

СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ БЕЛКОВЫХ МОЛЕКУЛ.
МОДУЛЬ ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ.

Целью работы является создание программной системы решающей следующие задачи:

- Реализация алгоритма моделирования пространственной структуры белковых молекул
- Разработка подсистемы визуализации моделирования пространственной структуры
- Анализ и контроль результатов моделирования

Система в целом состоит из модулей представленных на рис.1:

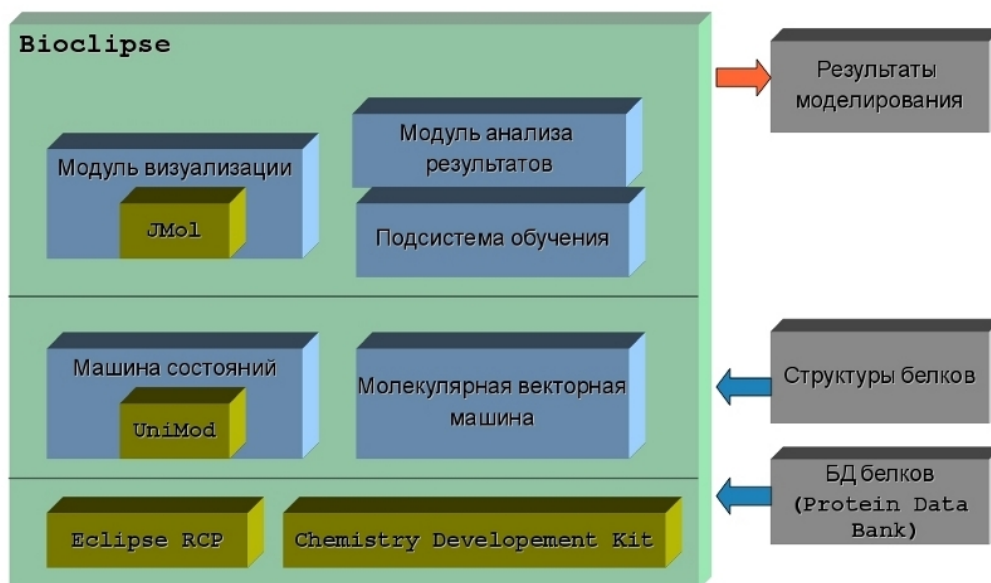


Рисунок 1. Структура системы моделирования белка

Непосредственное моделирование пространственной структуры предполагает реализацию на основе существующей основанная на eclipse rcp платформе для исследований в области биоинформатики. Результаты моделирования в стандартном для предметной области формате PDB должны быть сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными в том же формате. Результат оценки может быть представлен, например, в виде графика отклонений положения составляющих белка (аминокислот) в смоделированной и реальной структурах.

В рамках доклада представлен прототип модуля визуальной оценки результатов моделирования белковых структур. Модуль обеспечивает:

- Загрузку экспериментальной и смоделированной структуры белка – использовано стандартное решение из открытой библиотеки на языке C#
- Построение графика отклонения структур
- Генерацию страницы с результатами для выкладывания на Web-сервер – используется технология ASPX
- Передачу информации о результатах сравнения структур на ASPX страницу – используется возможность XML и бинарной сериализации объектов в .Net

Реализация выполнялась в среде Microsoft Visual Studio 2008. При проектировании системы использовался продукт Microsoft Office Visio.