

Spielereien mit Kreisen und Kugeln. Zum Thema Form und Verformung

Herbert Edelsbrunner

Department of Computer Science, University of Illinois at Urbana-Champaign,
and Raindrop Geomagic, Research Triangle Park, North Carolina, USA

Zusammenfassung

Allzulange wurde die spielhafte Beschäftigung als Gegensatz zu ernsthafter Arbeit gesehen. Dieser Artikel propagiert die spielerische Untersuchung von Kreis- und Kugelmengen. Gleichzeitig belegt er die nutzbare Anwendung von elementaren Einsichten in der Molekularbiologie und allgemeiner in der Beschreibung von Form und Verformung.

Stichworte. Kreise, Kugeln, Fläche, Volumen, Komplexe, Form, Biologie, Wachstum, Verformung, Formenraum.

1 Einleitung

Vor mehr als 350 Jahren proklamierte Galileo Galilei, daß das grandiose Buch des Universums in der Sprache der Mathematik geschrieben sei, und daß Kreise, Dreiecke und andere geometrische Figuren die Buchstaben und Zeichen dieser Sprache ausmachten. Ohne Kenntnis dieser Zeichen sei es uns unmöglich ein einziges Wort dieses Buches zu verstehen und seien wir zu Irrfahrten in einem Labyrinth des Dunkels verurteilt [12].

Von Kreis und Dreieck zu Form. Wir nehmen den Rat von Galilei wörtlich und suchen den Weg zum Verständnis von natürlichen Zusammenhängen im Studium von Kreisen und Dreiecken. Wir verwenden diese als Grundbestandteile der Beschreibung von ebenen geometrischen Formen. Unser Ziel ist eine Theorie der Beschreibung, Analyse, und Manipulation von komplizierten Formen mittels des Computers. Um die Theorie auf den alltäglichen 3-dimensionalen Raum

auszuweiten untersuchen wir Kugeln und Tetraeder, die wir als Verwandte von Kreisen und Dreiecken auffassen. Im allgemeinen leitet uns das Prinzip der allgemeinheit: Augenmerk wird auf Tatsachen konzentriert die in beliebigen und nicht nur in zwei oder drei Dimensionen gelten.

Relationen die auf geometrischer Form beruhen sind in unserer Welt so häufig wie die sprichwörtlichen Bäume die uns den Wald nicht erkennen lassen. Schlüssel die Türe öffnen, Formen die uns schön erscheinen, chemische Substanzen die miteinander reagieren, und so fort. Die vielleicht interessanteste aber auch außerordentlich schwierige Frage ist auf die Beziehung *zwischen* Formen gerichtet. Wir leben und erleben ohne Unterlaß den Unterschied und nicht das Absolute. Sogar das Sehvermögen, das uns konstant und untrüglich erscheint, beruht auf dem Prinzip des Unterschieds und des Komplements. Beim jetzigen Stand der Theorie werden wir der zentralen Frage der Beziehung zwischen Formen nicht gerecht, wir verwenden sie aber als Ziel in der Ferne auf das sich unsere Schritte richten.

Mathematik und Informatik. Vielleicht ist dem Leser nicht klar was die Diskussion von Form und Relation mit Mathematik zu tun hat. Der Autor sieht die Mathematik als Instrument des Erkennens, als abstraktes Auge. Die Mathematik hat mit der Kunst gemein, daß sie Ordnung in einem Chaos von unendlichen Phenomenen sucht. Vielleicht hat die Mathematik den Vorteil daß sie auf dem unbestechlichen Prinzip von falsch und richtig basiert. Das macht ihren Fortschritt mühsam erzeugt dafür aber Einsichten die von Wetter und Zeit nicht unmittelbar abhängen.

Die außerordentliche Mühe mit der sich Fortschritt und Anwendung in der Mathematik verbinden ist wohl der größte Hemmschuh für unser abstraktes Auge. Die Informatik zeigt einen Weg die Mathematik nutzbar zu machen ohne unseren eigenen Denkapparat dabei zu investieren. Sie ist ein Vehikel das der Mathematik die Leichtigkeit verleiht die notwendig ist sie allgemeiner als zusätzlichen Sinn zielsicher einzusetzen. Umgekehrt bietet die Mathematik den notwendigen Inhalt um der Informatik den Hauch des Lebens zu verleihen. Ein großer Schritt in die Zukunft besteht in der Entwicklung der symbiotischen Beziehung zwischen Mathematik und Informatik, die nach der Meinung des Autors teilweise hinter aber hauptsächlich noch vor uns liegt.

Übersicht. Abschnitt 2 beschäftigt sich mit einer elementaren aber bis heute unbeantworteten Frage über Einheitskreisscheiben. Abschnitt 3 verwendet alternierende Summen um Fläche und Volumen zu berechnen. Hier erklären wir auch die duale Verbindung zwischen Kreis und Dreieck auf der unser Denken über geometrische Form basiert. Abschnitt 4 gibt einen Einblick in die An-

wendung unserer Ideen in der Molekularbiologie. Abschnitt 5 stellt allgemeine Formen mit glatter Oberfläche als Einhüllende von unendlichen Kugelmengen dar. Diese Idee führt zu geometrischen Theorien von Verformung und Formraum.

2 Mehr oder weniger Fläche

Die folgende Frage über Einheitskreisscheiben reicht mehr als 40 Jahre in die Vergangenheit und ist erstaunlicherweise bis heute unbeantwortet: nimmt die abgedeckte Fläche notwendigerweise ab, oder genauer gesagt nicht zu, wenn die Mittelpunkte näher aneinander rücken? Auf den ersten Blick scheint die Antwort ein klares ja zu sein, und es ist bis heute niemandem gelungen diese Antwort zu widerlegen. Allerdings gibt es bis heute auch keinen Beweis der die Möglichkeit eines Gegenbeispiels ausschließt.

Problemformulierung. Sei \mathcal{A} eine Menge von n Einheitskreisscheiben A_i mit Mittelpunkten a_i in der Ebene. Analog sei \mathcal{B} eine Menge von n Einheitskreisscheiben B_i mit Mittelpunkten b_i . Wir bezeichnen mit $\|a - b\|$ die euklidische Distanz zwischen zwei Punkten a und b .

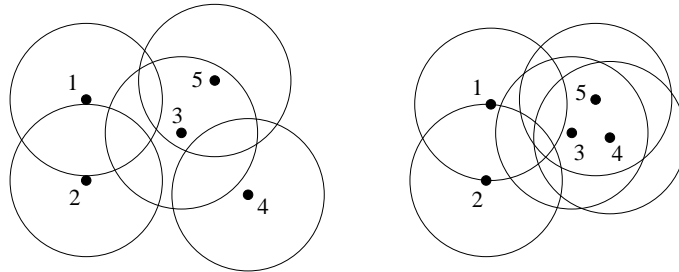


Figure 1: Zwei Mengen von je fünf Kreisscheiben mit Einheitsradius. Jedes Paar von Kreisscheiben in der rechten Menge überlappt in einem größeren Bereich als das entsprechende Paar der linken Menge.

VERMUTUNG. Wenn $\|a_i - a_j\| \geq \|b_i - b_j\|$, für alle $1 \leq i, j \leq n$, dann decken die Kreisscheiben A_i nicht weniger Fläche ab als die Kreisscheiben B_i :

$$\text{Fläche}(\bigcup \mathcal{A}) \geq \text{Fläche}(\bigcup \mathcal{B}).$$

Bild 1 illustriert die Fragestellung und die Vermutung für zwei Mengen von je $n = 5$ Einheitskreisscheiben. Wir sehen daß Kreismittelpunkte in der rechten Menge näher beieinander liegen weil jeder paarweise Schnitt von links nach rechts zunimmt.

Kurze Geschichte. Das Kreisscheibenproblem wurde unabhängig voneinander von Kneser und von Thue Poulsen in den fünfziger Jahren des zwanzigsten Jahrhunderts aufgeworfen [14, 23]. Klee and Wagon beschreiben es als Problem 3 in ihrer Sammlung von offenen Problemen in der Geometrie und Zahlentheorie [13]. Eine einfachere Version des Problems nimmt an die Kreisscheiben können so kontinuierlich von Konfiguration \mathcal{A} zu Konfiguration \mathcal{B} bewegt werden, daß die Distanz zwischen je zwei Mittelpunkten in keinem noch so kleinen Zeitintervall zunimmt. In diesem Fall existiert eine *kontinuierliche Kontrahierung* von \mathcal{A} nach \mathcal{B} . Diese Version des Problems wurde 1968 von Bollobás positiv beantwortet [1]. Vielleicht ist das Überraschende bei dem Kneserschen Kreisscheibenproblem daß es in der Tat Konfigurationen \mathcal{A} and \mathcal{B} gibt die die Voraussetzung der Vermutung erfüllen, für die aber keine kontinuierliche Kontrahierung von \mathcal{A} nach \mathcal{B} führt. Die Existenz solcher Konfigurationen macht die Schwierigkeit des Problems aus.

Kontinuierliche Kontrahierung. Wir skizzieren einen alternativen und bislang unveröffentlichten Beweis für die positive Beantwortung der Vermutung unter der Annahme einer kontinuierlichen Kontrahierung. Der Beweis gibt uns die Gelegenheit einige grundlegende kombinatorische Denkweisen auf spielerische Art einzuführen.

Statt der Fläche betrachten wir den Umfang der Vereinigung von Kreisscheiben. Da die Fläche als Integral des Umfangs für wachsenden Radius verstanden werden kann impliziert die Abnahme des Umfangs die Abnahme der Fläche. Bild 2 zeigt den Umfang der zwei Mengen von Kreisscheiben in Bild 1, beide mit positiver Orientierung. Außerdem zeigt das Bild einen dualen Polygonzug von Kreisstücken. Dieser wird erzeugt indem wir den Zirkel mit Einheitsradius an den Eckpunkten des Umfangs ansetzen und Kreismittelpunkte ebenfalls in positiver Orientierung verbinden. Wenn wir die Kreisstücke des Umfangs and des dualen Polygonzuges abwechselnd hintereinanderfügen erzeugen wir einen neuen Polygonzug ohne scharfen Endpunkt: die Tangente ist an jedem Punkt des Zuges eindeutig gegeben. Der neue Polygonzug ist geschlossen und der Anteil des Umfangs ist genau um einen Einheitskreis größer als der Anteil des dualen Polygonzuges. Wenn wir nun die Konfiguration \mathcal{A} kontinuierlich nach \mathcal{B} kontrahieren kann sich jedes Stück des dualen Zuges nur verkürzen. Der Grund ist einfach daß sich Kreismittelpunkte nur aufeinander zu bewegen. Die

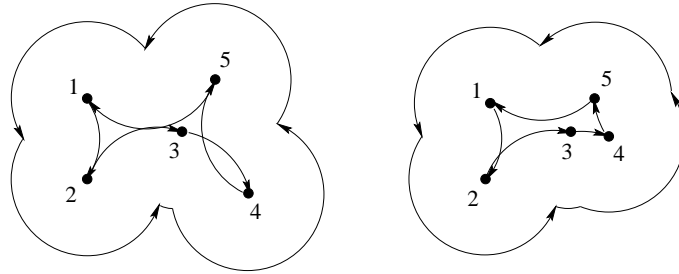


Figure 2: Orientierter Umfang und dualer Polygonzug von Kreisstücken.

Gesamtlänge des dualen Polygonzuges kann sich also nur verkürzen, und da der Längenunterschied konstant ist, gilt dasselbe für den Umfang.

Jetzt sehen wir auch warum der Beweis nicht direkt geführt werden kann: individuelle Kreisstücke des Umfangs können von links nach rechts wachsen, und ein Beispiel dafür ist der Beitrag von Kreis 3 zum Umfang in Bild 2. Obwohl individuelle Kreisstücke zunehmen haben wir belegen können daß der Gesamtumfang nicht zunimmt. Der Vollständigkeit wegen erwähnen wir die Möglichkeit von unzusammenhängenden Umfängen und der Änderung der kombinatorischen Beschreibung des Umfangs. Ohne weiter ins Detail zu gehen sagen wir nur daß das obige Argument auf diese allgemeineren Umstände leicht erweitert werden kann.

3 Duale Komplexe

Die erste Reaktion auf das Knesersche Kreisscheibenproblem ist üblicherweise Unglauben daß die Frage wirklich schwierig ist: “warum können wir es nicht einfach mit dem Prinzip der Inklusion-Exklusion beantworten?” Obwohl es sich herausstellt daß die Sache nicht so einfach liegt, steht es dafür sich mit diesem mathematischen Prinzip kurz auseinanderzusetzen.

Vier Kreisscheiben. Das Prinzip von Inklusion-Exklusion sagt aus daß die Fläche der Vereinigung von Kreisscheiben folgendermaßen berechnet werden kann: addiere die Einzelflächen, subtrahiere die Flächen der paarweisen Schnitte, addiere die Flächen der dreifachen Schnitte, und so weiter. Um dieses Resultat formal hinzuschreiben notieren wir die Fläche von A_i als F_i , die Fläche des Durchschnittes $A_i \cap A_j$ als F_{ij} , und so weiter. Für die vier Kreisscheiben in Bild

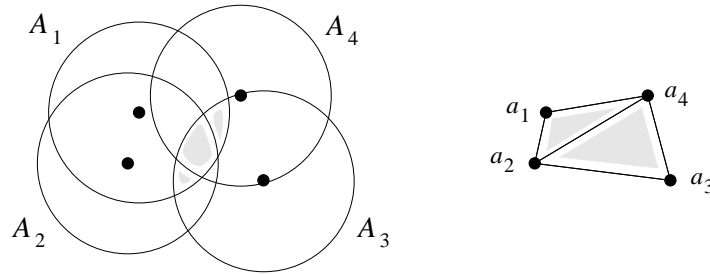


Figure 3: Die schattierten Teilflächen der Vereinigung von Kreisscheiben gehören zu den redundanten Termen der Flächengleichung. Die Punkte, Kanten, und Dreiecke der Zeichnung rechts entsprechen den Termen einer nicht-redundanten Gleichung.

3 ergibt das

$$\begin{aligned}
 F &= F_1 + F_2 + F_3 + F_4 \\
 &\quad - F_{12} - F_{13} - F_{14} - F_{23} - F_{24} - F_{34} \\
 &\quad + F_{123} + F_{124} + F_{134} + F_{234} \\
 &\quad - F_{1234}.
 \end{aligned}$$

Von Bild 3 lesen wir $F_{13} + F_{1234} = F_{123} + F_{134}$ ab. In Worten, die vier Summanden in der Gleichung für F sind redundant. Jeder nicht-redundante Term der verbleibenden Gleichung entspricht einem Element des dualen Komplexes der rechts von den vier Kreisen in Bild 3 gezeichnet ist. Die vier Punkte entsprechen den Kreisscheiben, die fünf Kanten entsprechen den nicht-redundanten paarweisen Schnitten, und die zwei Dreiecke entsprechen den nicht-redundanten dreifachen Schnitten. Unser Ziel ist nun den Begriff des dualen Komplexes auf möglichst ökonomische and natürliche Art und Weise so zu erweitern, daß seine Elemente eine Flächengleichung ohne redundante Terme beschreiben. Wir müssen ein wenig ausholen.

Voronoi und Delaunay Komplexe. Wir bestimmen für jeden Punkt x der Ebene den nächsten Mittelpunkt a_i eines Kreises in \mathcal{A} . Die *Voronoi Region* von a_i ist die Menge aller Punkte x für die a_i der nächste Mittelpunkt ist. Die Menge der Voronoi Regionen zerlegen die Ebene wie in Bild 4. Wenn zwei Regionen überlappen dann tun sie das entlang einer gemeinsamen Kante. Wenn drei Regionen überlappen dann tun sie das in einem gemeinsamen Punkt. Im allgemeinen Fall treten keine anderen Überlappungen auf. Die *Delaunay Triangulierung* ergibt sich als duales Diagramm. Die a_i sind Knotenpunkte

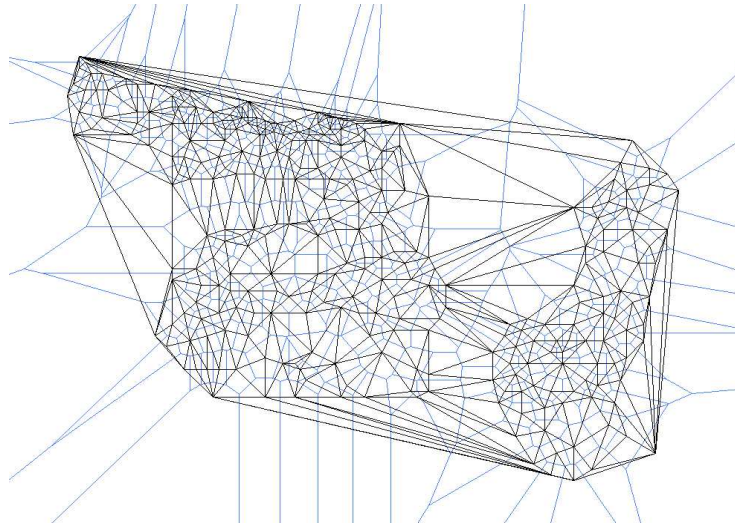


Figure 4: Die Punkte illustrieren den Baumbestand des Allerton Parkes in Monticello, Illinois. Jedem Punkt oder Baum wird der ihm am nächsten liegende Bereich im ebenen Umfeld zugeordnet.

der Triangulierung. Zwei Punkte werden durch eine Kante verbunden wenn sich die zwei entsprechenden Voronoi Regionen überlappen. Drei Punkte werden durch ein Dreieck verbunden wenn sich die drei entsprechenden Voronoi Regionen überlappen. Bild 4 zeigt die Delaunay Triangulierung über die Voronoi Regionen gezeichnet.

Duale Komplexe. Der *duale Komplex* von \mathcal{A} ergibt sich durch Selektion von Punkten, Kanten, und Dreiecken der Delaunay Triangulierung. Eine Kante gehört zum dualen Komplex wenn die Überlappung der zwei entsprechenden Voronoi Regionen in die Vereinigung der Kreisscheiben hineinreicht. Ein Dreieck gehört zum dualen Komplex wenn der Punkt in dem sich die drei entsprechenden Voronoi Regionen überlappen in der Vereinigung der Kreisscheiben liegt. Bild 5 zeigt wie die Kreisscheiben einen Teilkomplex der Delaunay Triangulierung selektieren.

Wir stellen uns vor die Kreisscheiben die den dualen Komplex definieren wachsen kontinuierlich und gleichzeitig. Jede Scheibe deckt einen wachsenden Teil des unveränderten Voronoi Gebietes ab. Somit ergeben sich immer mehr Berührungspunkte und damit immer mehr Verbindungen im dualen Komplex.

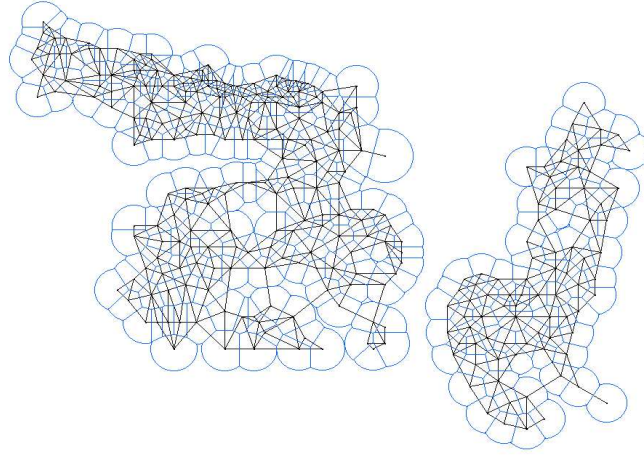


Figure 5: Jede Voronoi Region wird auf die Einheitskreisscheibe um den Punkt beschränkt und die resultierenden Gebiete erzeugen den dualen Komplex.

Anders ausgedrückt macht der duale Komplex einen zunehmenden Teilkomplex der Delaunay Triangulierung aus. Im Endstadium des Wachstums nimmt der duale Komplex die ganze Delaunay Triangulierung ein.

Inklusion-Exklusion Formeln. Mit der Einführung des dualen Komplexes ist die Berechnung der Fläche die eine endliche Menge von Einheitskreisscheiben abdeckt denkbar einfach: verwende den dualen Komplex als Indikator in der Auswahl und addiere Einzelflächen, subtrahiere paarweise Schnittflächen, und addiere dreifache Schnittflächen. Wir behaupten diese Berechnung ergibt die Fläche der Vereinigung genau und nicht nur annähernd. Warum das so ist kann in [8] nachgelesen werden.

Wichtiger als der Beweis der Behauptung ist für uns die Einsicht daß das angegebene Rezept zur Flächenberechnung wesentlich allgemeiner gilt als nur für Einheitskreisscheiben in der Ebene. Sei im weiteren \mathcal{A} eine endliche Menge von Kugeln im d -dimensional Raum. Die Radien sind beliebig und können alle verschieden sein. Wir verallgemeinern Voronoi Regionen indem wir die euklidische Distanz durch die Potenz ersetzen: die *Potenz* eines Punktes x zu einer Kugel A_i mit Mittelpunkt a_i and Radius r_i ist $\pi_i(x) = \|x - a_i\|^2 - r_i^2$. Optisch verändern sich dadurch die Voronoi Regionen kaum, außer daß zwei Regionen

nicht mehr genau in der Mitte zwischen den Kugelmittelpunkten getrennt werden. Wenn wir Bild 5 genauer untersuchen sehen wir in der Tat verschieden große Kreise und damit verallgemeinerte Voronoi Regionen in Bild 4. Die Delaunay Triangulierung ergibt sich als duales Diagramm, und der duale Komplex durch die Einschränkung der dualen Korrespondenz auf die Vereinigung der Scheiben.

Für Kugeln in allgemeiner Lage im d -dimensionalen Raum ist der duale Komplex eine Menge von Simplexen deren Dimension zwischen 0 und d variiert. Punkte sind 0-dimensional Simplexe, Kanten sind 1-dimensional Simplexe, und so weiter. Kugelmengen in spezieller Lage können infinitesimal in allgemeine Lage perturbiert werden. Geometrisch gesehen ist ein Simplex der Dimension k die konvexe Hülle von $k + 1$ Kugelmittelpunkten. Kombinatorisch gesehen ist derselbe Simplex die Menge der $k + 1$ entsprechenden Kugeln. Um die allgemeine Volumensformel angeben zu können schreiben wir $K = K(\mathcal{A})$ für den dualen Komplex, σ für einen allgemeinen Simplex in K , $\dim \sigma$ für die Dimension von σ , und $\bigcap \sigma$ für den Durchschnitt der $\dim \sigma + 1$ Kugeln in σ .

SATZ. Das d -dimensionale Volumen der Vereinigung einer Menge \mathcal{A} von Kugeln im d -dimensionalen Raum ist

$$\text{Volumen}\left(\bigcup \mathcal{A}\right) = \sum_{\sigma \in K} (-1)^{\dim \sigma} \cdot \text{Volumen}\left(\bigcap \sigma\right).$$

Kurze Geschichte. Voronoi Regionen sind nach dem ukrainischen Mathematiker Gheorghis Voronoi benannt [24]. Die Idee zur Aufteilung der Ebene durch solche Regionen läßt sich allerdings wesentlich weiter in die Vergangenheit zurückverfolgen. Die vielleicht ältesten Belege sind Zeichnungen von René Descartes aus dem siebzehnten Jahrhundert. Die dualen Diagramme sind nach dem russischen Mathematiker Boris Delone (auch Delaunay) benannt. Dieser hat 1934 einen Artikel zu diesem Thema veröffentlicht und Gheorghis Voronoi gewidmet [7]. Die Geschichte der dualen Komplexe beginnt 1983 mit einer Zusammenarbeit des Autors mit David Kirkpatrick und Raimund Seidel [11].

Die Idee daß die Fläche des Durchschnitts von Kreisscheiben durch kurze Inklusion-Exklusions Formeln ausgedrückt werden kann finden wir erstmals bei Kratky [15], der allerdings keine genaueren Angaben zum Aussehen dieser Formeln gibt. Naiman und Wynn konkretisieren Kratkys Idee und zeigen 1992 daß die Simplexe der Delaunay Triangulierung eine exakte Formel für die Vereinigung von Einheitskreisscheiben liefern [19]. Die Verallgemeinerung auf beliebige Radien und die Verbesserung von Delaunay Triangulierungen zu dualen Komplexen geht auf die Arbeit [8] des Autors dieses Artikels zurück.

4 Bausteine des Lebens

Die letzten Jahrzehnte zeigen überraschenderweise daß geometrische Form ein Schlüsselrolle in der Molekularbiologie spielt. Frei nach Rose hängt die Rolle eines Proteins in der grandiosen Oper des Lebens auf molekularer Ebene von genau einem ab, nämlich ihrer Form [22]. Für ein Proteinmolekül folgt die Funktion der Form.

Atomkugel Modelle. Geometrische Modelle von Makromolekülen sind anfangs der siebziger Jahre des zwanzigsten Jahrhunderts von Frederick Richards und seinen Studenten eingeführt worden [16, 20]. Der Grundidee folgend wird jedem Atom ein geometrischer Bereich zugeordnet und das Molekül als Gesamtheit dieser Bereiche aufgefaßt. In der einfachsten Version ist jedes Atom eine Kugel und das Molekül die Vereinigung dieser Kugeln. Die verbleibende Frage nach den Radien wird durch Rückrechnung aus experimentellen Betrachtungen der van der Waals Kräfte beantwortet. Die Berechnungen eines eindeutigen van der Waals Radius pro Atomtyp ist nicht unproblematisch, schon aus dem Grund daß jede Kraftauswirkung die Funktion von zumindest zwei Atomen ist. Trotzdem wird dem van der Waals Modell von Molekülen beträchtliche Aufmerksamkeit gewidmet und ist in jedem einschlägigen Einführungswerk zu finden [6].

Eine einfache Änderung der Radien erlaubt die Untersuchung des Verhaltens eines Moleküls innerhalb einer Lösung. Für Wasserlösungen nähern wir ein Wasserteilchen mit einer Kugel von Radius R_0 an. Der Ort der Mittelpunkte von Wasserteilchen die ein gegebenes Molekül überlappen ist dann die Vereinigung von Atomkugeln deren Radien um R_0 vergrößert wurden. Zum Beispiel ist das ursprüngliche Molekül in der Lage Wasserteilchen einzufangen wenn immer ihr um R_0 vergrößertes Modell Höhlen im Inneren besitzt.

Löcher. Eine interessante Frage von praktischer Relevanz ist die Charakterisierung und Berechnung des Zusammenhangs von Molekülen. Topologisch unterscheiden wir bei drei-dimensionalen Formen drei Arten von Löchern:

Höhlen im Inneren der Form die vollständig abgeschlossen und dadurch von außen nicht zugänglich sind,

Tunnels die wie Flugbahnen durch die Form hindurch führen, und

Brüche die die Form in zwei oder mehr Zusammenhangskomponenten zerlegen.

Alle drei Arten von Löchern können mathematisch als Ränge von Homologie Gruppen eindeutig abgezählt werden. Wir verweisen auf das Buch von Boltjanskij und Efremovič als eine relativ leicht lesbare Einführung in topologischen

Konzepte [2]. Bei gegebener Form im drei-dimensionalen Raum sind Höhlen und Zusammenhangskomponenten eindeutig geometrisch lokalisierbar und damit auch leicht abzählbar. Bei Tunnels ist der Sachverhalt anders und es ist nicht ganz einfach einzusehen daß es eine eindeutig bestimmte Anzahl von Tunnels gibt. Wie viele Tunnels hat zum Beispiel das linke Gebilde in Bild 8? Die abstrakte Version dieses Gebildes ist ein Skelett von Kanten die Eckpunkte und Mittelpunkt eines Würfels wie in Bild 6 verbinden. Wir können die Tunnels

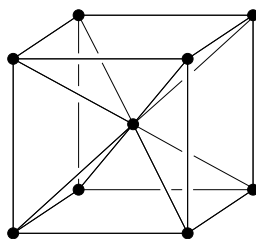


Figure 6: Ein Skelett von 20 Kanten das dem linken Gebilde in Bild 8 entspricht.

durch inkrementelles Hinzufügen von Kanten abzählen. Die neun Punkte werden bereits mit acht der Kanten zu einer einzigen Komponente verbunden. Jede weitere Kante erzeugt ein Tunnel, also zählen wir insgesamt 12. Das Verwirrende an Tunnels ist die Möglichkeit sie in verschiedenster Reihenfolge zu durchfahren. In der Tat betrachten Homologie Gruppen jedes mögliche Tunnel als die Kombination von Basistunnels. Verschiedene Basen sind möglich, aber alle minimalen Basen sind gleich groß.

Taschen. Die algorithmische Berechnung von Löchern in Molekülen verbindet sich für den Autor mit einer interessanten Episode. Wie man sich vorstellen kann ist die Implementierung nicht ohne Aufwand, vor allem wenn Korrektheit und Schnelligkeit notwendige Kriterien sind. Wir erweiterten auch die Inklusion-Exklusion Formeln um Löcher zu messen. Nach all der Arbeit und investierten Zeit konfrontierten uns die Kollegen von der Biologie mit der Tatsache daß Löcher in Molekülen die zählen gar keine Löcher im topologischen Sinn des Wortes sind. Vielmehr sind es die Vertiefungen in der Oberfläche die eine Rolle in der Interaktion zwischen Molekülen spielen. Wir bezeichnen solche Löcher in weiteren als *Taschen*. Auf den eigenartigen Gegensatz zwischen dem topologischen und den allgemeinsprachlichen Gebrauch des Wortes Loch haben schon Casati und Varzi in ihrer philosophischen Abhandlung [3] hingewiesen. Sie führen einen taschenähnlichen Begriff ein der aber mathematisch und algorithmisch nicht weiter brauchbar ist.

Als Reaktion auf die Kritik der Biologen haben wir uns entschieden einen kleinen Anteil von Geometrie in die Definition einer neuen Art von Löchern einfließen zu lassen. Dazu betrachten wir den Wachstum des Moleküls, der sich ergibt wenn wir all Kugelradien kontinuierlich und gleichzeitig vergrößern. Eine *Tasche* verengt sich am Eingang und verwandelt sich in eine Höhle bevor diese verschwindet und von Kugeln völlig überdeckt wird. Das zeitweilige Erscheinen von Höhlen unterscheidet Taschen von weniger ausgeprägten Vertiefungen. Bild 7 veranschaulicht den Begriff durch die Darstellung des entsprechenden dualen Komplexes links und der berandenden Kugeln rechts. Die technischen Details und die algorithmische Berechnung von Taschen kann in [10] nachgelesen werden.

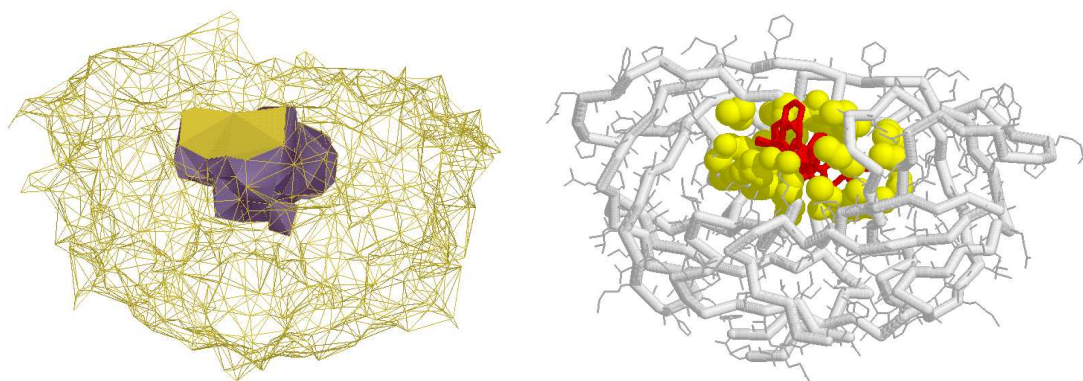


Figure 7: HIV-1 Protease. Links beschreiben Tetraeder der Delaunay Triangulierung den dualen Komplex der Tasche. Rechts sehen wir die Randkugeln derselben Tasche.

Anwendungen. Um eine Definition zu rechtfertigen müssen wir ihren theoretischen oder praktischen Nutzen nachweisen. In diesem Fall suchen wir praktische Rechtfertigung. Die computerunterstützte Untersuchung von Makromolekülen und vor allem von Proteinen ist glücklicherweise schon so weit fortgeschritten, daß eine gute Anzahl von Konformationen öffentlich zugänglich ist. Eine Konformation in diesem Zusammenhang ist eine detaillierte geometrische Beschreibung: jedem Atom ist eine Lokalität durch Ort des Zentrums und Ra-

dius im drei-dimensionalen Raum zugeschrieben. Wir konnten also unsere Software dazu verwenden diese Konformationen neu algorithmisch zu studieren. Die Ergebnisse der Untersuchung von 51 Proteinen sind in [17] veröffentlicht. Es seien hier nur einige wenige Resultate erwähnt.

Das wichtigste Ergebnis ist daß in ungefähr 80 Prozent der Fälle das Aktivgebiet des Proteins mit der Tasche des größten Volumens übereinstimmt. Damit haben wir ein rein geometrisches Kriterium gefunden das mit guter Wahrscheinlichkeit und automatisch die wichtigste Stelle eines Proteins identifiziert. Es stellt sich heraus daß in vielen Fällen das Aktivgebiet noch von kleineren Taschen in der nahen Umgebung unterstützt wird. Diese können, müssen aber nicht bei einer Molekülanlagerung beteiligt sein. Es ist auch interessant daß größere Proteine statistisch gesehen keine größeren aber dafür mehr Taschen aufweisen. Die in Bild 7 dargestellte HIV-1 Protease hat die unübliche Eigenschaft daß die Konformation sich stark verformen und dadurch eine Tasche von sehr variabler Größe erzeugen kann.

5 Form und Formenraum

Die Untersuchung von Molekülen deutet schon darauf hin, daß es nicht reicht nur statische Form zu untersuchen. Wir müssen die Variabilität die sich mit der Möglichkeit der Verformung ergibt mit ins Kalkül ziehen.

Glatte Oberflächen. Bevor wir uns in die Behandlung von sich kontinuierlich verändernder Form stürzen betrachten wir die Modellierung von Formen mit glatter Oberfläche. Wir verwenden wiederum Kugeln, erzeugen aber automatisch Blendflächen die scharfe Kreisränder an Schnittstellen zwischen Kugeln überbrücken, siehe Bild 8. Wir verwenden ausschließlich einschalige und zweischalige rotationssymmetrische Hyperboloide sowie konkave Kugelflächen. Zusammen mit den konvexen Kugelflächen der erzeugenden Kugeln macht das unser Repertoire von elementaren Teilflächen aus. Wir überspringen die mathematischen Details der Konstruktion die in [9] nachgelesen werden können. Die wichtigsten Eigenschaften sind wie folgt.

- (1) Die Oberfläche hat keinen Rand und begrenzt damit immer einen dreidimensionalen Körper.
- (2) Die Tangentialebene ist überall definiert und variiert kontinuierlich.
- (3) Die Krümmung ist überall definiert und die lokal maximale ein-dimensionale Krümmung variiert kontinuierlich.

- (4) Die Fläche ist symmetrisch bezüglich innen und außen, was bedeutet daß die genau selbe Fläche von zwei verschiedenen Mengen von Kugeln erzeugt wird.

Eigenschaft (4) sollte sich in der Modellierung von Interaktionen zwischen Molekülen als relevant herausstellen. Eine Ausnahme zu Eigenschaften (2) und (3) wird durch das mittlere Gebilde in Bild 8 aufgezeigt. Im Grenzfall zwischen einschaligem und zweischaligem Hyperboloid ergibt sich ein Doppelkegel an dessen Spitze Tangentialebene und Krümmung nicht definiert sind. Wie wir bald sehen werden sind solche Spitzen notwendig um die Topologie der Form ohne ruckartige Bewegung zu verändern.

Topologische Verwandlung. Wir verwenden das glatte Oberflächenmodell für geometrische Formen und untersuchen die Art und Weise wie eine Form ihren topologischen Zusammenhang durch kontinuierliche Verformung verändert. Wir beschränken uns zunächst auf Verformung durch Wachstum. Wir erkennen vier topologieverändernde Operationen, von denen eine in Bild 8 sichtbar ist.

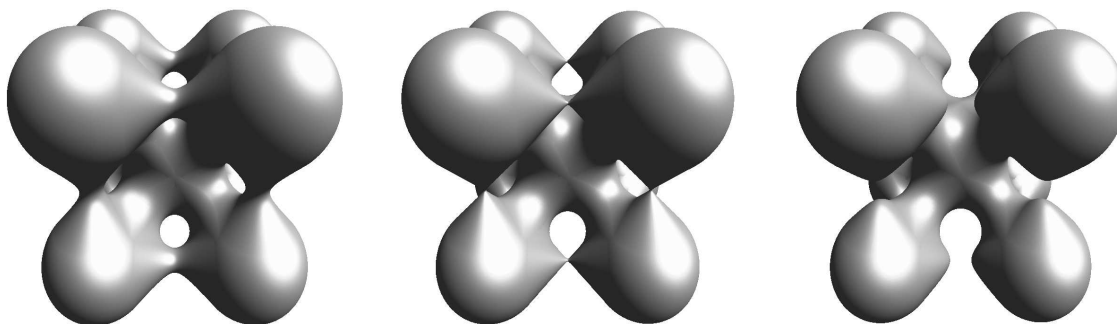


Figure 8: Jedes der drei Gebilde ist durch neun Kugeln im 3-dimensional Raum vollständig definiert. Die Kugelmittelpunkte beschreiben jeweils die acht Ecken und den Mittelpunkt eines Würfels. Die Kugelradien nehmen von links nach rechts ab.

Erscheinung. Eine neue Komponente der Form erscheint aus dem Nichts, zunächst als Punkt, dann als wachsende Kugel, und schlußendlich als möglicherweise kompliziertes Gebilde.

Verbindung. Es bildet sich eine Brücke zwischen zwei Komponenten oder zwischen vorher getrennten Teilen derselben Komponente. Wenn wir Bild 8 von

links nach rechts lesen sehen wir die simultane Bildung von zwölf Brücken, alle zwischen verschiedenen Teilen derselben Komponente.

Zuschüttung. Ein Tunnel verengt sich zu einem Punkt und verschwindet. Geometrisch ist das Tunnel durch ein einschaliges Hyperboloid modelliert. Im Augenblick der Verengung zu einem Punkt mutiert dieses zu einem Doppelkegel und im weiteren zu einem zweischaligen Hyperboloid.

Auffüllung. Eine Höhle im Inneren der Form verkleinert sich und verschwindet. Kurz vor dem Verschwinden sehen wir eine leere Kugel die sich zu einem Punkt zusammenzieht.

Die vier Operationen entsprechen vier weiteren inversen Operation in der umgekehrten Zeitrichtung. Wir erkennen grundlegende Symmetrien indem wir auch den Ort umkehren. Genauer gesagt tauschen wir eine Form mit ihrem Komplement (dem Außen) und lesen die Geschichte verkehrt. Durch die Umdrehung der Zeitrichtung kehrt sich Wachstum in ihr Gegenteil, aber durch Umdrehung des Ortsinnes ergibt sich wiederum Wachstum. Allerdings kehrt sich Erscheinung in Auffüllung und umgekehrt. Verbindung kehrt sich in Zuschüttung und umgekehrt. Damit verstehen wir alle acht Operationen als symmetrische Varianten von nur zwei Grundtypen. Dem mathematisch gebildeten Leser wird der Morse-theoretische Hintergrund [18] in der Beschreibung der Operationen nicht verborgen bleiben.

Kanonische Verformung. Obwohl Bewegung wesentlich allgemeiner ist als reines Wachstum ergeben sich keine neuen topologieverändernden Operationen. Eine allgemeine Verformung kann durch kontinuierliche Verschiebung und Größenänderung der definierenden Kugeln erzeugt werden.

Bild 9 illustriert eine Verformung in der Ebene. Die Ausgangsform ist durch vier Kreise definiert und verändert sich in die durch drei Kreise definierte Endform. Die Punkte, Kanten, Dreiecke und Vierecke beschreiben den dualen Komplex der ebenfalls eine Sequenz von Veränderungen durchläuft. Wir sehen daß der duale Komplex im Inneren der Form zu liegen kommt und zu jedem Zeitpunkt denselben topologischen Zusammenhang aufweist. Im Unterschied zur kontinuierlichen Verformung der glatten Form durchläuft der duale Komplex eine diskrete Sequenz von kombinatorisch verschiedenen Zuständen. Die Erscheinung korrespondiert mit der Erzeugung eines neuen Knotenpunktes im dualen Komplex. In ähnlicher Weise korrespondieren Verbindung, Zuschüttung, und Auffüllung mit der Einfügung einer neuen Kante, eines neuen Dreiecks, eines neuen Tetraeders in den dualen Komplex. Vom algorithmischen Gesichtspunkt ist diese Korrespondenz zwischen glattem Oberflächenmodell und dualem Komplex von erstrangiger Bedeutung. Erst durch sie werden Änderungen in der

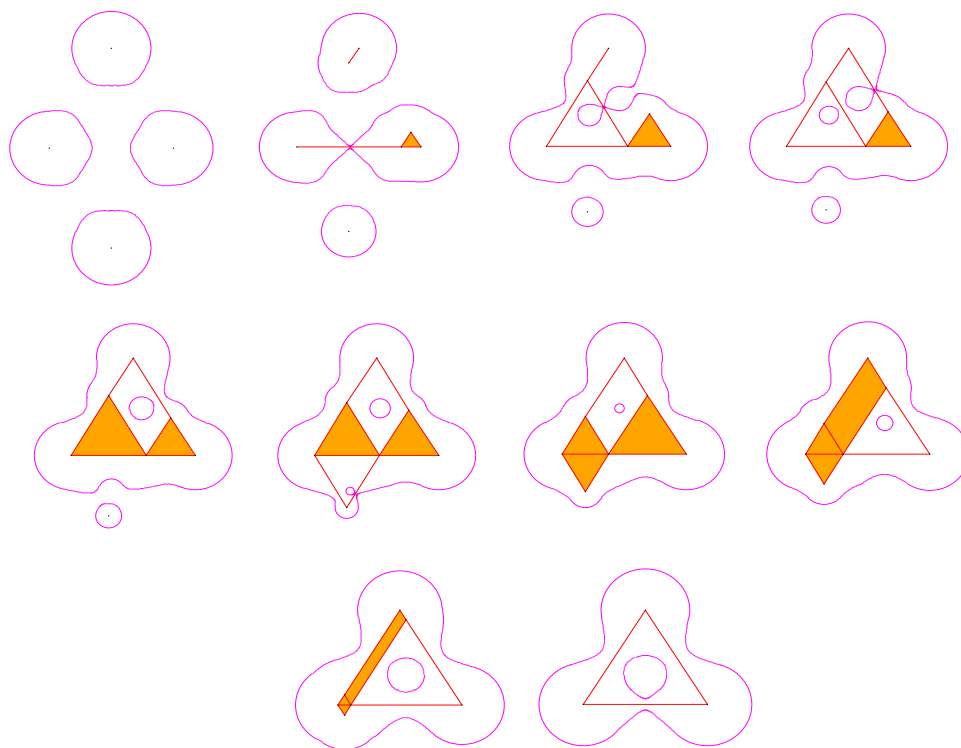


Figure 9: Zehn Schnappschüsse einer Verformung. Die Form wird durch die glatte Kurve begrenzt und durch den dualen Komplex im Inneren kombinatorisch aufrechterhalten.

Topologie vorhersagbar und können rechtzeitig verarbeitet werden. Weitere Details der Berechnung von Verformungen im zwei-dimensionalen Fall sind in [5] beschrieben.

Formenraum. Die in Bild 9 illustrierte Verformung ist das Ergebnis einer kanonischen Bewegung von Ausgangs- zu Endform. Wir ersparen dem Leser die Details erwähnen aber daß die Verformung nichts mit physikalischen Kräften oder Ähnlichem zu tun hat. Sie beruht einzig und allein auf der geometrischen Interpretation von allgemeiner drei-dimensionaler Form als die Projektion einer Sektion eines vier-dimensionalen konvexen Körpers. Die Verformung kann dann durch konvexe Verbindung von zwei solchen Körpern die in parallelen Hyper-

ebenen im fünf-dimensionalen Raum eingebettet sind erzeugt werden. Wie auch immer. Einzelheiten können in [4] nachgelesen werden. Wichtig ist einzusehen daß eine kanonische Verformung einen Formenraum erzeugt.

Die Verformung zwischen zwei Formen erzeugt einen ein-dimensionalen Formenraum, nämlich das Zeitintervall der Verformung und mit jedem Zeitpunkt die zugeordnete Form. Wir weiten die paarweise kanonische Verformung auf $k + 1 > 2$ Basisformen aus. Der Fall $k + 1 = 3$ ist in Bild 10 schematisch dargestellt. Die Punkte X_0, X_1, X_2 repräsentieren die drei Basisformen. Die

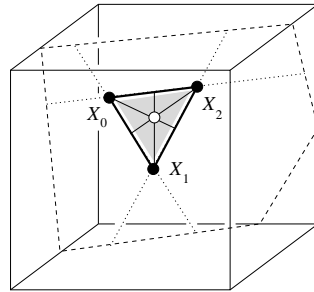


Figure 10: Eine schematische Darstellung eines zwei-dimensionalen Formenraumes aufgespannt von drei Grundformen. Der Würfel symbolisiert den unendlich-dimensionalen Raum in dem der Formenraum eingebettet ist.

drei Kanten des Dreiecks repräsentieren die paarweise Verformung zwischen X_0 und X_1 , X_1 und X_2 , und X_2 und X_0 . Ein Punkt im Inneren des Dreiecks kann durch die Verbindung eines Eckpunktes mit einem Punkt der gegenüberliegenden Kante erreicht werden. In anderen Worten, wir halten die Verformung von X_1 zu X_2 in der Mitte an und verformen diese gemischte Form zu X_0 , unterbrechen aber wiederum die Verformung frühzeitig und zwar genau am Zielpunkt im Inneren des Dreiecks.

Derselbe Punkt kann auf zumindest drei verschiedenen Wegen erreicht werden. Die Verformung ist nun so definiert daß die erzeugte gemischte Form immer dieselbe ist. Somit erhalten wir in der Tat einen zwei-dimensionalen Raum von Formen. Bei $k + 1$ Basisformen erhalten wir einen k -dimensionalen Teil des unendlich-dimensionalen Formenraumes der bereits bei Riemann eine Rolle in der Einführung von abstrakten Mannigfaltigkeiten gespielt hat [21].

Literaturhinweise

- [1] B. BOLLOBÁS. Area of the union of disks. *Elem. Math.* **23** (1968), 60–61.

- [2] V. G. BOLTJANSKIJ UND V. A. EFREMOVIČ. *Anschauliche kombinatorische Topologie*. Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, Deutschland, 1986.
- [3] R. CASATI AND A. C. VARZI. *Holes and Other Superficialities*. MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1994.
- [4] H.-L. CHENG, H. EDELSBRUNNER AND P. FU. Shape space from deformation. In “Proc. 6th Pacific Conf. Comput. Graphics Appl., 1998”, 104–113.
- [5] S.-W. CHENG, H. EDELSBRUNNER, P. FU AND K.-P. LAM. Design and analysis of planar shape deformation. In “Proc. 14th Ann. Sympos. Comput. Geom., 1998”, 29–38.
- [6] T. E. CREIGHTON. *Proteins. Structures and Molecular Principles*. Freeman, New York, 1984.
- [7] B. DELAUNAY. Sur la sphère vide. *Izv. Akad. Nauk SSSR, Otdelenie Matematicheskii i Estestvennyka Nauk* **7** (1934), 793–800.
- [8] H. EDELSBRUNNER. The union of balls and its dual shape. *Discrete Comput. Geom.* **13** (1995), 415–440.
- [9] H. EDELSBRUNNER. Deformable smooth surface design. *Discrete Comput. Geom.* **21** (1999), 87–115.
- [10] H. EDELSBRUNNER, M. A. FACELLO AND J. LIANG. On the definition and the construction of pockets in macromolecules. *Discrete Appl. Math.* **88** (1998), 83–102.
- [11] H. EDELSBRUNNER, D. G. KIRKPATRICK AND R. SEIDEL. On the shape of a set of points in the plane. *IEEE Trans. Inform. Theory* **29** (1983), 551–559.
- [12] G. GALILEI. The assayer. In “The Controversy on the Comets of 1618”, eds. S. Drake and C. D. O’Malley, 151–336, Univ. Pennsylv. Press, Philadelphia, 1960.
- [13] V. KLEE AND S. WAGON. *Old and New Unsolved Problems in Plane Geometry and Number Theory*. Math. Assoc. Amer., Dolcini Math. Exp. **11**, 1991.
- [14] M. KNESER. Einige Bemerkungen über das Minkowskische Flächenmass. *Arch. Math.* **6** (1955), 382–390.
- [15] K. W. KRATKY. The area of intersection of n equal circular disks. *J. Phys. A: Math. Gen.* **11** (1978), 1017–1024.
- [16] B. LEE AND F. M. RICHARDS. The interpretation of protein structures: estimation of static accessibility. *J. Mol. Biol.* **55** (1971), 379–400.
- [17] J. LIANG, H. EDELSBRUNNER AND C. WOODWARD. Anatomy of protein pockets and cavities: measurement of binding site geometry and implications for ligand design. *Protein Science* **7** (1998), 1884–1897.

- [18] J. MILNOR. *Morse Theory*. Annals Math. Studies, Princeton Univ. Press, 1963.
- [19] D. Q. NAIMAN AND H. P. WYNN. Inclusion-exclusion-Bonferroni identities and inequalities for discrete tube-like problems via Euler characteristics. *Ann. Statist.* **20** (1992), 43–76.
- [20] F. M. RICHARDS. Areas, volumes, packing, and protein structures. *Ann. Rev. Biophys. Bioeng.* **6** (1977), 151–176.
- [21] B. RIEMANN. Über die Hypothesen, welche der Geometrie zugrunde liegen. *Abh. Königl. Ges. Wiss. Göttingen* **13** (1868).
- [22] G. D. ROSE. No assembly required. *The Sciences* **36** (1996), 26–31.
- [23] E. THUE POULSEN. Problem 10. *Math. Scand.* **2** (1954), 346.
- [24] G. VORONOI. Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. *J. Reine Angew. Math.* **133** (1907), 97–178, and **134** (1908), 198–287.