

CellMicrocosmos v2.1

-The Revision-

Überblick

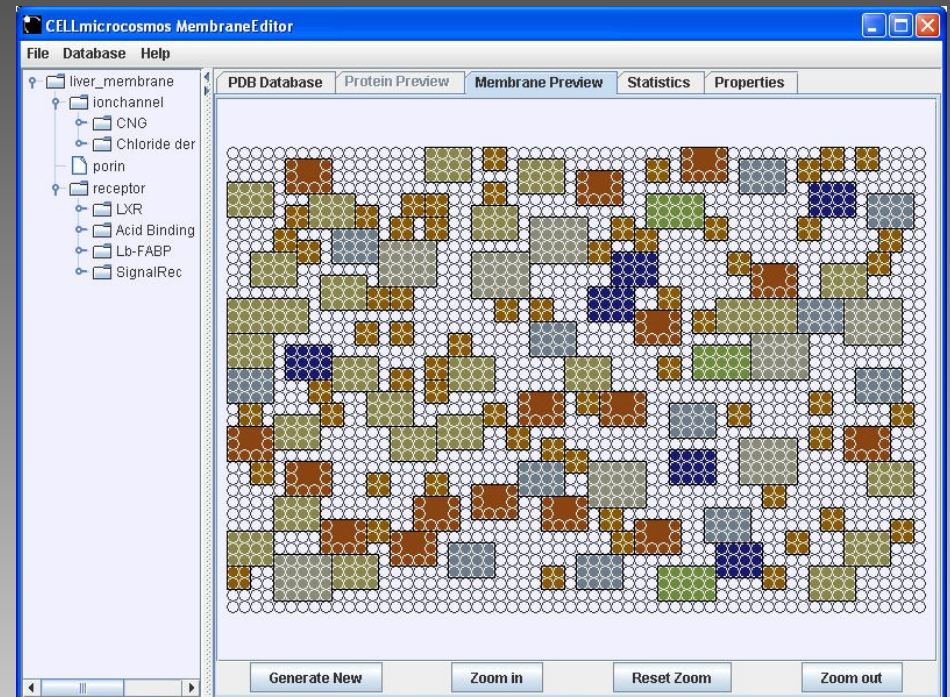
- Intention eines Membran-Editors
- Analyse des alten Editors
- Anforderungen und Vorstellung des Teams
- Live-Präsentation
- Fazit des Projektseminars
- Ausblick in die Zukunft

Intention

- Softwareprodukt ermöglicht:
 - Generierung beliebiger Modelle von Zellmembranen
 - Bearbeitung der Modelle
 - Export von Modellen zur Weiterverarbeitung
- Unterstützt Biologen & Bioinformatiker bei:
 - Visualisierung von Zellmembranen
 - Erstellung von Präsentationen
 - Konkreten Forschungen

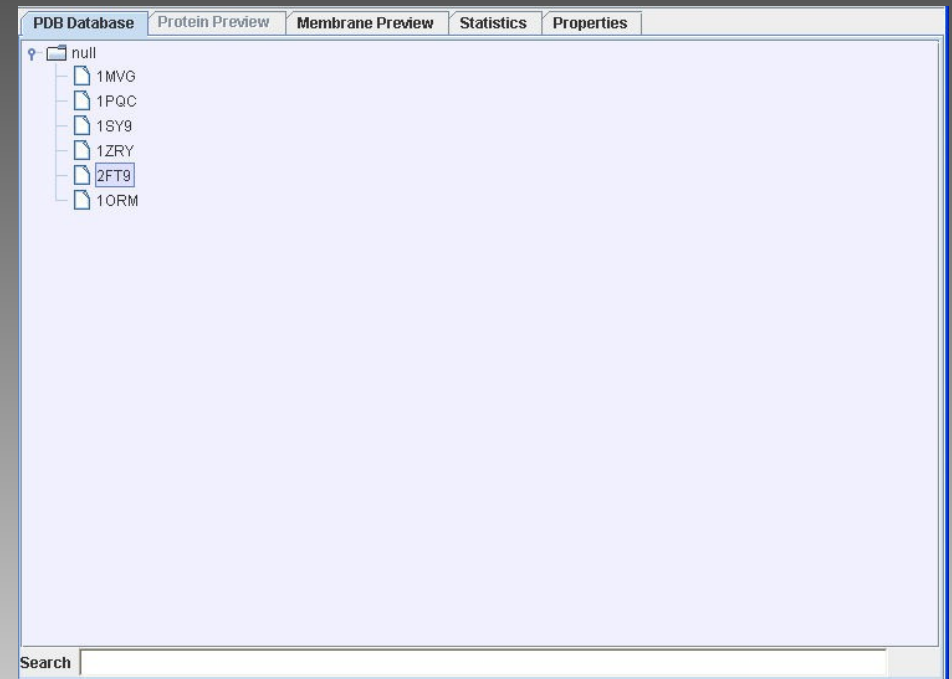
Analyse des alten Editors

- Aufbau:
 - Standard-Menü-Leiste
 - Treeview des Membran-Modells
 - Fenster mit verschiedenen Ansichten zum Modell
- Generelle Probleme:
 - Schlechte Bedienbarkeit
 - Grafisch wenig ansprechend
 - Ziemlich unübersichtlich
 - Fehlen nützlicher Features



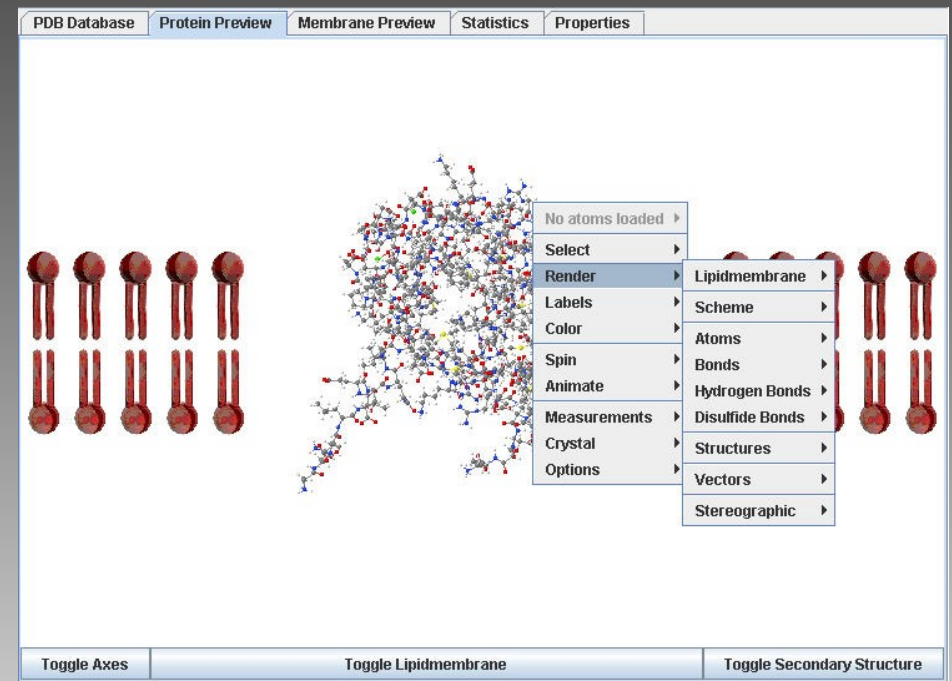
PDB Database

- Problemanalyse:
 - Treeview mit PDB-Code
 - Zusatzinformationen fehlen
 - Suche ziemlich überflüssig



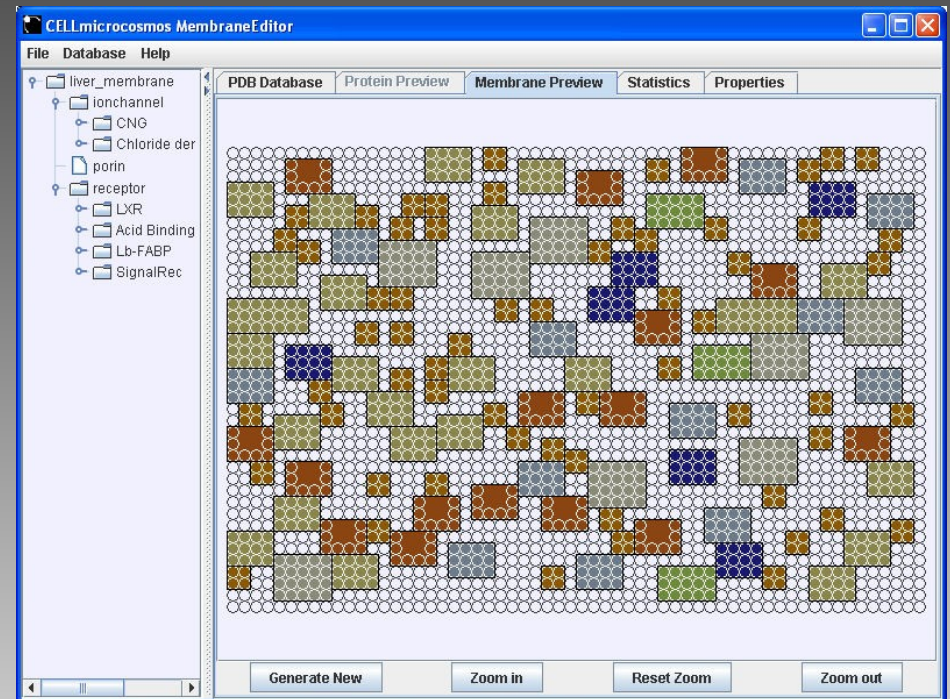
Protein Preview

- Ansprechender Teil des Editors
- Problemanalyse:
 - Langsamer Aufbau der Darstellung
 - Popup-Menü vielen nutzlosen bzw. undokumentierten Features
 - Keine Zoomfunktion



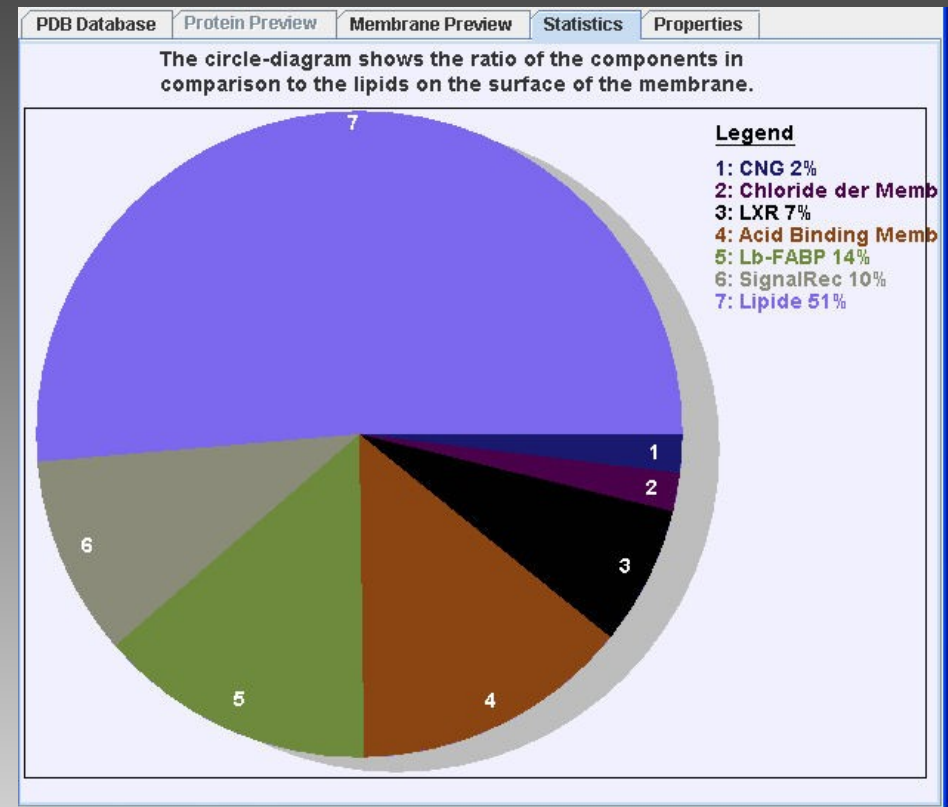
Membrane Preview

- Problemanalyse:
 - Sehr abstrakte Darstellung der Proteine und Lipide
 - Zufallsgenerator bestimmt Aufbau der Membran
 - Überflüssige Zoomfunktion
 - „Funky-Disco-Modus“



Statistics

- Problemanalyse:
 - Darstellung nur als Kreisdiagramm
 - Farben sind willkürlich gewählt und nicht sehr ansprechend
 - Legende schneidet zu lange Namen einfach ab



Properties

- Problemanalyse:
 - Wichtigste Informationen werden dargestellt
 - Aber zu welchem Preis?

PDB Database	Protein Preview	Membrane Preview	Statistics	Properties
Acid binding				
Name:	1ZRY			
Description:	NMR STRUCTURAL ANALYSIS OF APO CHICKEN LIVER BILE ACID BINDING PROTEIN			
Percent:	6%			
Rotationmatrix:	[[0.5496153 -0.2184163 -0.8063629] [0.61035347 0.7640445 0.20906195] [0.5704339 -0.60706943 0.55324125]]			
YTranslation:	0.0			
PDBCode	1ZRY			
Date	23-MAY-05			
Name:	2FT9			
Description:	CRYSTAL STRUCTURE OF AXOLOTL (AMBYSTOMA MEXICANUM) LIVER BILE ACID-BINDING PROTEIN BOUND TO CHOLIC ACID			
Percent:	8%			
Rotationmatrix:	[[0.91879404 -0.03193043 -0.39344856] [-0.3422115 -0.5612406 -0.7535933] [-0.19675647 0.8270385 -0.5265902]]			
YTranslation:	0.0			
PDBCode	2FT9			
Date	24-JAN-06			

Anforderungen an CM v2.1

- Ziel war die Überarbeitung bzw. die komplette Neugestaltung des Membran-Editors
- Einteilung der Aufgaben in die Themenbereiche:
 - Membran-Berechnung
 - PDB-Integration
 - GUI/JMol/XML
 - Dokumentation

Membran-Berechnung

- Leitung:
 - Sebastian Schneider
- Aufgaben:
 - Einbindung relevanter Membranlipide
 - Verbesserung der Lipid-/Proteindarstellung
 - Membranberechnung aufgrund geometrischer und physikalischer Eigenschaften
 - 2-seitige Darstellung der Membran
 - Verbesserung der Benutzerfreundlichkeit in der „Membrane Preview“

PDB-Integration

- Leitung:
 - Christian Fink, Matthias Koch
- Aufgaben:
 - Fehlerkorrektur der PDB-Parser Probleme
 - Übergabe zusätzlicher Informationen aus den PDB-Dateien an den Editor
 - LF160: Import aus anderen Quellen der PDB?
 - Berechnung der Protein-/ Lipidausdehnung
 - Kompatibilitätssteigerung zu anderen Editoren

GUI / JMoI / XML

- Leitung:
 - Tim Dingersen, Ralf Mertens

- Aufgaben:
 - Modularer Aufbau des Programms
 - Verbesserung der Benutzerfreundlichkeit
 - Grundlegende Überarbeitung der Visualisierung von Statistiken und PDB-Informationen
 - Erweiterung des JMol-Packages
 - Integration einer neuen XML-Struktur

Dokumentation

- Leitung:
 - Andrea Steinmetz

Aufgaben:

- Programmtests und Bug-Reporting
- Erstellung einer ausführlichen HTML-Hilfe

Tadaaaaaa!

CellMicrocosmos v2.1

Live-Präsentation

Fazit der Gruppenarbeit

- Komplette Neugestaltung des Programmes
 - Verwurf alter Features wie z.B. Wizard/Suche
 - Umgestaltung der „Local Database“
 - Einbindung nützlicher Features wie z.B. Anbindung an die RCSB
- Einige kleinere Probleme, aber ansonsten ein:
- „Herzliches Dankeschön an unseren lieben Seminarleiter und an alle Teammitglieder!“

Ausblick

- Einige Ziele des Lastenhefts nicht erreicht, bzw. im Verlauf des Projektes verworfen:
 - Übernahme von Orientierungsdaten aus der OPDB
 - Einbindung von PDB-Internetseiten
 - PDB-Baumstruktur/Wizard verworfen
- Detailliertere und genauere Berechnung der Membran erfolgt im Rahmen der Diplomarbeit von Sebastian

Fragen???

- Das CM2.1 Team steht ihnen nun gerne für weitere Fragen zur Verfügung
- Ansonsten wünschen wir noch:

Viel Erfolg und Spass bei den zukünftigen CM-Projekten!