

# Client-Server-Strategien zur Visualisierung komplexer Struktureigenschaften in digitalen Dokumenten der Chemie

## Client-Server Strategies for Visualization of Complex Molecular Structure Properties in Digital Documents in Chemistry

Klaus Engel, Universität Stuttgart

Frank Oellien, Universität Erlangen-Nürnberg

Thomas Ertl, Universität Stuttgart

Wolf-Dietrich Ihlenfeldt, Universität Erlangen-Nürnberg

---

In der Chemie wird in steigendem Maße sowohl mit hochdimensionalen Daten (drei oder mehr Dimensionen) als auch mit extrem großen Datensätzen (Tausende bis Millionen von Meßpunkten und Einzeldaten) gearbeitet. Die Einbettung dreidimensionaler Visualisierungen dieser Daten in digitale Dokumente erfordert neue Strategien zur verteilten Verarbeitung und Darstellung. Der Einsatz von Client-Server-Methoden zur Minimierung der Netzbelastung bei maximaler Ausnutzung der Fähigkeiten der Clients und Server-Systeme zur interaktiven Manipulation der Daten und zur Visualisierungen ist dabei unabdingbar. Anhand einer Reihe von Client-Server-Strategien möchten wir leistungsfähige Verfahren zur interaktiven Bearbeitung von umfangreichen multidimensionalen Daten erläutern.

Today chemistry works increasingly with multi-dimensional (three or more dimensions) and extremely large amounts of data (thousands and millions of samples and data points). Embedding three-dimensional visualizations of such data into digital documents requires new strategies for distributed processing and rendering. The use of client-server-methods for minimizing network load and maximizing the utilization of client and server capabilities for interactive manipulation and visualization of data is required. On the basis of a number of client-server-application scenarios we show effective methods for the interactive processing of multi-dimensional data.

---

### 1 Einleitung

Die Chemie ist inhärent eine Wissenschaft, die das Verhalten von chemischen Strukturen nicht nur als zweidimensionale Schemata, sondern auch im dreidimensionalen Raum beschreibt. Neben den drei Raumdimensionen kommen dabei oft zusätzlich noch weitere Dimensionen wie Zeitachsen (Reaktionsabläufe) oder mit dreidimensionalen Raumpunkten oder Flächen verknüpfte Eigenschaften hinzu, die skalar (z.B. verschiedene molekulare Oberflächenpotentiale) oder vektoriell (z.B. Wasserstoffbrückenbindungen) sein können. Die grafische Re-

präsentation dieser Informationen stellt auch heute noch eine der größten Herausforderungen für die wissenschaftliche Visualisierung dar. Häufig ist eine Darstellung nur mit Hilfe spezieller Applikationen auf besonders leistungsfähigen Graphikservern möglich, so zum Beispiel Textur-basierte Ansätze, die in der Chemie in den letzten Jahren an Bedeutung gewonnen haben [1]. Darüber hinaus ist für die Einbettung solcher Darstellungen in digitale Dokumente der Einsatz intelligenter Client-Server Strategien, die eine Darstellung komplexer Struktureigenschaften auf Arbeitsplatzrechnern ermöglichen, unumgänglich. Allerdings beschränkten sich bis *dato* vor-

handene Client-Server Ansätze auf reine Datenbankverbindungen oder einfache molekulare Repräsentationen mittels JAVA-Applets oder VRML-Szenen [2, 3].

Dieser Artikel beschreibt die Entwicklung von portablen, sich an Internet-Standards orientierenden Techniken und verteilten Client-Server-Systemen, die die Darstellung dieser Daten auf leistungsfähigen Low-End-Einzelprozessor-Architekturen erlaubt. Im Abschnitt 2.1 werden zunächst Server-basierte Strategien erläutert, die vor allem bei sehr großen Datenmengen zum Einsatz kommen. Abschnitt 2.2 beschreibt Strategien, die eine Verteilung der benötigten Rechenleistung zwischen High-End-Graphikservern und heutigen Low-Budget-PCs erlauben. Schließlich werden im Abschnitt 2.3 Client-seitige Applikationen betrachtet, die das enorme Potential heutiger Graphikkarten nutzen und den Einsatz von High-End-Graphikservern überflüssig machen können.

## 2 Strategien

Der Prozeß der Visualisierung wissenschaftlicher Daten wird im allgemeinen als Pipeline (Bild 1) beschrieben, welche die Ausgangsdaten in mehreren Schritten ausdünn, segmentiert, konvertiert (filtering) und in einer Form abbildet (mapping), die schließlich möglichst schnell dargestellt werden kann (rendering). Dazu durchlaufen die Daten verschiedene Module der Visualisierungspipeline, die im Umfeld der verteilten Visualisierung auf unterschiedlicher Art und Weise zwischen Clients und Servern aufgeteilt werden können.

Die Wahl der Aufteilung dieser Aufgaben für Client und Server wird im folgenden als Client-Server-Strategie bezeichnet. Diese Wahl einer geeigneten Strategie hängt dabei von einer Reihe von Faktoren ab: Art und Größe der Daten, Bandbreite und Latenz des Netzwerks, graphische und numerische Fähigkeiten der vorhandenen Client- und Server-Rechner. Grundsätzlich können drei verschiedene Strategien unterschieden werden, die in den nun folgenden Sektionen erläutert werden.

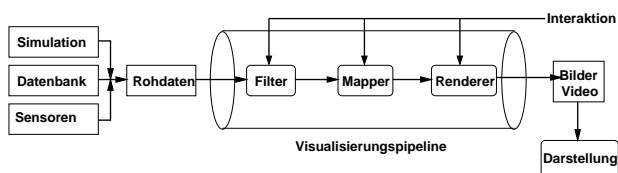


Bild 1: Visualisierungspipeline

### 2.1 Server-seitige Strategien

Server-seitige Ansätze (Bild 2) verlagern die Module der Visualisierungspipeline auf einen oder mehrere Hochleistungsrechner, welche die zur Visualisierung notwen-

digen Berechnungen unter Ausnutzung leistungsfähiger Spezialhardware durchführen. Die von den Servern berechneten Bilder werden zu Arbeitsplatzrechnern übertragen, die als einfache Anzeigeräte fungieren. Durch Rückübertragung der Benutzeroberflächen-Ereignisse (i.a. Maus- und Tastatureingaben) der Clients kann die Visualisierung beeinflusst werden.

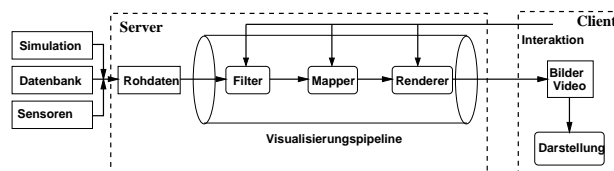


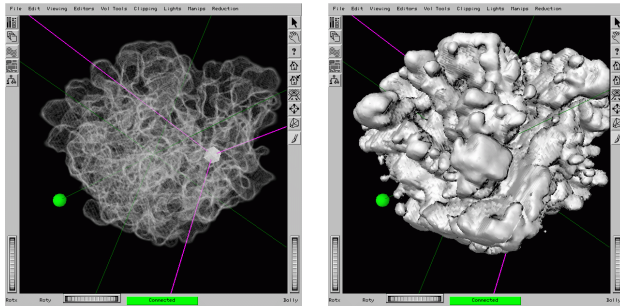
Bild 2: Server-seitige Strategie

Server-seitige Strategien werden vor allem dann eingesetzt, wenn der Client nicht die zur Visualisierung der Daten notwendige Hardware besitzt, ein Transfer der Visualisierungsdaten wegen ihrer Größe unmöglich ist oder der Transfer der Daten zum Beispiel aus Datenschutzgründen unerwünscht ist.

Um die Entwicklung von Applikationen zu unterstützen, die auf solchen Strategien basieren, wurde ein Framework zur entfernten 3D Visualisierung entwickelt [4]. Dieses ermöglicht bestehende Visualisierungsapplikationen basierend auf den Szenegraphenarchitekturen OpenInventor oder Cosmo3D in Visualisierungsserver-Applikationen zu konvertieren. Dazu werden in den jeweiligen Szenegraphen neue Knoten eingefügt, die die Komprimierung und Übertragung der auf dem Server generierten Darstellungen zu den verbundenen Clients ermöglichen.

Diese Daten werden von JAVA-basierten Clients entgegengenommen, dekomprimiert und dargestellt. Ereignisse der Benutzeroberfläche werden über CORBA (Common Object Request Broker Architecture) Aufrufe zurück zum Visualisierungsserver geleitet und dort wie lokale Ereignisse behandelt. Diese Architektur des Frameworks erlaubt es, von beliebigen Endnutzer-Geräten auf die numerischen und graphischen Fähigkeiten von Hochleistungsgraphikrechnern zuzugreifen. Dazu muß der Client lediglich über 2D Darstellungsmöglichkeiten verfügen.

Dieses Framework kommt unter anderem bei elektronenmikroskopischen Datensätzen zum Einsatz. Die Elektronenmikroskopie (EM) hat sich in den letzten Jahren zu einem wichtigen Hilfsmittel in der strukturellen Biologie entwickelt [5, 6]. Neueste Fortschritte der Cryo-EM-Technik ermöglichen Auflösungen, welche bereits die Bestimmung von molekularen Sekundärstrukturelementen und atomaren Strukturen zulassen. Die Anzahl der Dreiecke in der Elektronendichte-Isofläche überschreiten derzeit schon 300.000. Bei höheren Auflösungen werden diese mindestens noch um



(a) Semitransparente Darstellung mittels 3D Texturen.

(b) Isoflächendarstellung unter Ausnutzung von 3D Texturen und Rasterisierungshardware

Bild 3: Entfernte Textur-basierte Visualisierung des Cryo-Elektronenmikroskopischen Volumen des Ribosoms von *Escherichia coli* (18Å Auflösung) in einem JAVA-basierten Client

den Faktor zehn anwachsen und deshalb die Kapazitäten typischer Endnutzer-PCs deutlich überschreiten. Darüber hinaus besitzen die zugrunde liegenden hochaufgelösten Volumendatensätze ein hohes Potential für die molekularbiologische und medizinische Forschung, so daß ein Transfer der Volumendaten auch aus Geheimhaltungsgründen nicht in Frage kommt.

Ein effizienter Algorithmus zur Darstellung beleuchteter Isoflächen unter Ausnutzung von Rasterisierungshardware wurde von Westermann und Ertl [7] entwickelt. Bei diesem Ansatz ist es möglich, ohne Extraktion einer polygonalen Repräsentation, Isoflächen direkt im Framebuffer mittels 3D Texturen zu berechnen. Die dazu nötige leistungsfähige Rasterisierungshardware ist zur Zeit noch nicht allgemein auf Arbeitsplatzrechnern verfügbar. Durch das oben beschriebene Framework kann allerdings von jedem beliebigen Arbeitsplatzrechner auf den Framebuffer-Inhalt einer Hochleistungsgraphikworkstation zugegriffen werden. Durch eine Reduktion der Bildauflösung während der Interaktion mit den Daten kann selbst bei Netzverbindungen mit schmaler Bandbreite eine interaktive Darstellung hochaufgelöster Elektronendichtevolumen erreicht werden.

## 2.2 Hybride Strategien

Das Ziel hybrider Ansätze (Bild 4) ist eine möglichst günstige Verteilung der Visualisierungsaufgaben. Durch diese Aufteilung der Aufgaben auf Client- und Server-Rechner sollen sowohl Server- als auch Client-seitige Rechen- und Speicherkapazitäten ausgenutzt werden, wobei auch eine Netzwerklastminimierung angestrebt wird.

Für die oben beschriebenen Elektronenmikroskopie-Datensätze kann auch eine hybride Strategie zum Einsatz kommen. Dazu werden auf der Server-Seite mittels

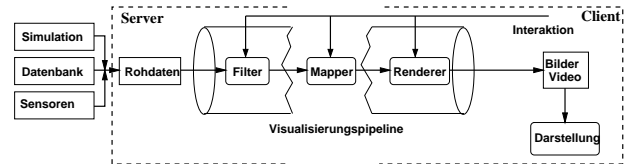


Bild 4: Hybride Strategie

eines optimierten Marching-Cubes Algorithmus [8] geometrische Primitive aus den Volumendaten extrahiert und zu Clients übertragen, die mit lokaler 3D Hardware die Darstellung übernehmen. Die Filter- und Mapper-Module der Visualisierungspipeline verbleiben also auf dem Server, während das Render-Modul auf den Client verlagert wird. Vorteile dieser Strategie sind, daß die i.a. sehr großen Volumendaten auf dem Server verbleiben können und sowohl numerische Kapazitäten des Servers als auch die 3D Hardware des Clients genutzt werden können. Durch die Darstellung der transferierten Dreiecksgitter mittels lokaler 3D Graphikhardware sind hohe Interaktionsraten möglich, da zur Exploration der Netze kein weiterer Datentransfer notwendig ist.

Allerdings erfordert dies Techniken, die einerseits keine zu hohe Netzlast erzeugen und andererseits die Graphikhardware des Clients nicht überlasten. Es ist dazu notwendig, die enorme Anzahl der geometrischen Primitive, die bei solch einer Oberflächenrekonstruktion anfallen, zu begrenzen.

Die progressive Übertragung von Isoflächen [9] gibt dem Benutzer eine globale Level-of-Detail (LOD) Kontrolle in die Hand. Mittels eines Multi-Resolution-Ansatzes - basierend auf einer fehlergesteuerten Unterteilung des Volumens in Tetraeder und Oktaeder - werden hier Isoflächen mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad rekonstruiert (Bild 5). Der Benutzer legt zunächst die Detailstufe der Isofläche fest, welche dann auf Server-Seite erzeugt und zum Client transferiert wird. Dort kann die Fläche dann mittels 3D Graphikhardware untersucht werden. Nachteil dieses Verfahrens ist allerdings, daß die Fläche immer als Ganzes verfeinert wird.

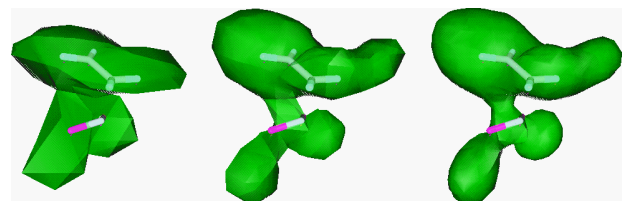


Bild 5: Progressive Darstellung einer Elektronendichte-Isofläche.

Sucht ein Benutzer statt nach einer globalen Form der Isofläche nach bestimmten Details, eignet sich eine Fokus-basierte Isoflächenübertragung [10] besser. Der Benutzer am Client kann hier einen Fokus des Interesses im Volumendatensatz auf dem Server plazie-

ren. Um diesen Fokus wird nun mittels eines Octree-Ansatzes eine Isofläche mit hoher Auflösung erzeugt, deren Detaillierungsgrad mit steigendem Abstand abnimmt (Bild 6). Die so erzeugten geometrischen Primitive werden zum Client transferiert und dort von einem JAVA-Applet entgegengenommen. Dieses nutzt ein VRML-Plugin (Virtual Reality Modeling Language) für die evtl. Hardware-beschleunigte Darstellung. Der Fokuspunkt kann vom Benutzer frei auf der Isofläche oder im Raum plziert werden. Der Radius der höchsten Auflösung läßt sich im Benutzerinterface des JAVA-Clients manipulieren und wird in der lokalen Darstellung durch eine transparente Kugel visualisiert. Diese Vorgehensweise ähnelt einer Suchemit einer Lupe, wobei hier lokal keine Vergrößerung sondern eine Verfeinerung erzeugt wird. In [10] wurde zudem gezeigt, wie eine exaktere Unterteilung der Marching-Cubes Algorithmen in Module einer Pipeline es erlaubt, diesen auf vielerlei Arten auf Clients und Server zu verteilen, um eine Lastverteilung und Datenreduktion zu erreichen.

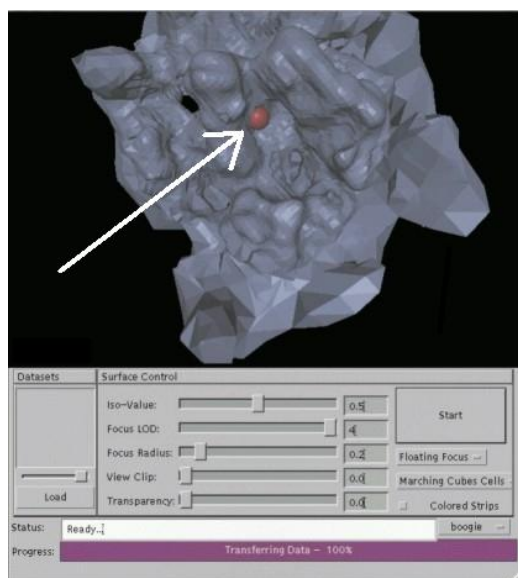


Bild 6: OpenGL Applikation mit 'level-of-detail' Isosurface Rekonstruktions-Technik; Die Auflösung der Region um den Focuspunkt (Kugel) wird automatisch erhöht; Cryo-Elektronenmikroskopisches Volumen des Ribosoms von *Escherichia coli* bei einer Auflösung von 13Å.

### 2.3 Client-seitige Strategien

Durch die enorm gestiegenen Rechen-, Speicher- und Graphikkapazitäten heutiger Arbeitsplatzrechner sind in den letzten Jahren Client-seitige Ansätze (Bild 7) stark in den Vordergrund getreten. Dazu werden die zu visualisierenden Daten vollständig auf den Client übertragen, wo dann alle Module der Visualisierungspipeline ausgeführt werden. Da während der Interaktion keine weitere Datenübertragung notwendig ist, können bei entsprechender Leistungsfähigkeit des Clients hohe

Interaktionsraten erzielt werden. Für den Web-Service *OrbVis* (Bild 8) wurde solch ein Ansatz gewählt, da die Zahl der Dreiecke bei Orbitalvisualisierungen generell in einer Größenordnung bleibt, bei der jeder Standard-PC die volle Szene in ihrer maximalen Auflösung bewältigen kann. Außerdem ist der Transfer der Volumendaten, die zur Erzeugung der Orbitaloberflächen benötigt werden, hierbei nicht notwendig, da ein vom Server zum Client übertragener Algorithmus das Volumen lokal rekonstruiert.

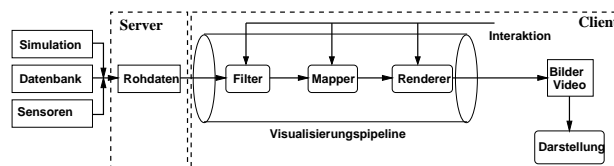


Bild 7: Client-seitige Strategie

*OrbVis* ist ein On-Line-Service zur Berechnung und Visualisierung von Molekülorbitalen (MOs) [11]. MOs beschreiben die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Elektronen im Raum und sind unter anderem wichtig zum Verständnis von Reaktionen. *OrbVis* ist in der Lage, MOs von Molekülen, die in Form von Konnektivitätslisten an den Server geschickt werden, zu berechnen und zu visualisieren. Die Berechnung der 3D Koordinaten und der Orbitalvektoren wird von kommerziell verfügbaren Programmen zur chemischen Informationverarbeitung auf dem Server bewerkstelligt. Das Ergebnis der Berechnungen wird in stark komprimierter Form als Funktionsparameter an den Client übermittelt. Der Client startet daraufhin ein JAVA-Applet, welches Funktionen zur Berechnung des Elektronendichtevolumens aus den Funktionsparametern enthält. Aus diesem berechneten Volumen wird nun eine Isofläche der Elektronendichte zu einem gegebenen Isowert generiert und mittels eines VRML-Plugins (Virtual Reality Modeling Language) dargestellt. Der Vorteil dieser Methode ist, daß anstatt großer Volumendatensätze nur eine HTML-Seite mit Funktionsparametern Volumendatensätze an den Client gesandt werden muß. Diese Vorgehensweise erlaubt eine interaktive Analyse der Strukturen und der Volumendaten bei gleichzeitiger Balancierung von Rendering-Qualität und Echtzeit-Performance [11]. Desweiteren wurde eine Prototyp-Applikation zur Animation von Volumendaten, wie z.B. Molekülorbitalen, während einer chemischen Reaktion entwickelt.

Wegen der fehlenden Möglichkeiten der schnellen trilinearen Interpolation, die zur Erzeugung qualitativ hochwertiger Visualisierungen von Volumendaten notwendig ist, war eine interaktive direkte Volumenvisualisierung bisher auf Hochleistungsgraphikrechner und Spezialhardware beschränkt. Moderne Low-Cost Graphikkarten, die vor allem für Spiele- und Multimediaanwendungen konzipiert wurden, verfügen aber

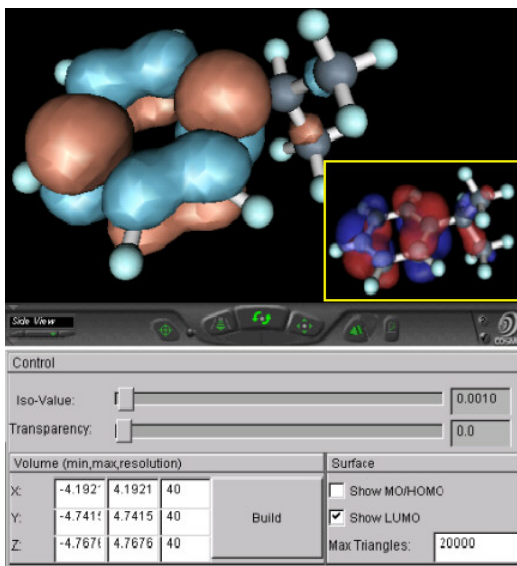
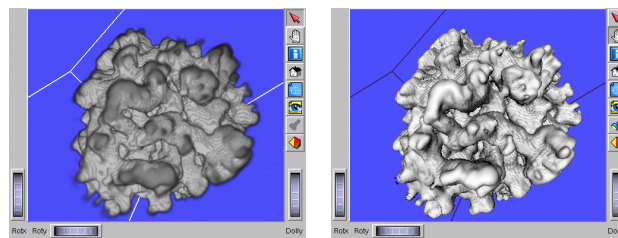


Bild 8: Web-Service *OrbVis*; JAVA-Applet und VRML-Plugin; Molekülorbitale von Isopropylbenzol

zunehmend über leistungsfähige mehrstufige Textur-Rasterisierungseinheiten, die eine Vielzahl von Optimierungen der direkten Volumenvisualisierung zulassen. Da diese Karten aber im allgemeinen noch nicht über 3D Texturen verfügen, können hier auch 2D Texturen zum Einsatz kommen, die heute auf jeder dieser Karten vorhanden sind. Auf Basis des in Abschnitt 2.1 beschriebenen Verfahrens zur interaktiven Visualisierung von beleuchteten Isoflächen wurde ein optimiertes Verfahren mit Hilfe von Mehrstufenrasterisierung auf Standard-PC-Graphikhardware entwickelt [12]. Das ursprüngliche Zwei-Schritt-Verfahren kann mittels Mehrstufenrasterisierung in nur einem Rendering-Durchgang durchgeführt werden. Die Beleuchtungsberechnung wird dabei direkt von der Rasterisierungshardware realisiert. Die Bildwiederholungsraten liegen durch dieses Ein-Schritt-Verfahren teilweise deutlich über dem von Hochleistungsworkstations erzielten Raten.

Mit Hilfe dieser Techniken kann nun ein Client-seitiger Ansatz zur Visualisierung hochauflöster Datensätze in digitalen Dokumenten konzipiert werden. Dazu wird der Server nur mehr für Anfragen in die Datenbank der gespeicherten Volumendatensätze benötigt. Ein solcher Datensatz wird dann komprimiert zu dem jeweiligen Arbeitsplatzrechner übertragen. Dort wird die lokal vorhandene leistungsfähige Rasterisierungshardware verwendet, um interaktive Bildwiederholraten zu erreichen (Bild 9(b)). Dies wird durch die Ausnutzung der Mehrstufenrasterisierung für trilineare Interpolation und Beleuchtungsberechnung erreicht. Vorteil dabei ist natürlich auch, daß keine Latenzverzögerung durch das Netzwerk während der Darstellung auftritt, da nach der anfänglichen Datenübertragung kein weiterer Netztransfer notwendig ist.



(a) Semitransparente Darstellung des Volumens mit 2D Texturen

(b) Darstellung einer Isofläche mit Hilfe von Rasterisierungshardware

Bild 9: Client-seitige, Textur-basierte Visualisierung des Cryo-Elektronenmikroskopisches Volumen des Ribosoms von *Escherichia coli* in 18Å Auflösung

### 3 Resultate

Komplexe chemische Zusammenhänge können durch die Einbettung drei-dimensionaler Darstellungen in digitale Dokumente besser verstanden werden. Eine interaktive Darstellung ist aber durch die teilweise enorme Menge an Daten, die hierzu übertragen und dargestellt werden müssen, nicht ohne intelligente Strategien zur Verteilung der Lasten auf Clients und Server möglich. Die Wahl der geeigneten Strategie hängt dabei von einer Vielzahl von Parametern ab.

Server-seitige Ansätze kommen vor allem dann zum Einsatz, wenn auf Client-Seite nicht die für interaktive Visualisierung notwendige Hardware verfügbar ist, die Spezialhardware eines Hochleistungsrechners genutzt werden soll oder der Transfer der Originaldaten aus Bandbreiten- oder Sicherheitsgründen nicht möglich ist. Die interaktive Visualisierung bestimmter, komplexer chemischer Daten, wie hochauflöster Multi-Proteinkomplexe, ist mittels dieses Ansatzes nun auch auf Low-Budget-Arbeitsplatzrechnern möglich.

Mit Hilfe hybrider Strategien kann sowohl Servers als auch Client-seitig vorhandene Hardware zur Optimierung der Interaktivität bei gleichzeitiger Minimierung der Netzlast genutzt werden. Die progressive Übertragung von Isoflächen erlaubt die globale Darstellung von großen komplexen Strukturen, wie sie zum Beispiel bei Viren- oder Zelloberflächen vorkommen. Fokusbasierte Verfahren erlauben hingegen die detaillierte Untersuchung lokaler Strukturelemente wie zum Beispiel aktiver Zentren oder pharmazeutisch relevanter Bindungsstellen in Proteinen. Der Einsatz Server-seitiger und hybrider Strategien ist im Umfeld der Chemie neuartig.

Der Hauptvorteil Client-seitiger Strategien ist, daß nach dem Transfer der Daten keine weitere Datenübertragung notwendig ist, wodurch Verzögerungen durch Netzwerklast und Netzwerklatenz wegfallen - die Interaktion mit den Daten erfolgt also rein lokal. Diese Ansätze sind in den letzten Jahren für eine Reihe von chemischen Appli-

kationen zum Einsatz gekommen. Die Ausnutzung von gängiger Low-Budget Rasterisierungshardware für die Darstellung von Oberflächen, wie sie in Abschnitt 2.3 beschrieben wurde, ist allerdings vollkommen neu und ermöglicht neue Wege der molekularen Visualisierung.

## 4 Ausblick

Der Zugriff auf digitale Dokumente der Chemie ist heute über eine Vielzahl unterschiedlicher Rechnerplattformen und Netzwerkinfrastrukturen möglich. Um jeder dieser möglichen Zugriffskonfigurationen eine optimale Interaktion mit den eingebetteten Daten zu ermöglichen, ist eine adaptive Anpassung der Client-Server-Strategie an die jeweils gegebenen Verhältnisse denkbar. So würden entweder einmal zu Beginn oder ständig während der Sitzung die Kapazität auf Client- und Server-Seite sowie die Bandbreite und Latenz des verbindenden Netzwerks überprüft werden, um daraus die jeweilige optimale Client-Server Strategie zu ermitteln.

So können beispielsweise zu Beginn einer Sitzung die Graphikfähigkeiten eines Client-Rechners ermittelt werden und bei Vorhandensein der entsprechenden Hardware eine Client-seitige Strategie gewählt werden. Andernfalls wird je nach Auslastung des Servers eine Server-seitige oder hybride Strategie gewählt. Die Wahl der Strategie kann natürlich auch ständig adaptiert werden. Sind zu Beginn einer Sitzung genügend Server-Kapazitäten vorhanden, so könnte zunächst eine Server-seitige Strategie zur Anwendung kommen. Steigt dann während der Sitzung die Last des Servers (und damit die Antwortzeiten), so könnte dynamisch eine andere Strategie gewählt werden.

### Danksagung

Diese Arbeit wird von der DFG im Rahmen des Schwerpunktprogramms V3D2 (Verteilte Vermittlung und Verarbeitung Digitaler Dokumente) unterstützt.

Wir danken Johann Gasteiger und Tim Clark von der Universität Erlangen-Nürnberg für die Erlaubnis zur Benutzung der Programme CORINA und VAMP.

Für die Bereitstellung der elektronenmikroskopischen Datensätze danken wir Holger Stark von der Universität Marburg.

### Literatur

- [1] M.Teschner, C.Henn, H.Vollhardt, S.Reiling, J.Brickmann, "Texture mapping: A new tool for molecular graphics", *Journal of Molecular Graphics*, Vol. 12, S.98-105, 1994.
- [2] A.P.Tonge, H.S.Rzepa, H.Yoshida, "Authentication of Internet-Based Distributed Computing Resources in Chemistry", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, Vol.39, S.483-490, 1999.
- [3] G.Moeckel, M.Keil, T.Exner, J.Brickmann, "Molecular Modeling Information Transfer with VRML: From small Molecules to large Systems in Bioscience." *Pacific Symposium on Biocomputing*, 1998.

- [4] K.Engel, O.Sommer, T.Ertl, "A Framework for Interactive Hardware-Accelerated Remote 3D-Visualization", *Data Visualization 2000, Springer Computer Science*.
- [5] R.M.Glaeser, "Review: Electron Crystallography: Present Excitement, a Nod to the Past, Anticipating the Future", *Journal of Structural Biology*, Vol. 128, S.3-14, 1999.
- [6] F.Mueller, H.Stark, M.van Heel, J.Rinke-Appel, R.Brimacombe, "A New Model for the Three-dimensional Folding of Escherichia coli 16 S Ribosomal RNA", *Journal of Molecular Biology*, Vol. 271, S.566-587, 1997.
- [7] R.Westermann, T.Ertl, "Efficiently using Graphics Hardware in Volume Rendering Applications", *Proc. of SIGGRAPH 1998*.
- [8] Lorensen, W.E. and Cline, H.E., "Marching Cubes: A High Resolution 3D Surface Construction Algorithm", *Computer Graphics (SIGGRAPH '87)*.
- [9] K.Engel, R.Grosso, T.Ertl, "Progressive Isosurfaces on the Web", *Proc. IEEE Visualization - Late Breaking Hot Topics*, 1998.
- [10] K.Engel, R.Westermann, T.Ertl, "Isosurface Extraction Techniques for Web-based Volume Visualization", *Proc. Visualization*, 1999.
- [11] F.Oellien, W.D. Ihlenfeldt, K.Engel, T.Ertl, "Chemische Visualisierung und Datenintegration im Internet", *Neue Medien in Forschung und Lehre, Ein Workshop im Rahmen der 29. Jahrestagung der Gesellschaft für Informatik (Informatik 99)*.
- [12] C.Resk-Salama, K.Engel, M.Bauer, G.Greiner, T.Ertl, "Interactive Volume Rendering on Standard PC Graphics Hardware Using Multi-Textures and Multi-Stage-Rasterization", *Proc. Eurographics/SIGGRAPH Workshop on Graphics Hardware*, 2000.

---

**Dipl.Inf (Univ.) Klaus Engel** ist Mitarbeiter in der Abteilung Visualisierung und Interaktive Systeme des Instituts für Informatik an der Universität Stuttgart. Er arbeitet dort im Rahmen des Teilprojekts **ChemVis** des Schwerpunktprogramms V3D2 (Verteilte Verarbeitung und Vermittlung digitaler Dokumente) der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG).

Adresse: Universität Stuttgart, VIS, Breitwiesenstraße 20-22, 70565 Stuttgart, Telefon: (0711) 7816 332/331 Fax: (0711) 7816 340, E-Mail: engel@informatik.uni-stuttgart.de

**Dipl.Chem.(Univ.) Frank Oellien** ist Mitarbeiter in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Johann Gasteiger am Computer-Chemie-Centrum der Universität Erlangen-Nürnberg. Er arbeitet dort im Rahmen des Teilprojekts **ChemVis** des Schwerpunktprogramms V3D2 (Verteilte Verarbeitung und Vermittlung digitaler Dokumente) der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG).

Adresse: Universität Erlangen-Nürnberg, Institut für Organische Chemie, Computer-Chemie-Centrum, Nägelsbachstr.25, 91052 Erlangen, Telefon: (09131) 85-26579 Fax: (09131) 85-26566, E-Mail: Frank.Oellien@chemie.uni-erlangen.de

**Prof. Dr. Thomas Ertl** ist Leiter der Abteilung Visualisierung und Interaktive Systeme des Instituts für Informatik an der Universität Stuttgart.

Adresse: Universität Stuttgart, VIS, Breitwiesenstraße 20-22, 70565 Stuttgart, Telefon: (0711) 7816 332/331 Fax: (0711) 7816 340, E-Mail: ertl@informatik.uni-stuttgart.de

**Dr. Wolf-Dietrich Ihlenfeldt** ist Habilitant in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Johann Gasteiger am Computer-Chemie-Centrum der Universität Erlangen-Nürnberg.

Adresse: Universität Erlangen-Nürnberg, Institut für Organische Chemie, Computer-Chemie-Centrum, Nägelsbachstr.25, 91052 Erlangen, Telefon: (09131) 85-26579 Fax: (09131) 85-26566, E-Mail: wdi@chemie.uni-erlangen.de