



AGH

Projekt

Algorytmy przetwarzania i analizy obrazów medycznych

Biochemiczna przeglądarka plików



Barbara Tomaka
Katarzyna Żmuda
MSIB, AGH

Kraków 2011

1. Zadanie

Przedmiotem projektu było wykorzystanie połączenia Qt i VTK w celu opracowania prostej przeglądarki plików formatu PDB (opisujących strukturę białek). Dodatkowo program miał mieć możliwość zmiany wyglądu cząsteczek, np. skalowania, lub pokazywania tylko niektórych elementów cząsteczki z pominięciem innych.

2. Sposób realizacji zadania

Punktem wyjścia był gotowy przykład przeglądarki plików PDB wykorzystujący klasę `vtkPDBReader`, którego źródło można odnaleźć na stronie <http://www.vtk.org/Wiki/VTK/Examples/Cxx/IO/ReadPDB>. W programie Qt Creator uprzednio przygotowano projekt okna przeglądarki, dla którego potrzeb zaadaptowano powyższe rozwiązanie. Pliki z przykładowymi danymi z rozszerzeniem `.pdb` znaleziono w sieci.

3. Napotkane problemy

Po skompilowaniu programu zauważono błędy w odczytywaniu zawartości plików z danymi. W oknie przeglądarki nie pojawiały się wszystkie atomy cząsteczki, a te, które występowały, ułożone były w linii prostej zamiast przestrzennie. Sam program znakomicie radził sobie z rysowaniem atomów i wiązań pomiędzy nimi, problem tkwił natomiast w odczytywaniu zawartości plików. Podejrzenie padło więc na samą klasę `vtkPDBReader`. Pobrany z sieci przykład doskonale działał wywołany z linii komend (`cmake`), w połączeniu zaś z Qt tracił swoją funkcjonalność.

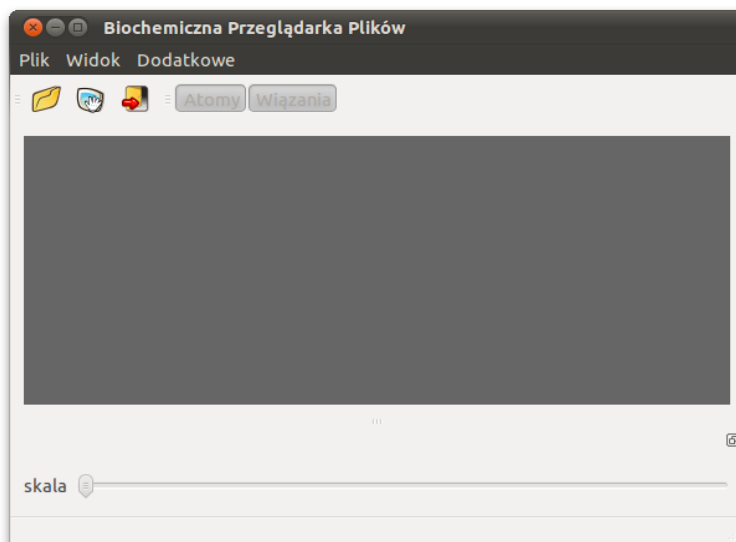
4. Rozwiązanie

Postanowiono podmienić wczytywarkę na inną, również dziedziczącą po klasie wyższej, stworzonej do opisu cząsteczek (`vtkMoleculeReaderBase`). Wybrano klasę `vtkXYZMolReader`. W plikach projektu podmieniono samą klasę, resztę algorytmu pozostawiając bez zmian, w sieci znajdując jedynie dane z oczekiwanym rozszerzeniem (`.xyz`). Niestety problem się powtórzył. Skłoniło to do wnioskowania o występowaniu niesprecyzowanego problemu bądź błędu dla tych klas w połączeniu z Qt.

Rozwiązaniem okazała się zmiana wczytywarki na bardziej ogólną – `vtkPolyDataReader` (rozszerzenie plików czytanych: `.vtp`), służącej nie tylko do czytania cząsteczek biochemicznych, ale ogólnie do czytania opisu przestrzeni. Pliki z danymi zapisano z oczekiwanym rozszerzeniem.

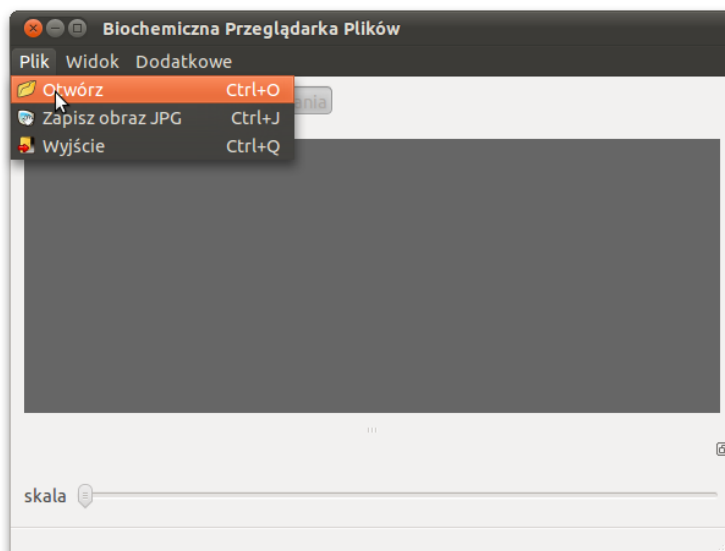
5. Prezentacja wyników

Po uruchomieniu programu użytkownik ogląda okno początkowe (Rys.1), z kilkoma nieaktywnymi elementami (atomy, wiązania, skala – zostaną one omówione w dalszym opisie).



Rys. 1. Okno początkowe programu

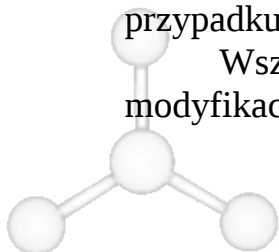
Następnie klikając przycisk *Otwórz* w pasku menu (Rys. 2), bądź ikonę w pasku narzędzi, użytkownik wybiera plik do otwarcia. Nowy plik można otworzyć również używając skrótu klawiszowego *Ctrl+O*.



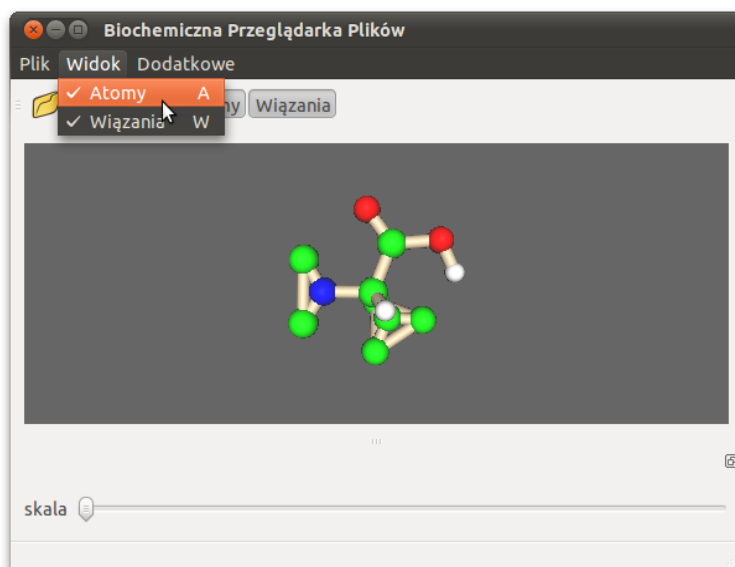
Rys. 2. Otwieranie pliku

Po zaakceptowaniu wyboru pliku w oknie pojawia się model cząsteczki (w tym przypadku model cząsteczki alaniny).

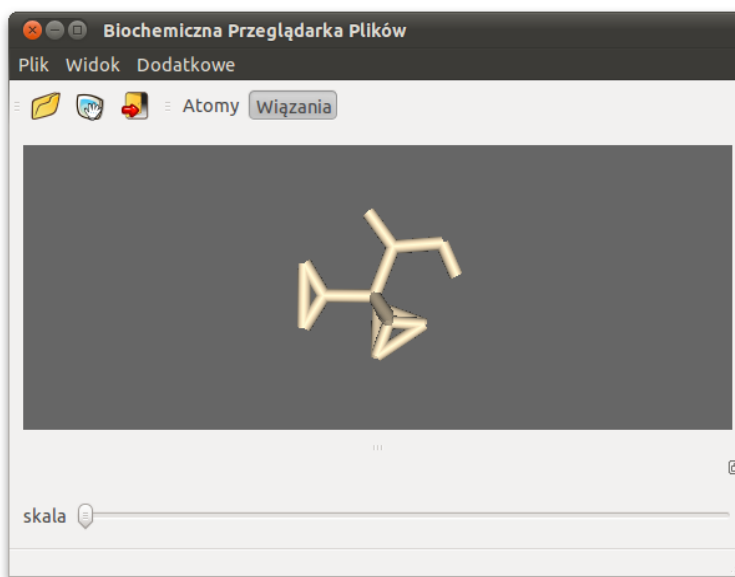
Wszystkie nieaktywne dotąd przyciski są teraz aktywne, pozwalają one na modyfikację widoku wczytanej cząsteczki. Przyciski *Atomy* i *Wiązania* (Rys. 3)



są domyślnie wciśnięte. Wyłączając je, wyłącza się widok odpowiednich elementów (kul – czyli atomów, oraz tub – czyli wiązań pomiędzy atomami) (Rys. 4). Ten sam efekt można uzyskać stosując skróty klawiszowe A i W.

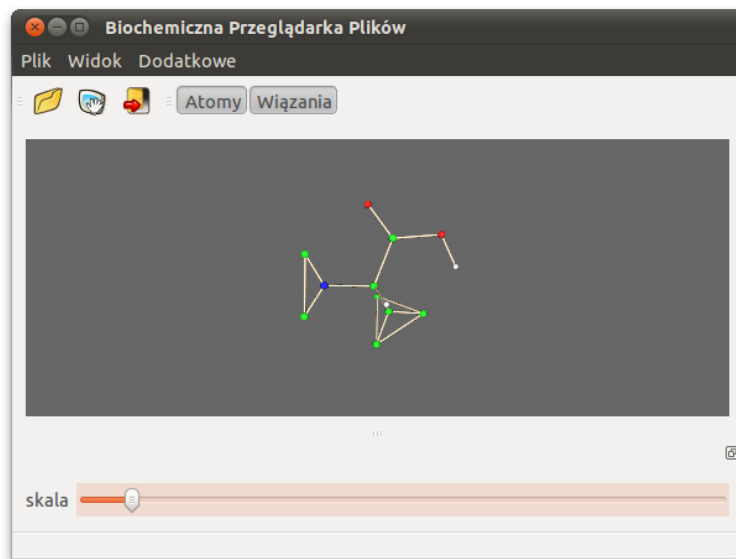


Rys. 3. Domyślnie wciśnięte przyciski *Atomy* i *Wiązania*

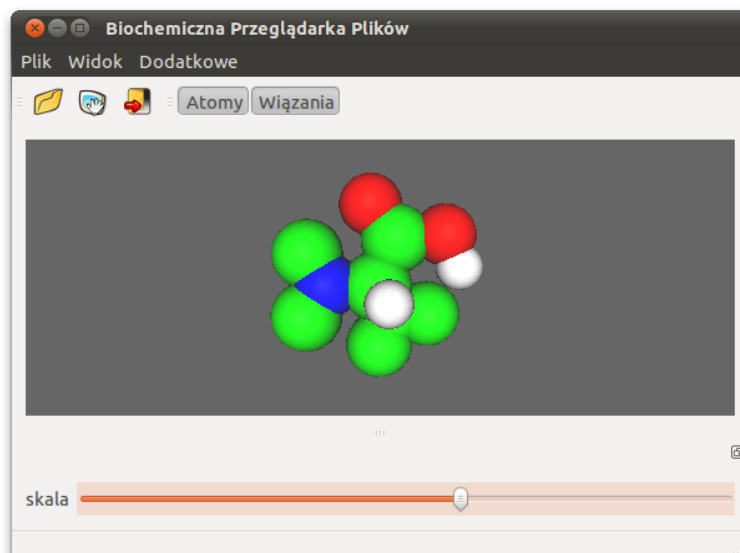


Rys. 4. Widok przestrzenny wiązań w cząsteczce, wciśnięty przycisk *Atomy*, wciśnięty *Wiązania*


Przeglądarka umożliwia także zmianę wielkości elementów cząsteczki (skalowanie), które polega na „chudnięciu”/„puchnięciu” cząsteczki w miarę przesuwania suwaka w lewym/prawym kierunku, przy zachowaniu jej rozkładu w przestrzeni (Rys. 5 i 6). Operacje te można wykonywać zarówno przy widocznych wszystkich elementach cząsteczki (atomy + wiązania), bądź też tylko przy niektórych (np. samych widocznych wiązaniach).



Rys. 5. Skalowanie cząsteczki – efekt „chudnięcia”



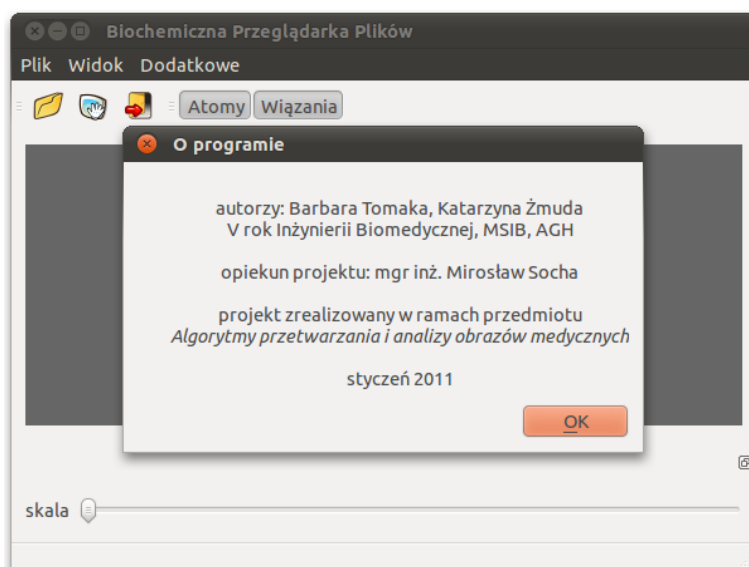
Rys. 6. Skalowanie cząsteczki – efekt „puchnięcia”

Dodatkowo program posiada opcję zapisu widoku cząsteczki do pliku graficznego z rozszerzeniem .jpg o tej samej nazwie, co plik źródłowy cząsteczki (Rys. 7). Aby tego dokonać, należy w pasku menu wybrać *Zapisz jako JPG*. Obraz można również zapisać używając kombinacji klawiszy *Ctrl + J*, bądź w pasku narzędzi kliknąć ikonę .




Rys. 7. Zapisany na dysku plik z obrazem cząsteczki

Wybierając w pasku menu *Dodatkowe* → *O programie* użytkownik ma możliwość zapoznania się z informacjami na temat autorów i okoliczności powstania programu (Rys. 8).



Rys. 7. Okno *O programie*

Aby zakończyć działanie programu, należy w pasku menu wybrać *Wyjście*, w pasku narzędzi kliknąć ikonę , bądź użyć skrótu *Ctrl+Q*.

6. Możliwe dalsze etapy rozwoju

W dalszej pracy należałoby przede wszystkim umożliwić otwieranie plików z innymi rozszerzeniami (przyglądnąć się raz jeszcze klasie `vtkPDBReader`). Oprócz tego program można rozbudować dodając kolejne funkcjonalności (jak na przykład konwersja typów zapisu plików), a także zmodyfikować m.in. zapis obrazów do pliku o możliwość nadania nazwy pliku.

7. Załączniki do sprawozdania

Do sprawozdania dołączone zostają:

- pliki projektu – w folderze *QtVtkproject*, do otwarcia w Qt Creator,
- pliki zbudowane – w folderze *QtVtk-build-desktop*,
- pliki z danymi cząsteczek – folder *Dane*.