

Surface

Algebraische Oberflächenberechnung
und Anwendungen

Andreas Hoppe

Übersicht

1. Problem
2. Algorithmus
3. Orientierte Superposition

Problem

Hervorragende Überlagerung von
Teilen zweier Moleküle

Aber:

Unterschiedliche Orientierung im
Gesamtmolekül = relativ wertlos

Wie kann man sich im
Molekül orientieren?

Surface-Algorithmus

Berechnet wasserzugängliche
Atome eines Moleküls.

Surface-Algorithmus

1. Schritt: Umformulierung: Schrumpfen des Wassers und Aufblasen der Molekülatome

Surface-Algorithmus

2. Schritt: Ermittlung eines oberflächlichen Atoms

Einfach: das äußerste Atom einer vorgegebenen Richtung

Surface-Algorithmus

3. Schritt: Ermittlung aller Segmente (Kreissegmente der Kugelschnitte der Atome), die ebenfalls an der Oberfläche liegen

Realisierung: Algebraische Berechnung der Kreisschnitte + Maximalwertsuchen

Problem: Stabilität bei (Fast-)Singularitäten

Surface-Algorithmus

4. Schritt: Iteration unter Ausschluss aller schon durchsuchten Segmente.

Problem: Effiziente Datenstruktur, die Doppeltberechnungen vermeidet

Der Algorithmus leistet noch mehr!

Zu jedem oberflächlichen Atom haben wir die Segmente, die an der Oberfläche liegen.

Wir können eine Richtung konstruieren, in die es für dieses Atom „nach draußen“ geht.

Der Algorithmus leistet noch mehr!



Überlagerungsalgorithmus für orientierte Oberflächen

Zu jedem berücksichtigten Molekül werden die Richtungen der Oberflächenatome berechnet.

Neben der üblichen Überlagerung der Atome wird eine Übereinstimmung der Richtungen gefordert.