

Dokumentácia - NGL Viewer

NGL Viewer je JavaScriptová knižnica na vizualizáciu biologických molekúl, ako sú proteíny, DNA, RNA alebo malé molekuly, priamo v prehliadači.

Funkcionalita:

- *Vizualizácia molekúl:* Dokáže vyobraziť ľubovoľnú molekulu z PDB súboru v 3D prostredí.
- *Interaktivita:* Umožňuje otáčanie, priblíženie a interakciu s jednotlivými atómami alebo rezíduami.
- *Štýl vyobrazenia:* Knižnica umožňuje vykresliť molekuly v rôznych štýloch.

Prečo by som nepoužil NGL viewer v našom projekte ?

- NGL viewer síce poskytuje možnosť vykresliť molekuly v rôznych štýloch avšak pre náš štýl „cartoon“ nedokáže vyobraziť menej ako 3 rezídia.

V čom spočíva problém ?

Problém spočíva v spôsobe zobrazenia cartoon štýlu. Konkrétne v triede Interpolator v súbore ngl.dev.js, v metóde vectorSubdivide, kde pre počet rezíduí $n < 3$ táto metóda nebude fungovať, pretože chýbajú hodnoty potrebné na výpočet spline krivky. Spline interpolácia totiž vyžaduje minimálne 4 body, aby mohla vypočítať hladký prechod medzi bodmi (v tomto prípade rezíduami).

Pre 3 rezíduá nastáva špeciálny prípad, kde sa hodnota jedného rezídua duplikuje a vytvára sa tak dostatočný počet bodov na splnenie podmienok metódy. Tento prístup však nie je presný a môže viesť k nepresným výsledkom alebo vizuálnym chybám.

Požiadavky na použitie:

- Webový prehliadač: Musí podporovať JavaScript a WebGL.
- *Node.js a npm:* Potrebné na inštaláciu závislostí a buildovanie knižnice.

1. *Inštalácia Node.js:* Node.js je možné stiahnuť zo stránky: <https://nodejs.org/en>.

Po inštalácii si môžeme skontrolovať verziu pomocou príkazu v konzoli: `node -v`

Ako nainštalovať NGL Viewer ?

- Naklonujeme repozitár NGL viewer: `git clone https://github.com/nglviewer/ngl.git`
- Prejdeme do adresára projektu: `cd ngl`
- Nainštalujeme všetky potrebné balíčky: `npm install`
- Vytvoríme buildované súbory: `npm run build`
tie najdeme v priečinku `dist`, pričom budeme používať len `ngl.dev.js`
- Následne importujeme súbor `ngl.dev.js` z priečinka `dist` do nášho HTML súboru

Oficiálna dokumentácia:

- <https://github.com/nglviewer/ngl>