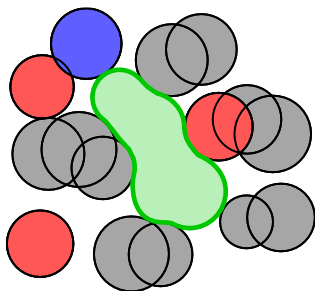


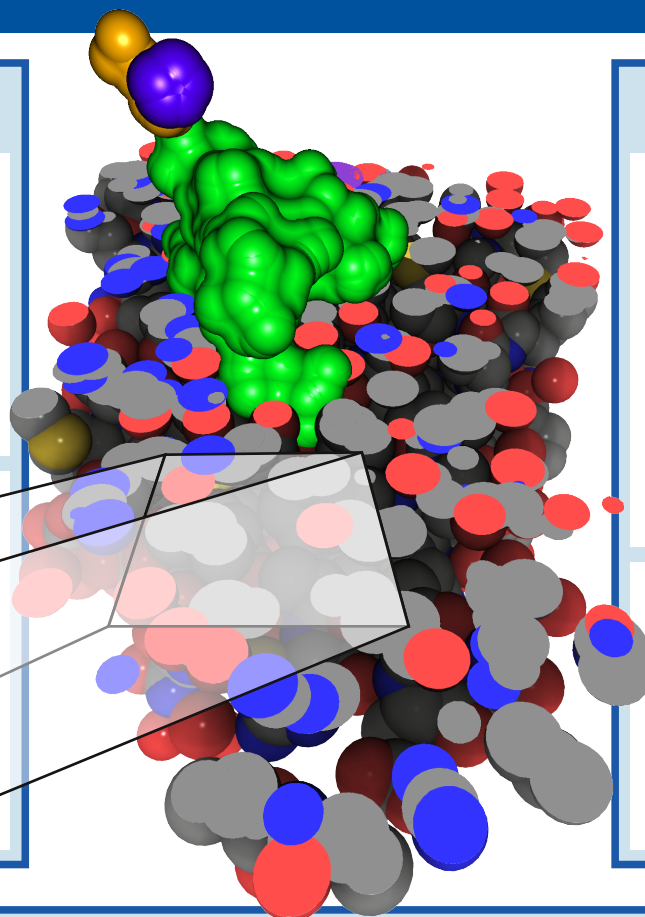
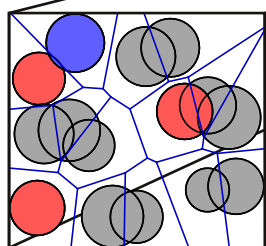
## Hledání dutin



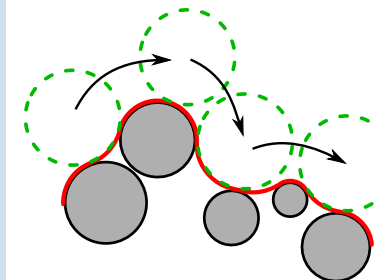
- dutina je prázdný prostor uvnitř molekuly daný minimálním poloměrem kulové sondy, která se do tohoto prostoru vejde
- dutiny mají vliv na vlastnosti molekuly

## Algoritmus

- v předzpracování se atomy zmenší na velikost nejmenšího atomu a spočte se Voroného diagram (VD)
- z diagramu se určí šířka nejužšího místa mezi novými atomy
- hrany diagramu se seřadí podle nejužšího místa
- dutiny jsou nalézány prohledáváním diagramu a testováním, zda sonda o daném poloměru může projít nejužším místem hrany
- výsledné dutiny jsou pouze přibližné, protože obyčejný VD není definován pro sféry o různých poloměrech
- uživateli je umožněno vybrat dutinu a spočítat její přesný tvar pomocí aditivně váženého VD



## Vizualizace



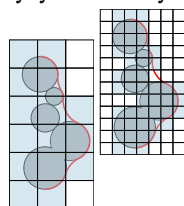
- dutiny jsou vizualizovány pomocí tzv. solvent-excluded povrchu molekuly, což je povrch vzniklý odvalováním sondy po molekule
- solvent-excluded povrch je analyticky popsitelný pomocí sfér, sférických trojúhelníků a torů

## Ray casting

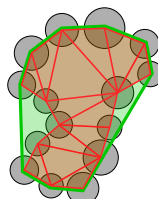
- pro vizualizaci povrchu je použit ray casting
- vykreslují se jednoduché modely sloužící pro výpočet průniků se zobrazovaným objektem
- povrch je vykreslován po částech daných analytickým popisem

## Filtrování

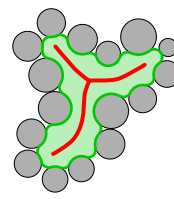
- dutiny je potřeba filtrovat, protože jich může být velmi mnoho
- byly navrženy následující možnosti filtrování:



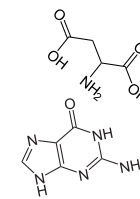
Fraktální dimenze dutiny aproximované sférami



Konvexita – poměr obsahu triangulace dutiny a její konvexní obálky



Rozvětvení – počet výrazných v tví dutiny



Rezidua – pouze dutiny sousedící se zvolenými rezidui

## Části povrchu

- jednotlivé části povrchu jsou pro účely vykreslování uzavřeny do jednoduchých obalovacích objektů

