

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 3×3 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.