



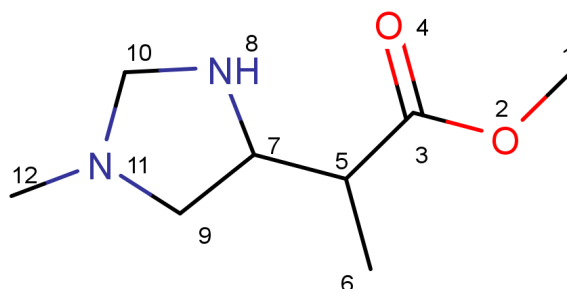
6. Übung zur Vorlesung Grundlagen der Chemieinformatik

Abgabe bis 29.11.2013 an gci-uebung@zbh.uni-hamburg.de

Aufgabe 1: Morgan (T)

(5 Punkte)

- a) Generieren Sie unter Anwendung des Morgan-Algorithmus für folgenden Molekülgraphen die CVs (Connectivity Values). Geben Sie für jeden Iterationsschritt den Wert für k und für jedes Atom den CV in einer Tabelle an.

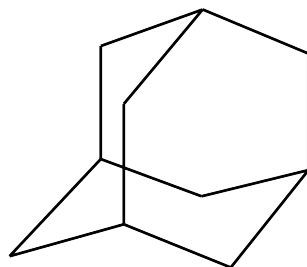


- b) Erzeugen Sie für das Beispiel aus a) unter Verwendung der Breitensuche (BFS) eine eindeutige Atomordnung **ohne** Berücksichtigung der verschiedenen Elemente (Knoten im Molekülgraphen werden alle als Kohlenstoff betrachtet).
- c) Erzeugen Sie für das Beispiel aus a) unter Verwendung der Breitensuche (BFS) eine eindeutige Atomordnung unter Berücksichtigung der verschiedenen Elemente.
- d) Verändern Sie das Beispiel aus a) so, dass der Morgan-Algorithmus keine eindeutigen CVs mehr liefert. Erläutern Sie Ihr Beispiel. Welche konkreten Schritte müsste man durchführen, um für den modifizierten Molekülgraphen eine eindeutige Atomordnung zu erhalten?

Aufgabe 2: USMILES (T)

(7 Punkte)

- a) Generieren Sie für den folgenden, hypothetischen Molekülgraphen einen Unique SMILES-String. Bestimmen Sie dazu zunächst eine eindeutige Prioritätsreihenfolge für die Knoten des Graphen. Verwenden Sie dafür den in der Vorlesung vorgestellten CANON-Algorithmus. Verwenden Sie anschließend die Tiefensuche um einen Unique SMILES-String zu erzeugen.



- b) Der Algorithmus nach Morgan benutzt zur eindeutigen Rangbildung die einfache Berechnung der Summen aller Nachbarn, anstatt das Produkt der Primzahlen. Erläutern Sie an einem einfachen Beispiel den Vorteil den das Produkt der Primzahlen liefert (bzw. den Nachteil wenn nur die Summe der Nachbarn berechnet wird).
- c) Wie lautet der Unique SMILES von Aceton?
- d) Ein mögliches Anwendungsszenario zur Verwendung von Unique SMILES besteht im Vergleich von Molekülen. Die Berechnung von Unique SMILES ist jedoch sehr aufwändig. Nennen Sie vier einfach zu berechnende Eigenschaften/ Deskriptoren, durch die Moleküle schnell verglichen werden können.
- e) Überlegen Sie, ob der CANON-Algorithmus für den folgenden Graphen eine eindeutige Lösung liefert und begründen Sie Ihre Aussage.

