

# Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung.....	1
2 Zielsetzung.....	2
3 Die Programmiersprache Java.....	3
4 Visualisierung chemischer Reaktionen.....	5
4.1 Modellierung chemischer Reaktionen.....	5
4.1.1 Berechnung und Verifikation der Übergangszustände.....	6
4.1.2 Berechnung der Reaktionspfade.....	8
4.2 Computergrafische Grundlagen – Isoflächen.....	9
4.3 Generierung der grafischen Rohdaten für das newChem–Projekt.....	10
4.3.1 Aufspaltung der IRC–Dateien.....	11
4.3.2 Selektion geeigneter Einzelstrukturen.....	12
4.3.3 Durchführung von Koordinatentransformationen.....	13
4.3.4 Berechnung und Aufbereitung der Isoflächen.....	14
4.3.5 Erstellung der Energiediagramme.....	17
4.4 Das Reaktionsvisualisierungssystem CAVOC.....	18
4.4.1 Grundlagen des Java 3D–API.....	20
4.4.2 Beschreibung des Java–Applets.....	23
4.4.2.1 Der Hauptbildschirm des Applets.....	25
4.4.2.2 Der Dialog zur Einstellung der Grafikoptionen.....	28
4.4.2.3 Der Dialog zum Umgang mit den Moleküloberflächen.....	31
4.4.2.4 Realisierung der Messungsfunktionalität.....	34
4.4.3 Beschreibung des Servers zur Berechnung der Isoflächen.....	35
4.4.4 Beschreibung des Hilfsservers.....	39
4.4.5 Hilfsprogramme.....	40
4.4.6 Anwendungsbeispiele.....	41
5 Implementierung und Anwendung eines QSAR–Programms.....	45
5.1 Grundlagen: Mathematische Modelle.....	45
5.1.1 k Nearest Neighbours.....	48
5.1.2 Partial Least Squares.....	48
5.2 Grundlagen: Optimierungsmethoden.....	50
5.2.1 Simulated Annealing.....	50
5.2.2 Genetische Algorithmen.....	53

5.2.2.1 Die Kodierung der Chromosomen.....	54
5.2.2.2 Die Fitneß- und Bewertungsfunktionen.....	54
5.2.2.3 Crossover-Verfahren.....	55
5.2.2.4 Mutationen.....	57
5.2.2.5 Heiratsschemata.....	57
5.2.2.6 Ersetzungsschemata.....	58
5.3 Design des QSAR-Programms.....	59
5.4 Die grafische Benutzeroberfläche für das QSAR-Programm.....	62
5.5 Anwendung auf einen Beispieldatensatz.....	67
6 Zusammenfassung und Ausblick.....	72
Anhang.....	76
A Dateiformat für die Ball&Stick-Darstellung in CAVOC.....	76
B Dateiformat eines fertig berechneten Satzes von Isoflächen in CAVOC.....	77
C OpenDX-Beispieldatensatz* zur Berechnung farblich kodierter Isoflächen.....	78
D Liste der in CAVOC abrufbaren Reaktionen.....	79