

---

# 6

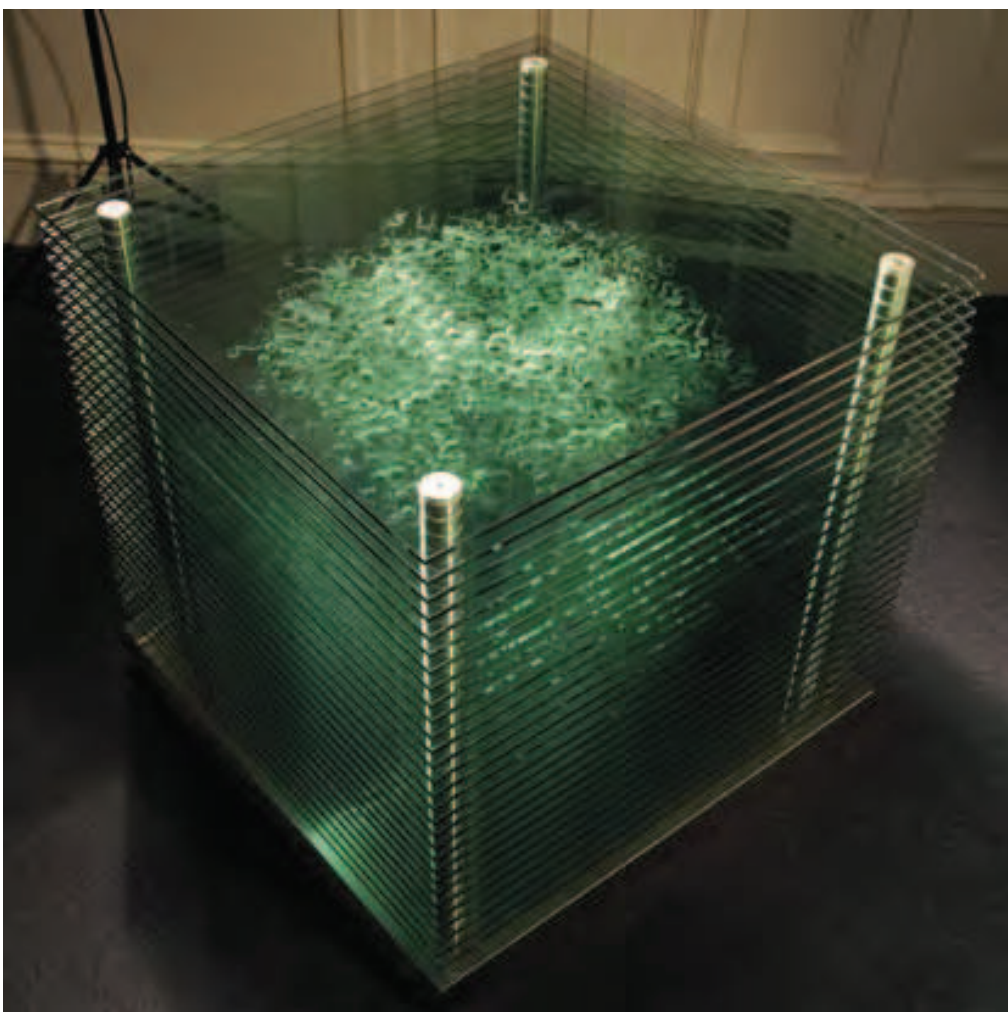
## VISUELLE LØSNINGER FOR BIOVIDEN- SKABERNE – NU OG I FREMTIDEN

---

**Af**  
**RIKKE SCHMIDT KJÆRGAARD**  
POSTDOC, PH.D.,  
INTERDISCIPLINARY  
NANOSCIENCE CENTER,  
AARHUS UNIVERSITET

Vi kan i dag ikke lave moderne naturvidenskabelig og medicinsk top-forskning uden at visualisere vores data. Visualisering er afgørende i næsten enhver produktion, fortolkning og offentliggørelse af videnskabelige resultater.

Med en øget interdisciplinær forskning og dermed en bredere vifte af discipliner, er der brug for langt mere komplekse systemer inden for datavisualisering. Optimering af integrerede visuelle systemer kræver undersøgelser på tværs af fag, teknologier, metoder og behov.



*Visualisering er også en integreret del af forskningsprocessen inden for de fleste videnskaber, og afgørende i næsten enhver produktion, forståelse, fortolkning, udvikling og offentliggørelse af videnskabelige data inden for biovidenskaberne.*



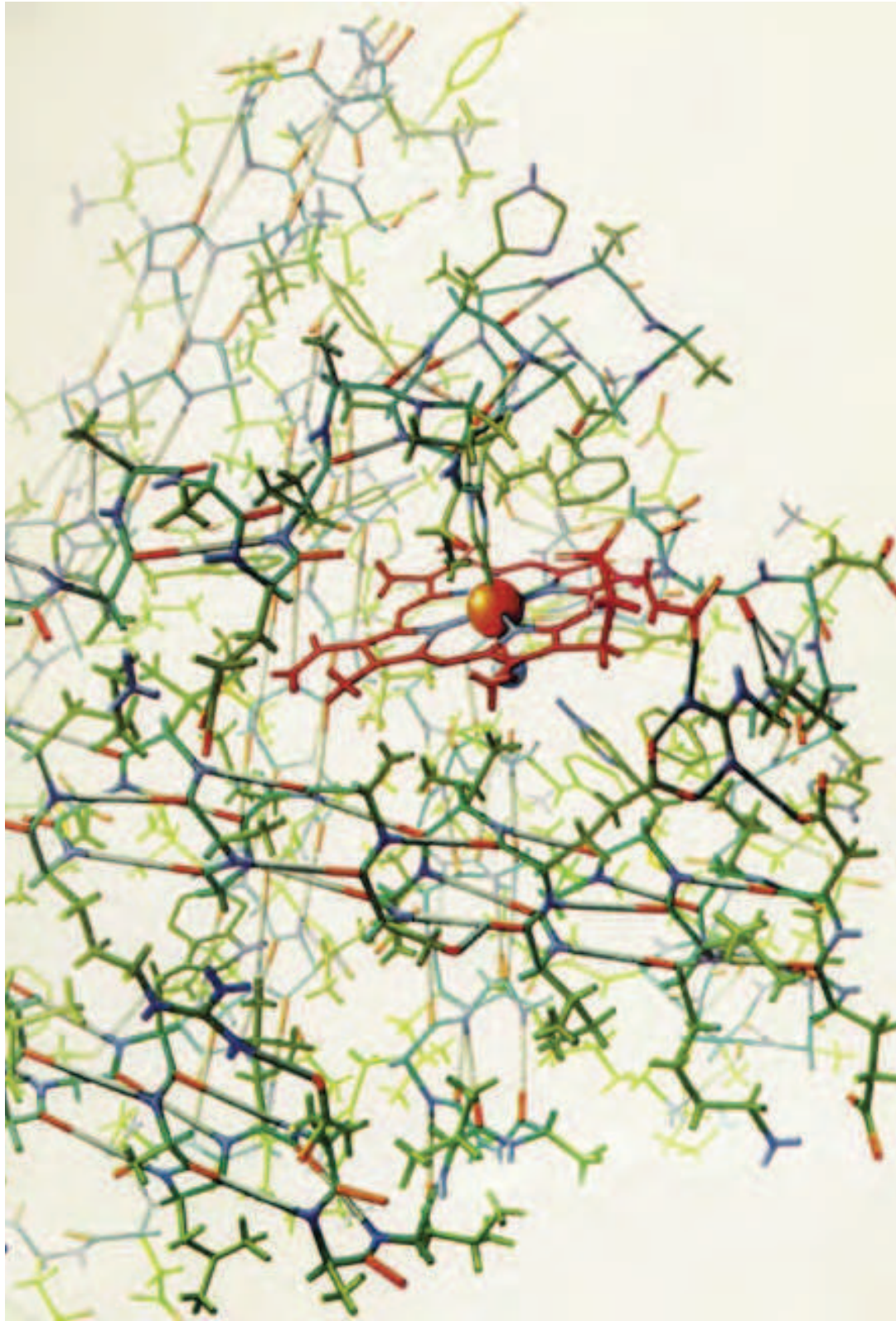
Colin Rennie's glassskulptur af ATP-syntase.

Vores hverdag er fuld af visuelle indtryk. Uden at vi tænker over det, behandler vores hjerne hele tiden billeder, analyserer komplekse strukturer og oversætter visuel information til forståelse. Det er vanskeligt - næsten umuligt - at forestille sig en verden uden billeder. Visualisering er også en integreret del af forskningsprocessen inden for de fleste videnskaber, og afgørende i næsten enhver produktion, forståelse, fortolkning, udvikling og offentliggørelse af videnskabelige data inden for biovidenskaberne. De første illustrationer af, for eksempel, en celledre præsenterede en simpel og velordnet mikrowerden. Udviklingen af laboratorieteknologier og visualiseringsteknikker gennem det sidste halve århundrede har i takt med en radikal forøgelse af datamængden muliggjort, at vi nu kan illustrere denne verden på et langt højere kompleksitetsniveau.

På Medical Research Council's Mitochondrial Biology Unit i Cambridge i England, og på Systems Biology på Harvard Medical School har vi arbejdet med optimering af datavisualisering. Vi har gennem analyser af eksisterende visuelle redskaber og metoder inden for biovidenskaberne udforsket nye måder at optimere den visuelle proces på, både når vi ser på simpel grafik, fysiske modeller og 3D-animationer, samt på integrerede og interaktive real-time visuelle løsninger.

### Proteiner i glas og LEGO

I John Walkers laboratorium i Cambridge udforskede vi, sammen med kunstnere og designere, måder at visualisere ATP-syntase på - et molekyle, der i en roterende bevægelse producerer ATP (biologisk energi). Et af vores visuelle eksperimenter viste en 1x1x1 meter glasskulptur af molekylet lavet af den engelske glasskulptør Colin Rennie. I tæt dialog med John Walkers



laboratorium brugte Rennie blandt andet elektrontæthedskort til at bestemme atomernes position. Med en kraftig vandstråle som redskab skar Rennie den tredimensionale struktur gennem 30 lag af glas. Rennie skabte en illusion af volumen og bevægelse i et ellers statisk materiale, og ud fra krystallografiske data. Samarbejdsprocessen mellem to vidt forskellige discipliner (i dette tilfælde mellem molekylærbiologi og glaskunst) gav nye perspektiver på både videnskaben og kunsten, særligt fordi der tages udgangspunkt i, og hensyn til, konkrete videnskabelige data gennem den visuelle proces.

Der er mange udfordringer i udviklingen og optimeringen af det visuelle materiale og de visuelle teknikker og redskaber, vi bruger. Mulighederne er mangfoldige, og man kan let drukne i store datamængder, utilstrækkelig software, brugerflader, designprincipper og teknisk udstyr. I dag kan molekylærbiologer for eksempel hurtigt konstruere tredimensionelle atomare billeder af proteinstrukturer. Vi har i den grad vænnet os til at se de "svævende" tredimensionale molekylestrukturer, der præger forsiderne af videnskabelige tidsskrifter uge efter uge. Populære medier og aviser går heller ikke af vejen for at vise en farverig molekylestruktur, når videnskaben skal forklares. Langt de fleste af disse modeller er dog lavet ved brug af software, udarbejdet med mere eller mindre tilfældige standarder. I mange tilfælde er det langt fra en entydig og ukompliceret proces at vælge den rette vi-

suelle repræsentation til sine data – en proces, der ofte er styret og begrænset af videnskabelige og kulturelle konventioner, samt en subjektiv og utilstrækkelig erfaringshorisont.

I udforskningen af visualisering af ATP-syntase hentede vi inspiration i John Kendrews arbejde med den tredimensionale struktur af myoglobin fra 1950'erne. Udover en fantastisk akvarel af den atomare strukturmodel malet af den talentfulde videnskabelige illustrator, Irving Geis, havde Kendrew produceret adskillige fysiske modeller af molekylet. Der var blandt andet elektrontæthedskort lavet af gennemsigtigt papir (dette var også inspiration til Rennies glaskulptur), modeller af clips og tråd, og andre mere robuste skulpturer. I den ånd designede og byggede vi en 112 cm høj LEGO-struktur af ATP-syntase. Som Rennies glasmokule er denne model designet ud fra tværsnit af den videnskabelige atomare model og bygget i næsten perfekte proportioner. LEGO-modellen er ca. 50 millioner gange større end den atomare model. Hvor meget er det? Hvis vi for eksempel forstørret et frimærke 50 millioner gange vil det dække de Britiske Øer. Videnskabeligt fik vi meget ud af den proces. Formidlingsmæssigt endnu mere.

#### Chartjunk

At lave en illustration, et diagram, en tegning, en tredimensionel repræsentation, en animation, en video, eller en interaktiv real-time visualisering af data, kræ-

Modstående side:

Detalje af myoglobin af Irving Geis, for Scientific American i 1961. Illustrationen er fra The Irving Geis Collection © Howard Hughes Medical Institute

En 112 cm høj LEGO-struktur af ATP-syntase. Denne model er designet ud fra tværsnit af den videnskabelige atomare model og bygget i næsten perfekte proportioner. LEGO-modellen er ca. 50 millioner gange større end den atomare model. Her forklarer forskere fra MRC Mitochondrial Biology Unit i Cambridge om forskningen bag strukturen, samtidig med at børn bygger mindre LEGO-modeller af ATP-syntase ved Cambridge Science Festival 2011.



“

*I mange tilfælde er det langt fra en entydig og ukompliceret proces at vælge den rette visuelle repræsentation til sine data – en proces der ofte er styret og begrænset af videnskabelige og kulturelle konventioner, samt en subjektiv og utilstrækkelig erfaringshorisont.*

”

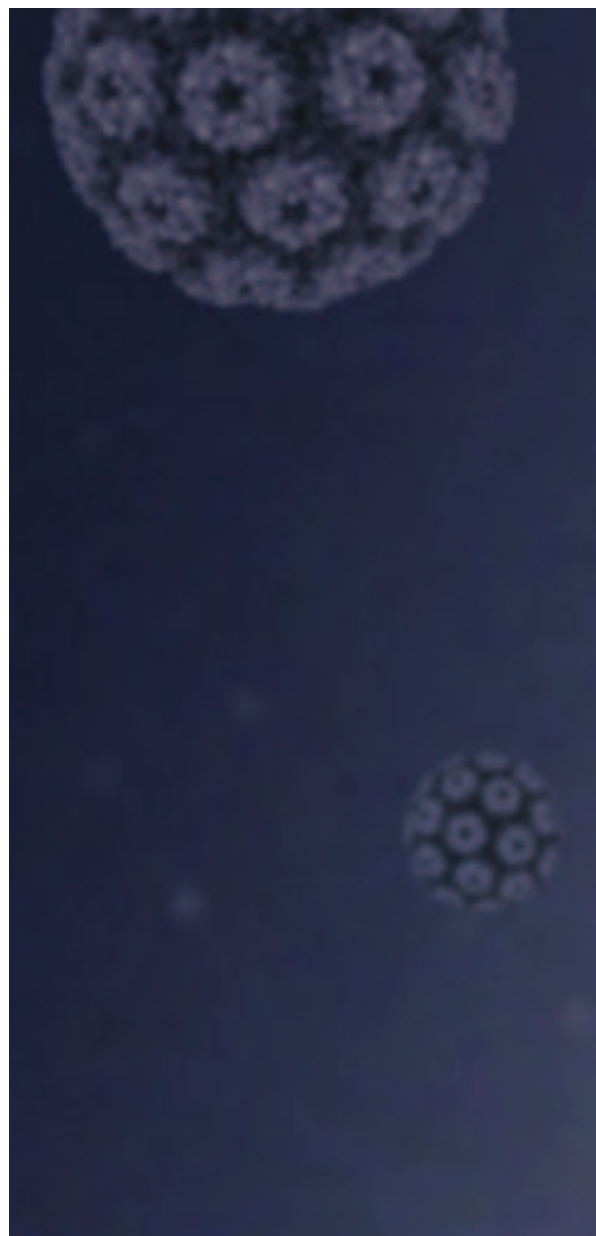
ver mange overvejelser i forhold til grafisk layout, hvilket referencesystem man skal bruge, i hvilken grad man skal inddrage rå data, hvilke elementer af grafisk design der skal inkluderes, og i hvor høj grad man skal kunne interagere med data. Som regel gør vi bare, som vi plejer. Vi tror nemlig, at alle disse overvejelser ikke spiller nogen afgørende rolle. Men det gør de. I videnskabelige publikationer myldrer det for eksempel med såkaldt "chartjunk". Diagrammer og grafer tynges med visuelle elementer, der ikke er nødvendige for kommunikationen af de specifikke resultater eller data. Ofte bliver deres eneste funktion at distrahere og fjerne opmærksomheden fra det væsentlige. I samarbejde med forskere på Massachusetts Institute of Technology (MIT) har vi udviklet visuelle retningslinjer for simple grafiske fremstillinger af data. Resultaterne bliver publiceret som en guide til visualisering inden for biovidenskaberne på Cold Spring Harbor Laboratory Press.

### Molekyler à la Hollywood

Ser vi bort fra de rent grafisk layoutmæssige udfordringer og vender blikket mod den teknologiske og metodemæssige proces af optimeringen af datavisualisering, står vi i den grad over for en række overvejelser og vanskeligheder. En af de største er spørgsmålet om, hvordan dynamiske aspekter af, for eksempel, proteiner repræsenteres, når resultaterne er baseret på statiske data. De metoder, vi kender fra animationsverdenen, er brugbare, men ikke optimale. Man kan vise enkelte bevægelser eller interaktioner, men langt fra den komplekse morfologi, der involverer afgørende elementer og processer for proteinet. Animationen opbygges af mange små delbevægelser, hvor vibrationer og fleksibilitet i proteinets bevægelse udelukkende baseres på kvalificerede approksimationer.

Et værktøj, der især er blevet populært inden for de seneste år, er et af underholdningsindustriens foretrukne animationsprogrammer, *Maya* - det software, der lige nu er mest brugt i Hollywood. Animatorer og biologer fra Harvard University har sammen udviklet *Molecular Maya*, der automatisk importerer strukturfiler fra Protein Data Bank (PDB), og dermed gør det væsentligt nemmere at opbygge molekyllære animationer i *Maya*. Dynamiske aspekter udføres dog stadig ved brug af kinematik uden nogen direkte viden om den molekyllære struktur, dets begrænsninger eller bevægelsens årsag. Det er afgørende, at animatorer indsamler så mange videnskabelige kilder som muligt, der kan fortælle om, og danne baggrund for, dynamiske repræsentationer, inden modellering og animation kan finde sted. Et af målene med samarbejdet med forskere ved blandt andet Harvard University er at finde mere direkte veje at integrere afgørende dynamiske data i en animeret molekyllær visualisering i *Molecular Maya*.

Simian Virus (SV40) lavet af Gaël McGill & Campbell Strong, Digizyme Inc. ved hjælp af Molecular Maya (mMaya).



“

*Diagrammer og grafer tynges med visuelle elementer, der ikke er nødvendige for kommunikationen af de specifikke resultater eller data. Ofte bliver deres eneste funktion at distrahere og fjerne opmærksomheden fra det væsentlige.*

”

