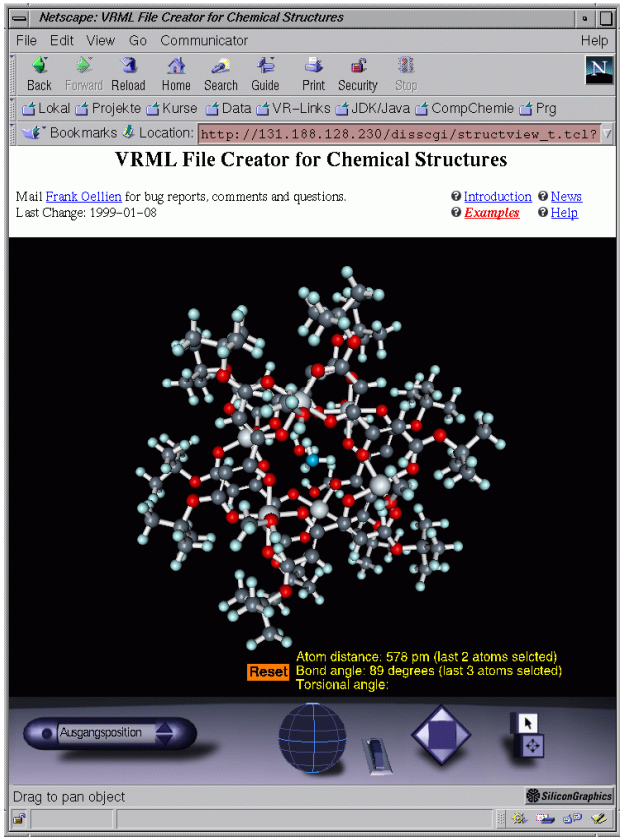


Molekülorbital von Benzol

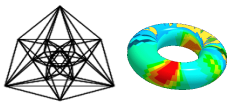
Anwendung in digitalen Dokumenten





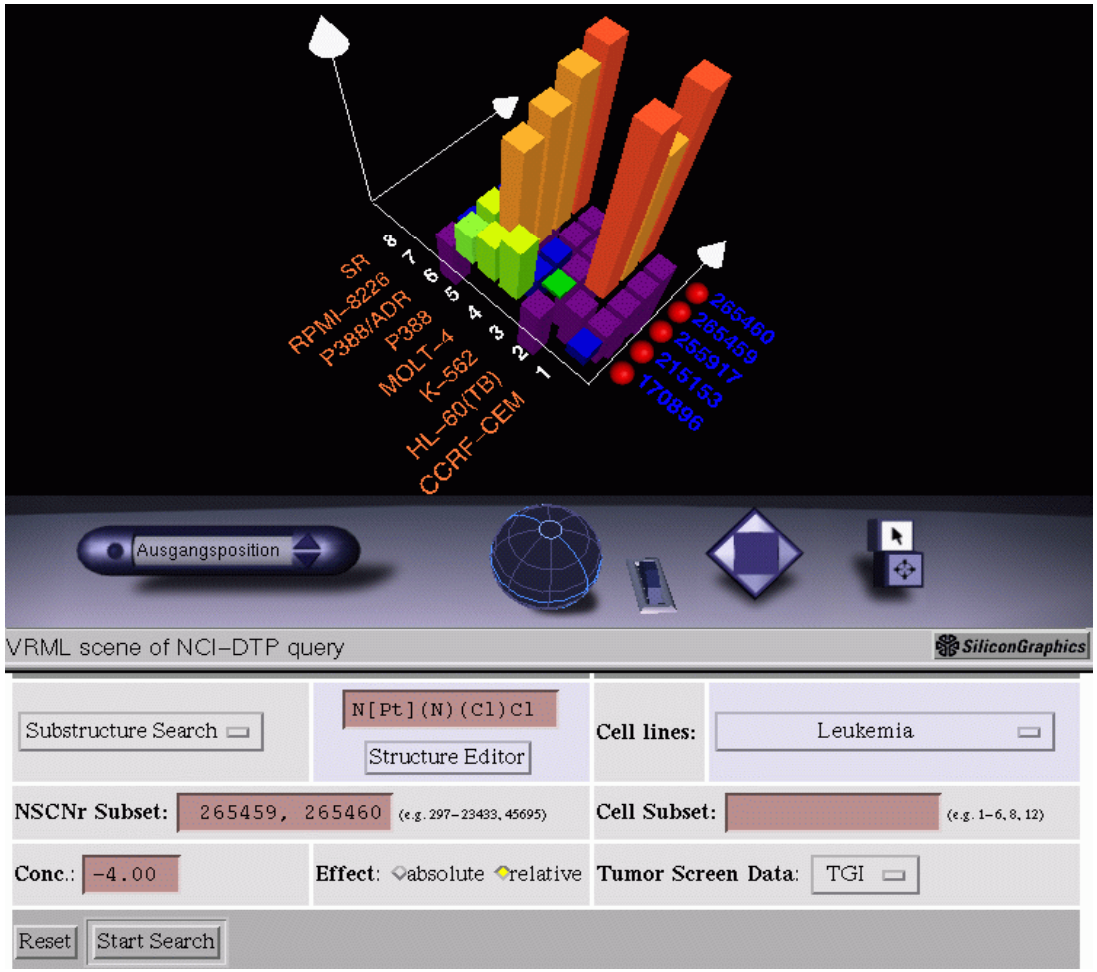


Dissertation Online → HTML-Formular → VRML-Szene



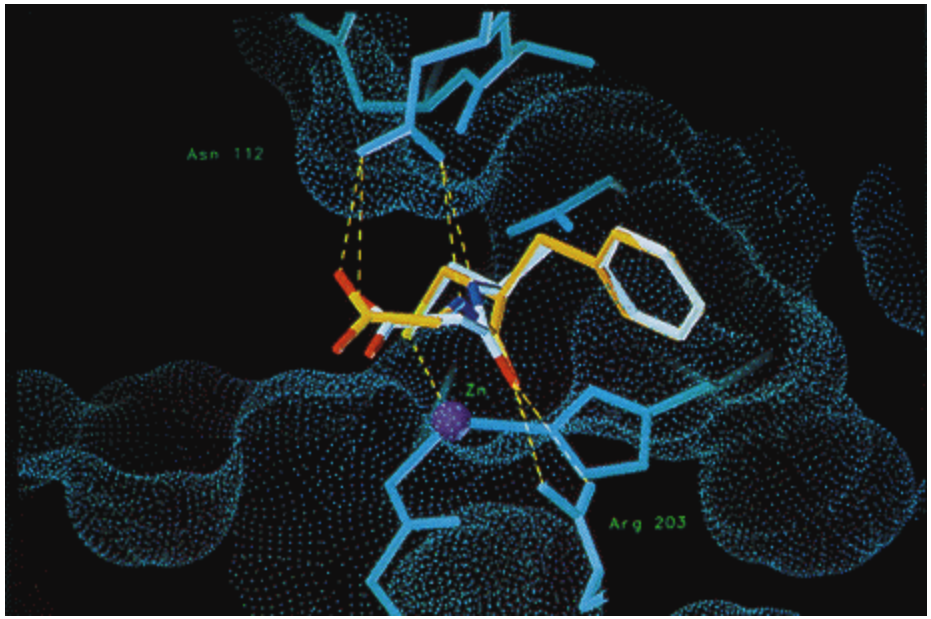
Ausblick - Informationsvisualisierung

Datenbank-Visualisierung (NCI *in vitro* anticancer screening program)

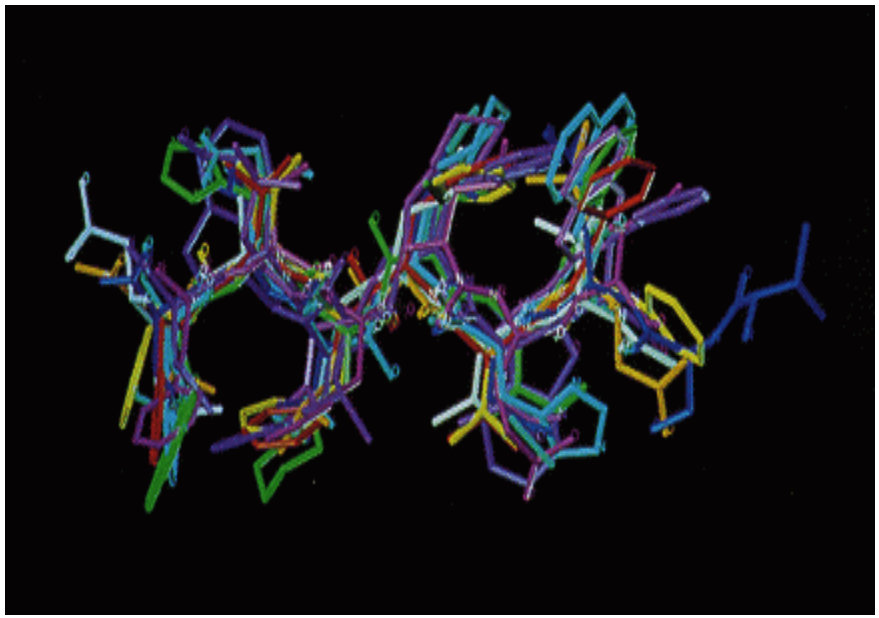


Suche nach neuen Cancerostatika

- Zusammenhang zwischen Struktur und Wirkung



Protein-Wirkstoff-Komplex *

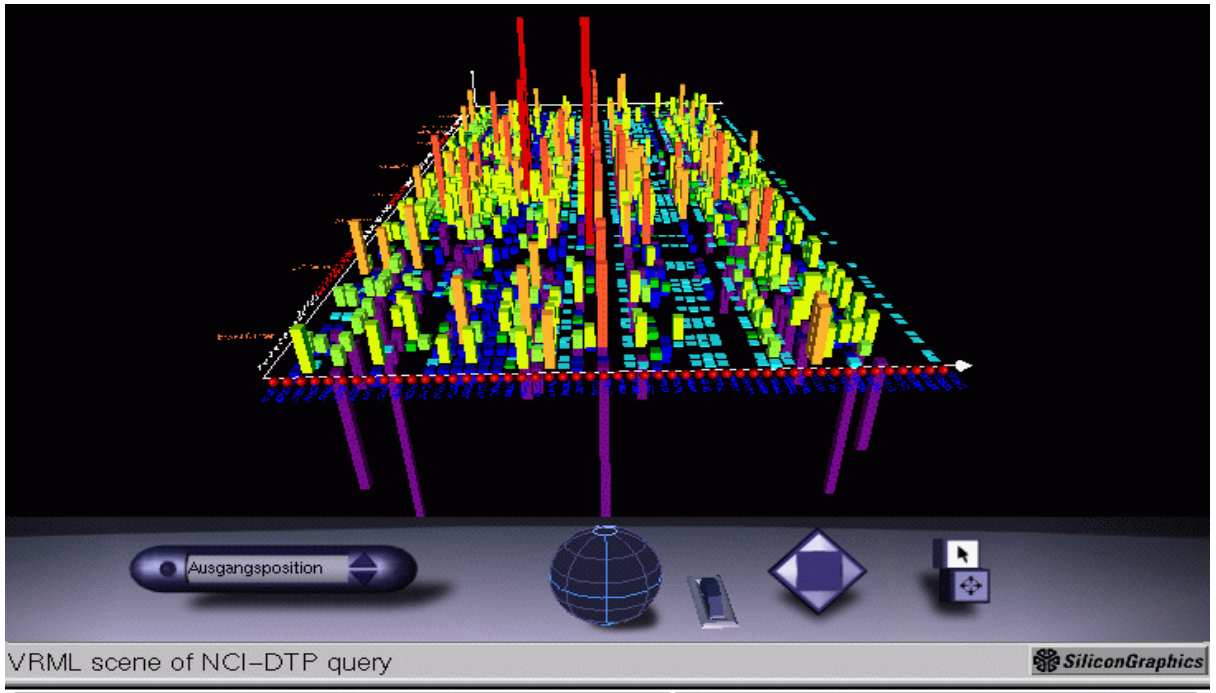


Strukturüberlagerung *

(* aus H.-J. Böhm, G. Klebe, H. Kubinyi, "*Wirkstoffdesign*", Spektrum Verlag, **1996**, S. 329, 330)

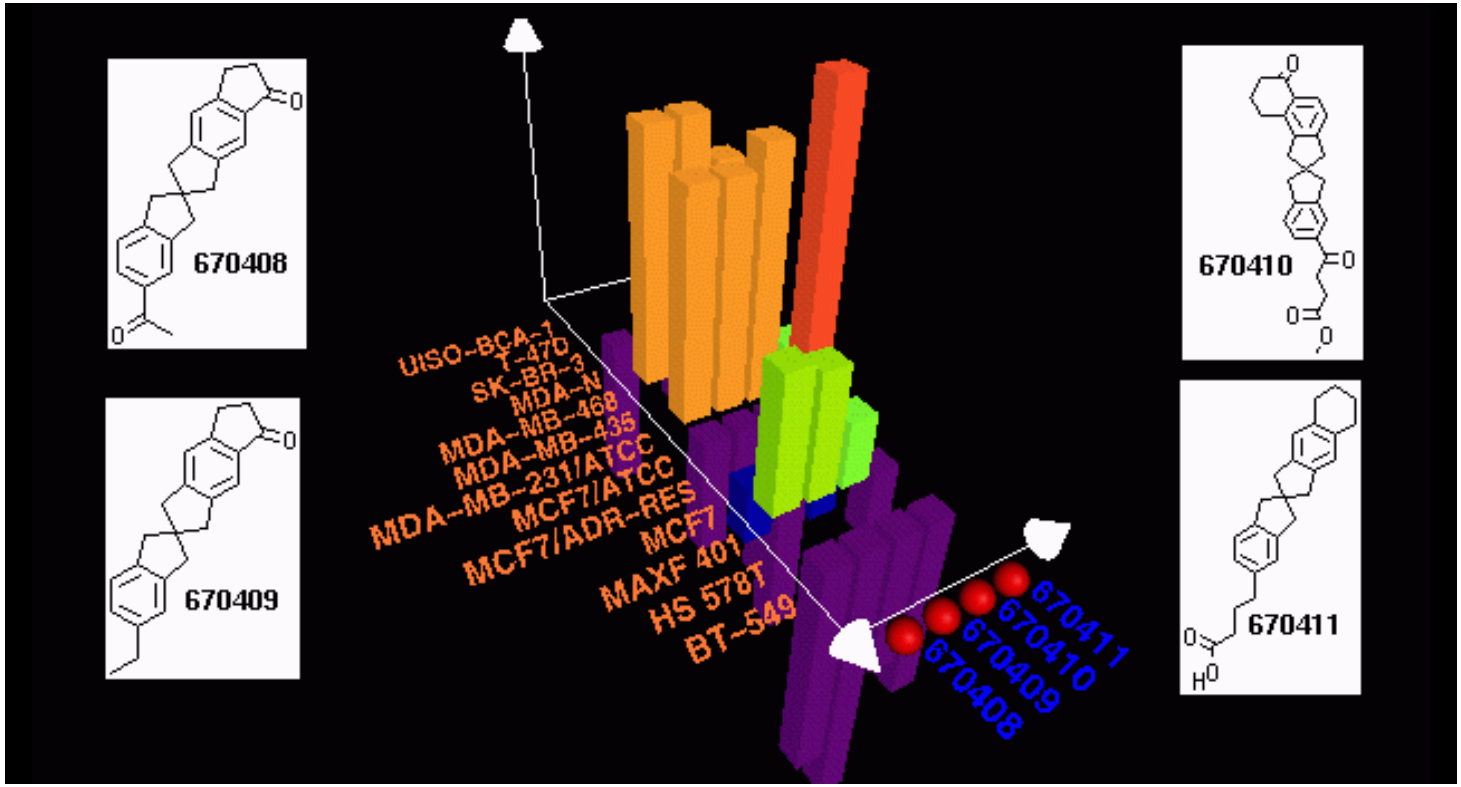
Ergebnis einer Suchanfrage (NCIDTP-Demo)

Substruktur-Suche



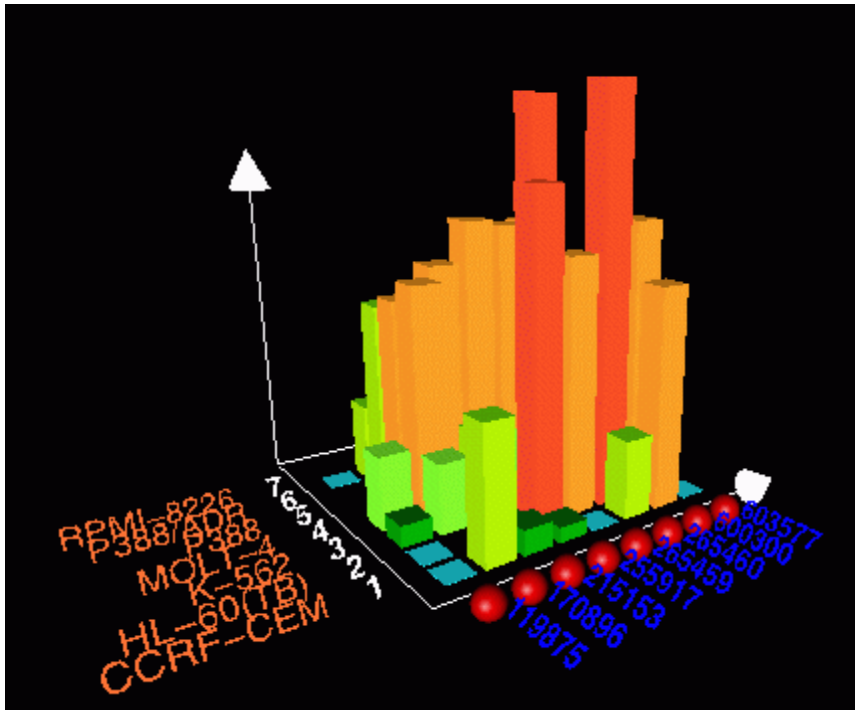
Fokussierung des Suchergebnis

- Ermittlung einer möglichen Wirkstruktur (Brustkrebs)

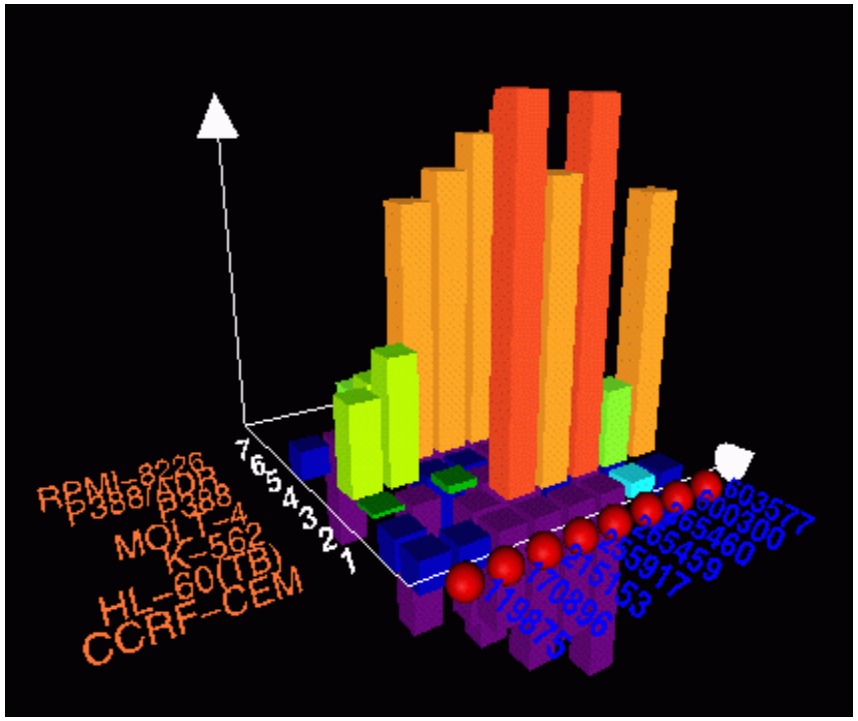


Darstellungsvarianten

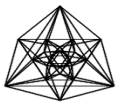
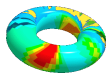
- Wirkung von cis-Platin-Derivaten auf Leukämiezellen



absolute Wirkung



relative Wirkung

V³D² ChemVis

- **ChemVis-Projekt-Homepage**:
  - http://www2.ccc.uni-erlangen.de/projects/ChemVis/
- **PROLET**:
  - http://www9.informatik.uni-erlangen.de/eng/research/prolet/
- **OrbVis**:
  - http://www2.ccc.uni-erlangen.de/services/orbital/
- **VRML Creator for Chemical Structures**:
  - http://www2.ccc.uni-erlangen.de/services/vrmlcreator/
- **VRML Volume Visualization Tool**:
  - http://www9.informatik.uni-erlangen.de/Persons/Engel/vvv/
- **NCI-DTP-Demo (InfoVis)**:
  - http://www2.ccc.uni-erlangen.de/services/ncidtp/