

KPDBViewer : Java3D를 이용한 PDB 뷰어 개발

변상희⁰ 김진홍 문남두 이명준
울산대학교 컴퓨터정보통신공학부
{heeya⁰, avenue, dooya, mjlee}@ulsan.ac.kr

KPDBViewer : Development of PDB Viewer using Java3D

Sang-Hee Byun⁰, Jin-Hong Kim, Nam-Doo Moon, Myung-Joon Lee
School of Computer Engineering & Information Technology, University of Ulsan

요 약

단백질은 생명현상 유지에 필수적인 기능을 담당하며 이러한 기능이 단백질의 3차 구조에 의해 결정된다는 것이 밝혀짐으로써 단백질 3차 구조에 대한 연구가 더욱 활발히 진행되고 있다. 본 논문에서는 단백질의 3차 구조를 파악할 수 있는 Java3D 기반의 단백질 구조 뷰어인 KPDBViewer에 대하여 기술한다. 개발된 KPDBViewer는 3차원 이미지 상에서 단백질 내 아미노산들의 이벤트 처리를 지원함으로써 단백질 내 아미노산의 정보를 보다 효과적으로 파악할 수 있다. 또한, Java2D 기반의 단백질 뷰어는 다양한 구조 보기 기능이 부족하다. 이와 같은 기능을 제공함으로써 단백질 구조 정보를 보다 쉽게 이해하는데 도움을 줄 것으로 기대한다.

1. 서 론

단백질은 생명현상 유지 및 생명체 내에서 발생하는 화학반응에 있어 필수적인 역할을 담당하며, 20개의 아미노산의 배열에 의한 독특한 3차 구조를 형성한다. 이러한 3차 구조는 생명현상의 중요한 기능을 결정한다. 따라서 단백질의 3차 구조에 대한 활발한 연구와 단백질의 기능을 효과적으로 분석하기 위해서는 이러한 3차 구조 정보를 보여주는 도구 개발이 필요하다.

최근 컴퓨터 기술의 발전과 3차원 그래픽분야의 발전으로 단백질 3차 구조를 보다 용이하게 모델링 할 수 있게 되었다. Java를 이용하여 단백질 3차 구조를 모델링하고 있는 대표적인 뷰어는 QuickPDB[1], WebMol[2], JMV[3] 등이 있다. 이들 뷰어는 실험을 통해 밝혀진 3차 구조 데이터를 기반으로 웹 상에서 단백질의 3차 구조를 다양한 모양으로 보여준다. 그러나 기존의 뷰어들은 PDB[4]가 제공하는 단백질의 3차 구조정보의 일부 내용만을 이용하기 때문에 거리, 각도와 같은 자세한 정보를 파악하기가 쉽지 않다.

본 논문에서는 Java3D[5]를 이용한 단백질 3차 구조 뷰어인 KPDBViewer의 개발에 대하여 기술한다. Java3D는 Java를 이용하여 대화형의 3차원 그래픽을 표현하기 위하여 Sun Microsystems에서 개발한 클라이언트용 Java API이다. KPDBViewer는 실시간으로 PDB 파일을 읽어 단백질의 3차 구조를 보여주고 단백질의 아미노산, 원자, 2차 구조 등의 구조정보를 제공하며, 한글화된 인터페이스를 제공해 주는 뷰어이다.

KPDBViewer는 PDB 파일을 레코드별로 객체를 생성하여 데이터를 관리하기 때문에 보다 효과적으로 단백질의 3차 구조정보를 얻을 수 있다. 3차원 이미지 상에서 단백질 내 아미노산들의 이벤트 처리와 같은 기능을 제공함으로써 단백질 내 아미노산의 정보를 보다 효과적으로 파악할 수 있다. 또한, 다양한 구조보기 기능을 제공

함으로써 단백질 구조 정보를 보다 쉽게 이해하는데 도움을 줄 것이다.

본 논문의 구성은 다음과 같다. 2장에서는 Java3D 바탕의 KPDBViewer 설계에 대해서 기술한다. 3장에서는 구조보기 관련 모듈과 이벤트 흐름 처리에 대해서 설명한다. 4장에서는 KPDBViewer와 타 시스템을 비교하며 마지막으로 결론과 향후 연구과제에 대해서 기술한다.

2. KPDBViewer 설계

KPDBViewer는 PDB파일에 포함된 단백질의 3차 구조정보를 분석하고 Java3D를 사용하여 단백질의 구조를 보여주기 위해 자바 애플릿으로 개발되었다. 개발된 뷰어는 사용자가 입력한 PDB ID를 입력받아 본 시스템이 제공하는 데이터베이스에서 PDB 파일을 다운로드 한 후 단백질의 3차 구조정보를 읽어 실시간으로 3차 구조 및 정보를 표현한다. PDB 파일은 한 단백질에 대한 다량의 구조정보를 담고 있다. PDB 파일을 레코드의 의미별로 분류함으로써 PDB 파일의 정보를 보다 효과적으로 관리할 수 있고 단백질의 3차 구조정보를 보다 쉽게 얻을 수 있다[6].

[그림 1]은 KPDBViewer 시스템에서 사용된 클래스들의 관계를 보여준다.

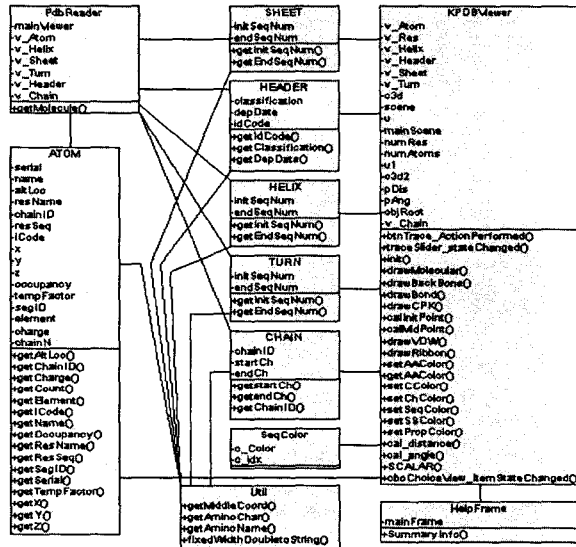
시스템의 주요 클래스들은 다음과 같다.

- PdbReader 클래스 : 3차 구조정보 파일(PDB 파일)을 읽어 PDB 에서 구분한 각 레코드별로 객체에 저장하는 클래스이다. 자바 객체에 저장된 단백질 구조정보 데이터는 효과적으로 관리 및 이용될 수 있다.
- Util 클래스 : ATOM들의 구조를 보여줄 때 각각을 화면의 중심으로 이동시키기 위해 각 ATOM의 좌표 값을 변환하는 기능, 3문자 아미노산 알파벳 기호를 한 문자 아미노산 알파벳 기호로 변환 그리고 아미노산의 이름을 알아낼 수 있는 기능을 제공하는 클래스이다.

† 본 연구는 한국과학재단 목적기초연구(R01-2001-00535) 지원으로 수행되었음.

· KPDBViewer 클래스 : 다양한 모양으로 단백질의 3차 구조를 보여주며, 효과적인 단백질의 파악을 위해 단백질의 특성을 아미노산, 원자, 2차 구조 등으로 분류하여 서로 다른 색으로 구분하여 보여줄 수 있는 메서드를 지원한다. 또한 원자 간의 거리, 각도 등을 측정할 수 있고 단백질의 Trace를 보여주는 기능도 함께 제공하는 클래스이다.

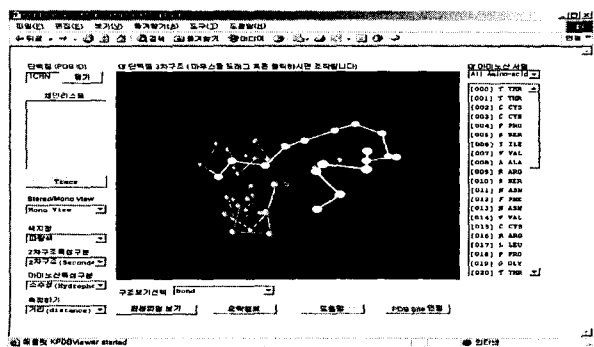
· 그 외 클래스 : ATOM, HELIX, SHEET, TURN, CHAIN 클래스는 PdbReader 클래스에서 읽은 PDB 정보 레코드 별로 구분하여 저장하고 있다.



[그림 1] KPDBViewer 클래스 다이어그램

3. KPDBViewer 구현

단백질의 3차 구조 뷰어는 분자의 구조 파악이 용이하고 사용이 편리해야 한다. KPDBViewer는 한글화된 인터페이스를 제공하여 전문적인 지식을 가지지 않은 사용자가 본 시스템을 이용하더라도 단백질의 구조 뷰어를 쉽게 사용할 수 있으며 구조를 파악하기에도 용이하다.



[그림 2] KPDBViewer 실행화면

[그림 2]는 KPDBViewer 시스템의 화면 구성을 보여

준다. KPDBViewer는 단백질 3차 구조정보 파일을 이용하여 표현되는 단백질 3차 구조 모형을 마우스를 조작하여 회전, 이동, 확대/축소시킬 수 있는 인터페이스를 제공한다. 단백질에 포함된 아미노산과 함께 각각의 체인 정보를 화면 우측에 나열하였으며, 화면 중앙에는 단백질의 3차 구조를 나타낸다. 화면 좌측과 하단의 버튼들은 단백질 내의 원자들과 아미노산을 여러 가지 특성별로 분류하고 서로 다른 색으로 구분하여 단백질의 구조를 효과적으로 파악할 수 있는 도구들이다.

3.1 구조보기 관련 모듈

KPDBViewer 시스템에서 주요 구조보기는 단백질 3차 구조를 사용자 입력에 의해 3차원 상의 이미지를 다양하게 표현하도록 KPDBViewer 클래스에서 처리한다.

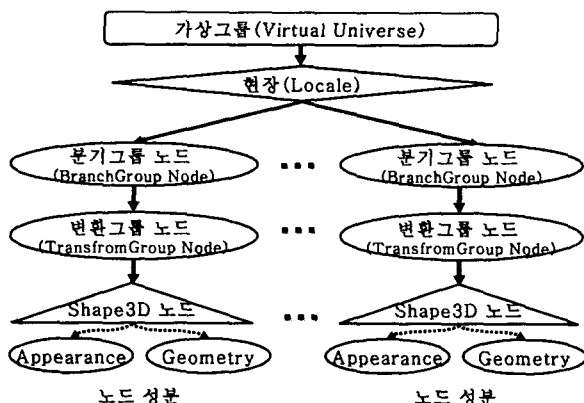
drawMolecular() 메소드는 사용자의 요청을 처리할 수 있는 메소드들을 호출한다. 기본적으로 PDB 파일이 로드되면 drawBackBone() 메소드를 호출하여 아미노산의 C_α(alpha-carbon) 원자를 연결한 구조(back-bone)의 3차 구조를 보여준다. 그 후 사용자 입력에 따라 아미노산(C_α)을 체적이 있는 구(sphere)로 표현하고 구와 구의 연결 상태(cylinder)로 나타내는 구조(bond)등의 여러 가지 형태도 KPDBViewer 클래스에서 제공하는 메소드를 호출하여 보여줄 수 있다. 그리고 아미노산의 2차구조 특성을 구분하여 표현하도록 여러 메소드들을 제공하고 있다.

3.2 이벤트 처리

KPDBViewer를 통해 단백질 3차 구조를 표현할 수 있다. 이렇게 표현된 3차원 이미지 상에서 각 아미노산의 정보를 얻어오거나, 아미노산별 색상 변경 등 객체를 효율적으로 처리하기 위해서는 Java3D에서 제공하는 com.sun.j3d.utils.behaviors.picking.PickMouseBehavior 클래스를 상속받아서 processStimulus()메소드를 오버라이딩(overriding) 해야한다. 그리고 각 아미노산 객체를 나타내는 Shape3D 노드의 분기그룹 노드(BranchGroup Node)를 생성하여 현장(Locale)에 등록하여야 한다. 각각의 아미노산 정보를 처리할 수 있도록 이벤트를 구현함으로써 단백질 내 아미노산의 위치와 모양을 보다 효과적으로 파악할 수 있다.

[그림 3]은 단백질 내 각 객체의 이벤트를 처리하기 위한 장면 그래프(scene graph)구성을 보여준다. Java3D를 이용해서 단백질의 3차 구조 뷰어를 쉽게 만들 수 있는 이유는 장면 그래프라는 구조 때문이다. 장면 그래프는 객체들의 계층적 데이터 구조를 나타낸다. Java3D의 장면 그래프를 사용함으로써 프로그래머가 객체의 렌더링 순서를 일일이 지정해 주지 않아도 렌더링을 수행할 수 있다. Java3D에서 표현하는 가상우주(VirtualUniverse)는 장면 그래프로부터 생성된다. 이러한 장면 그래프는 단백질 내의 각각의 아미노산 정보를 다룰 수 있도록 기술된 노드(Node)들로 구성된다. 모든 노드는 부모 노드를 가진다. 장면 그래프는 여러 자식 노드를 갖는 그룹(Group)들을 가진다. 이러한 방식으로 부모 그룹에 붙여진 노드로부터 계층적 체계가 만들어 질 수 있다. 분기 그룹(BranchGroup) 노드와 변환그룹(TransformGroup)

노드는 모두 그룹 노드이다. 변환그룹은 자식 노드에 적용된 변환과 크기 조절 그리고 회전 정보들을 가진다 [7,8].



[그림 3] 이벤트 처리를 위한 장면 그래프

각 아미노산 객체들의 이벤트를 처리하기 위해서는 분기그룹, 변환그룹 및 Shape3D의 속성을 (표 1)과 같이 지정해 주어야 한다. 분기그룹 노드의 4가지 속성을 부여함으로써 자식 노드들을 추가, 삭제할 수 있다. 변환그룹 노드의 3가지 속성과 아래 표에서 기술한 Shape3D의 속성들을 부여함으로써 각 아미노산 객체의 이벤트를 처리할 수 있도록 한다.

(표 1) 객체별로 이벤트를 처리하기 위한 속성치

분기그룹의 속성
setCapability(Group.ALLOW_CHILDREN_WRITE)
setCapability(Group.ALLOW_CHILDREN_READ)
setCapability(Group.ALLOW_CHILDREN_EXTEND)
setCapability(BranchGroup.ALLOW_DETACH)
변환그룹의 속성
setCapability(TransformGroup.ALLOW_TRANSFORM_WRITE)
setCapability(TransformGroup.ALLOW_TRANSFORM_READ)
setCapability(TransformGroup.ENABLE_PICK_REPORTING)
Shape3D의 속성
setCapability(Shape3D.ALLOW_GEOMETRY_READ)
setCapability(Shape3D.ALLOW_LOCAL_TO_VWORLD_READ)
setCapability(Shape3D.ALLOW_PICKABLE_READ)
setCapability(Shape3D.ALLOW_BOUNDS_READ)
setCapability(Shape3D.ENABLE_PICK_REPORTING)
setCapability(GeometryArray.ALLOW_INTERSECT)
setCapability(GeometryArray.ALLOW_FORMAT_READ)
setCapability(GeometryArray.ALLOW_COUNT_READ)
setCapability(GeometryArray.ALLOW_COORDINATE_READ)

4. 타 시스템과 비교

(표 2)에서는 KPDBViewer와 타 단백질 3차원 뷰어의 장단점을 보여주고 있다. KPDBViewer의 가장 큰 장점은 Java3D를 사용하였지만 이미지에서 각 아미노산별 이벤트를 처리할 수 있고 Java2D에서 제공하지 못하는 다양한 이미지로 단백질 구조를 표현할 수 있다는 것이다. 단점으로는 이벤트들을 처리하는데 속도가 느리다는

것이다.

(표 2) 타 단백질 3차 구조 뷰어의 비교

	KPDBViewer	JVM	QuickPDB	WebMol
개발언어 (이미지상)	Java3D	Java3D	Java2D	Java2D
이벤트처리	지원		지원	지원
Trace	지원			지원
구조보기	아미노산별	지원	지원	지원
	2차구조별	지원	지원	지원
	체인별	지원	지원	지원
	back-bone	지원	지원	지원
	기타(bond, CPK 등)	지원	지원	
	Stereo			지원
거리/각도 측정	지원			지원
파일로 저장		지원		

*공백은 지원하지 않음을 의미

5. 결론

본 논문에서는 단백질 3차 구조를 보다 효과적으로 파악할 수 있는 Java3D 기반의 단백질 구조 뷰어에 대해서 기술하였다. KPDBViewer는 사용자 편의를 위해 한글화된 인터페이스를 제공하고 단백질의 3차 구조를 특성별로 파악할 수 있는 여러 가지 구조 보기를 제공함으로써 단백질 3차 구조 파악이 보다 쉬워졌다. 단백질의 정보가 표현된 3차원의 이미지 상에서 직접 마우스 조작을 통하여 이벤트를 처리할 수 있는 기능을 지원한다. 이 같은 기능은 단백질 내 아미노산의 정보를 보다 효율적으로 이해하는데 도움을 줄 수 있다.

향후 연구 과제로는 단백질의 3차 구조 뷰어의 속도를 좀더 개선할 것이다. 현재 지원하고 있는 PDB 파일 외 다양한 단백질 3차 구조 정보 파일을 읽을 수 있고, 단백질의 3차 구조를 그림파일로 저장할 수 있는 기능을 제공할 계획이다.

6. 참고 문헌

- [1] Applet QuickPDB v1.1 © 1996-1998 SDSC, by Ilya Shindyalov and Phil Bourne
- [2] Walther D. "WebMol - a Java based PDB viewer." Trends Biochem Sci, 22: 274-275, 1997
- [3] JVM at "http://www.ks.uiuc.edu/Development/jmv/"
- [4] H.M. Berman, J. Westbrook, Z. Feng, G. Gilliland, T.N. Bhat, H. Weissig, I.N. Shindyalov, P.E. Bourne: The Protein Data Bank. Nucleic Acids Research, 28 pp. 235-242, 2000
- [5] Java3D at "http://java.sun.com/products/java-media/3D/"
- [6] 구형서, 주영준, 박양수, 이명준, "PDB 한글 뷰어", 한국정보과학회 '2002 가을 학술발표논문집 Vol.29, No.2, pp373-375, 2002
- [7] Daniel Selman, "Java 3D Programming", Manning Publication, March 2002
- [8] 박동규, "자바 3D 프로그래밍", 도서출판 대림, 2001.5