

ProtGen

М. Звагельский

руководители

Ю. Порозов, Г. Тамазян

О проекте в целом: ProtGen - набор программ для моделирования конформаций и движений белков.

Что сделано: на MATLAB написана программа, передвигающая один данный упорядоченный набор точек в пространстве так, чтобы он стал максимально близок к другому данному упорядоченному набору точек пространства.

## Входные данные.

1. Упорядоченное множество  $A$  из  $N$  точек  $a_1, \dots, a_N$  трехмерного пространства. задается  $3 * N$  матрицей, столбцы которой содержат координаты точек.
2. Второе упорядоченное множество  $B$ , задается аналогично.
3. Столбец  $m$  из  $N$  весов. Каждой паре точек  $a_i$  и  $b_i$  соответствует вес  $m_i$ .

Функция расстояния.

Расстояние  $d$  между  $A$  и  $B$  считается так:

$$d = \left( \sum m_i (a_i - b_i)^2 \right)^{1/2}$$

Вывод программы.

Ортогональная  $3 \times 3$  матрица  $R$ , задающая вращение пространства, и вектор  $t$ , задающий параллельный перенос, такие, что расстояние между множеством  $A' = R(A) + t$  и множеством  $B$  минимально.

Также выводится само минимальное расстояние.

Алгоритм.

Horn B. K. P., Closed-form solution of absolute orientation using unit quaternions, Journal of Optical Society of America A, Vol. 4, No. 4, April 1987.

Решаемая задача встречается в статистике, фотограмметрии и других областях.

Несомненно, что для ее решения написаны программы. В MATLAB запрограммирован алгоритм Kabsch (1976), решающий данную задачу в пространстве произвольной размерности. Алгоритм Horn работает именно в размерности 3.