

Számítógéppel segített modellezés és szimuláció a természettudományokban

Beszámoló előadás

Németh Gábor

2008. 05. 08.

A kurzusról

- *Intenzív, 38 órás kurzus 2008. 03. 25. -2008. 03. 30-ig*
- *Három csoport: matematika-fizika, élettudomány és tanár csoport*
- *A Szegedi Tudományegyetem és az Újvidéki Egyetem szervezésében valósult meg a kurzus*
- *Magyar és külföldi jelentkezők*
- *A projekt a Magyarország-Románia és Magyarország-Szerbia és Montenegró Határon Átnyúló Együttműködési Programban, az Európai Unió és a Magyar Köztársaság társfinanszírozásával valósul meg.*

Élettudomány csoport

<i>Kurzus</i>	<i>Óraszám</i>
Matematikai és vizualizációs csomagok	4
Matematikai modellek számítógépes vizsgálata	4
Térgeometriai struktúrák számítógépes modellezése	4
Sztatisztikai szoftverek, biosztatisztika	4+2
Számítógéppel segített mérés technika	4+2
Molekula design és kvantumkémia	4+4
Molekulamodellezés, kölcsönhatások biológiai rendszerekben	4

***Molekula-design
és kvantumkémia,
molekula modellezés***

Molekula-design és kvantumkémia

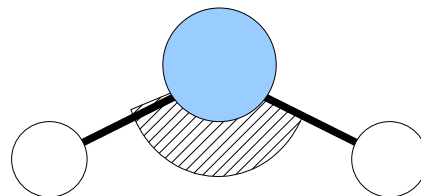
- *A molekulákat nem síkban, hanem térben kell elképzelni*
- *A molekulákban az atomok között energiák lépnek fel*
- *Nem csak az egymással kapcsolódó atomok között lép fel kölcsönhatás a molekulákban, hanem a többi atom között is*
- *A molekula-design során arra kell törekedni, hogy ez az energia minimális legyen*
- *Az tervezéshez modellező programokat használnak*

Molekula-design és kvantumkémia

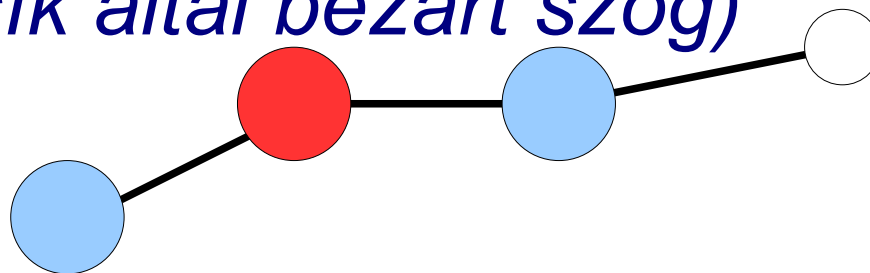
- *A molekulák tervezése során három geometriai paramétert lehet figyelembe venni:*
 - *az atomok közötti távolság*



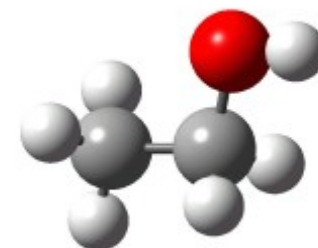
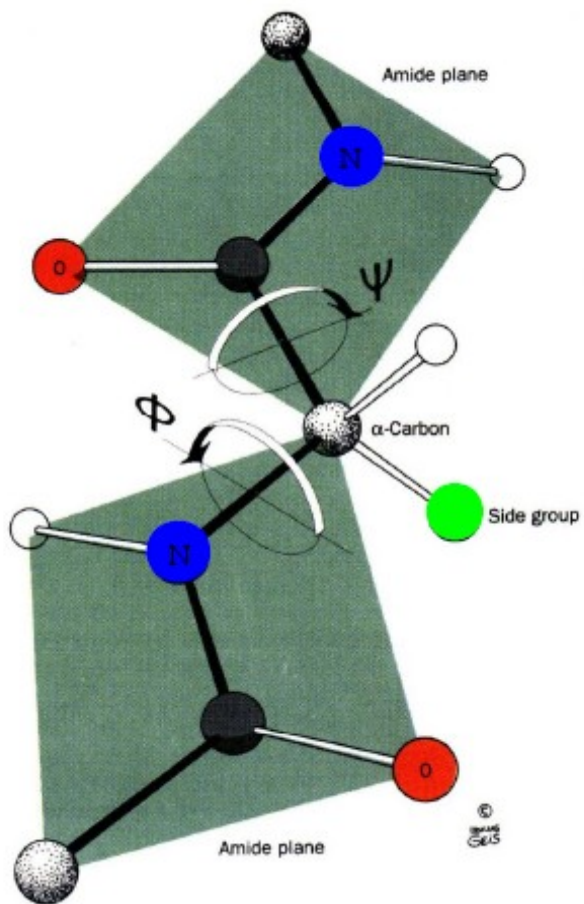
- *három atom által bezárt szög*



- *dihedrális szög (két sík által bezárt szög)*

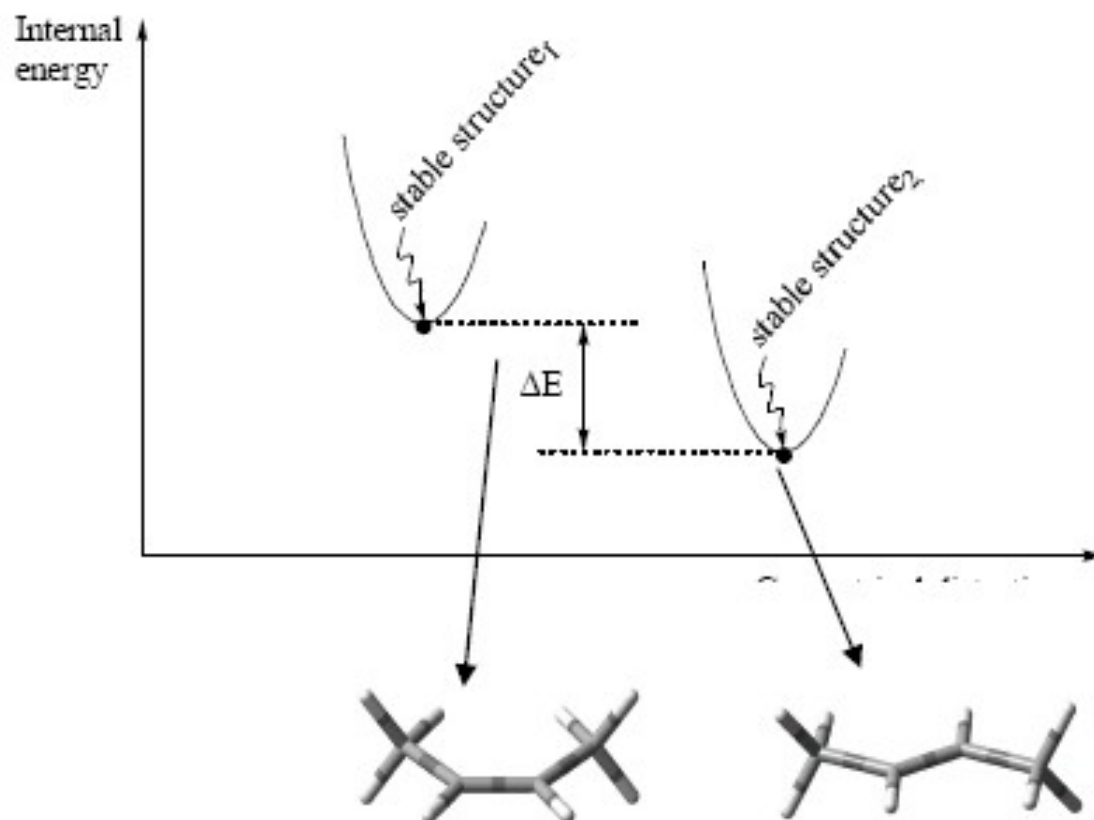


Molekula-design és kvantumkémia




Molekula-design és kvantumkémia

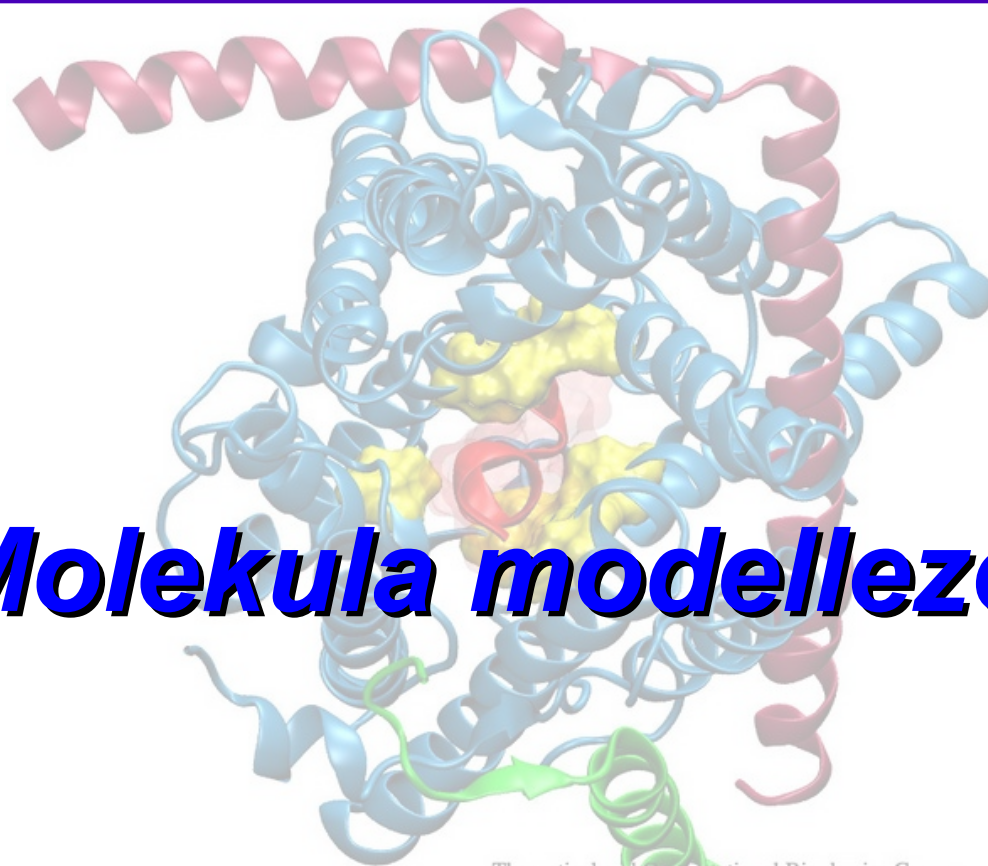
- *Miért fontos?*
- *A stabil állapotokat keressük*
- *Több stabil állapot is lehet*
- *A stabil állapotoknak más az energiaszintje*



Molekula-design és kvantumkémia

- *Hogyan keressük a stabil állapotokat?*
- *Ki lehet számolni a belső energiát minden geometriai struktúra esetén*
- *Túl sok lehetőség*  *program*
- *Optimalizáló eljárások*
- *Lehetnek lokális optimumok*
- *Több paraméter*

Molekula-design és kvantumkémia



Molekula modellezés

Theoretical and Computational Biophysics Group
Beckman Institute
University of Illinois at Urbana-Champaign

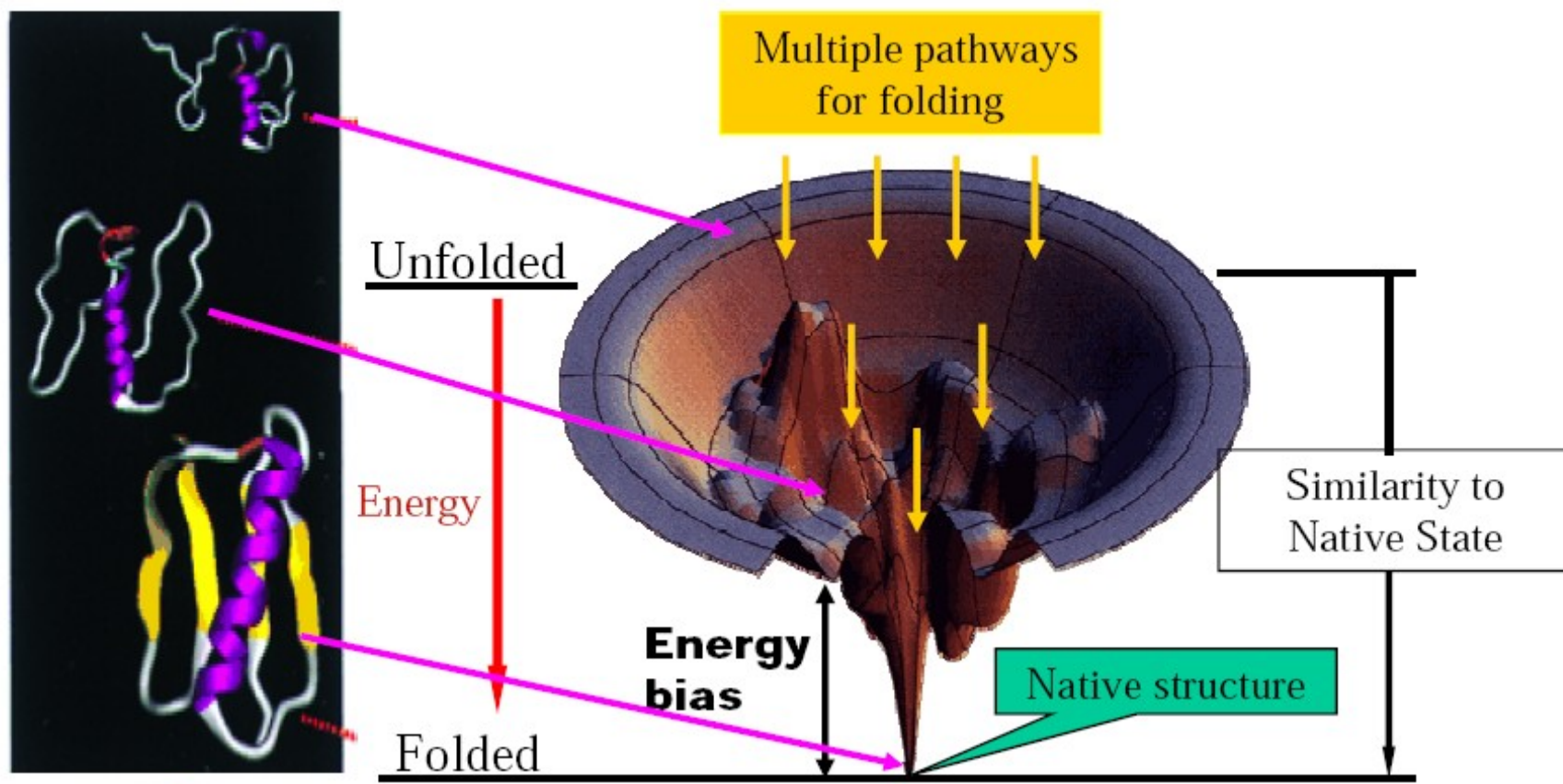
Molekula modellezés

- *A molekulák belső energiáit nem csak akkor lehet számolni, mikor egy molekulát atomokból állítunk össze, hanem akkor is, amikor két molekula kölcsönhatását vizsgáljuk.*
- *Ha egy molekulát egy másikhoz szeretnénk kapcsolni, akkor dokkolásról beszélünk. A dokkolás során megadhatjuk, hogy az új molekula hogyan kapcsolódjon a már meglévő molekulához.*

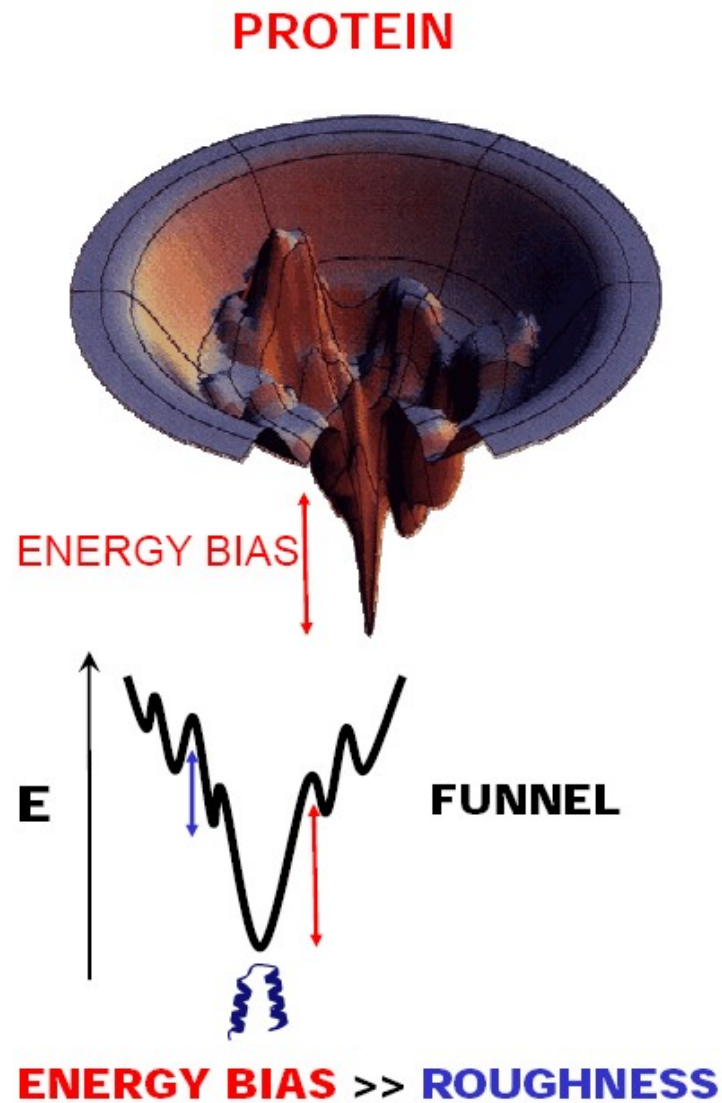
Molekula modellezés

- A dokkolás is egy optimalizációs probléma*
- Meg kell adni a dokkolás helyét, a pozíciót, azt, hogy mennyi lehetősége van az optimalizáló algoritmusnak változtatni a molekula helyét, helyzetét.*
- Az optimalizálás során az energiafüggvényt egy tölcsérként kell elképzelni.*
- A cél az hogy egy kiindulási energiaszintről egy alacsonyabba, lehetőleg a legalacsonyabba jussunk.*

Molekula modellezés



Molekula modellezés



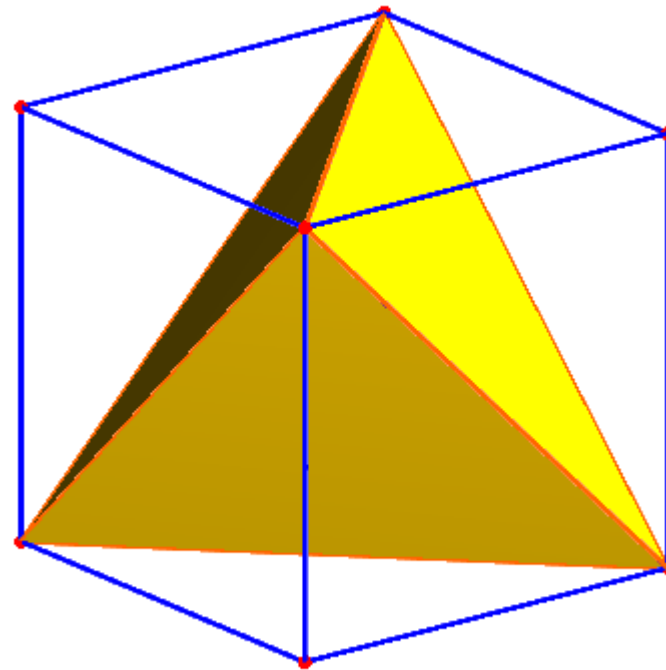
Molekula modellezés

- *Szoftverek:*
 - *Gaussian03*
 - *Gaussview*
 - *Visual Molekular Dynamics*
 - *AutoDock 4.01*
 - *Autodocktools*

Térgeometriai struktúrák modellezése

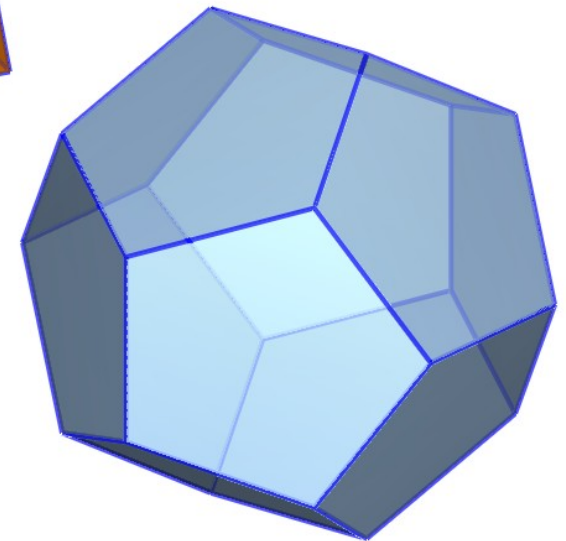
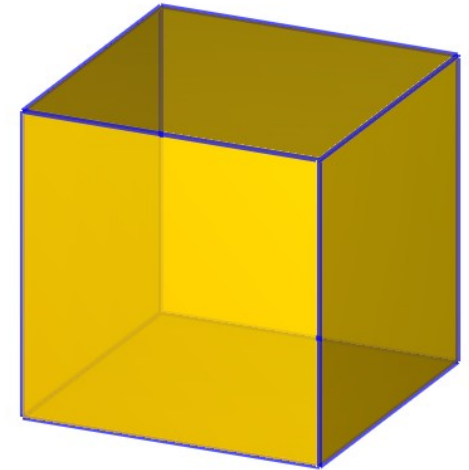
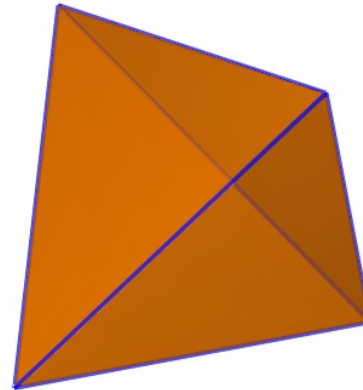
Térgeometriai struktúrák modellezése

- *Poliéderek*
- *Transzformációk*
- *Parkettázás*
- *Euler3D*



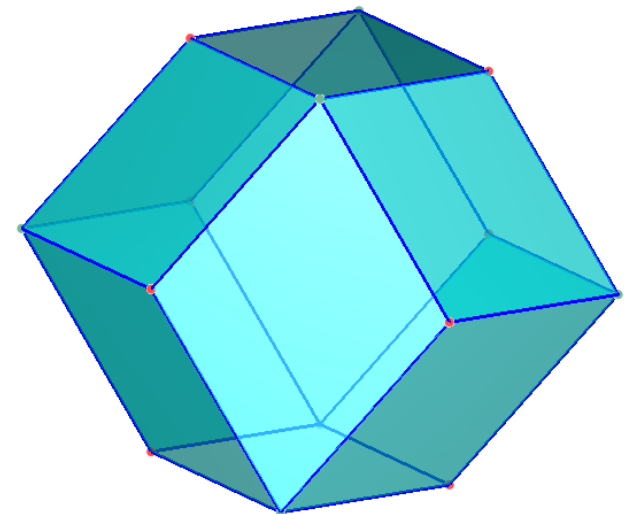
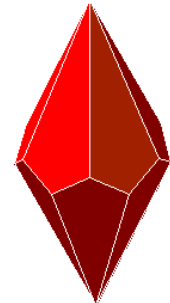
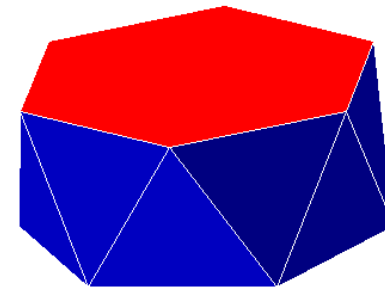
Térgeometriai struktúrák modellezése

- Szabályos poliéderek:
 - konvex
 - élei egyenlő hosszúak
 - élszögei egyenlőek
 - lapszögei egyenlőekvagy
 - lapjai szabályosak
 - lapjai egybevágók
 - testszögletei szabályosak
 - testszögletei egybevágók



Térgeometriai struktúrák modellezése

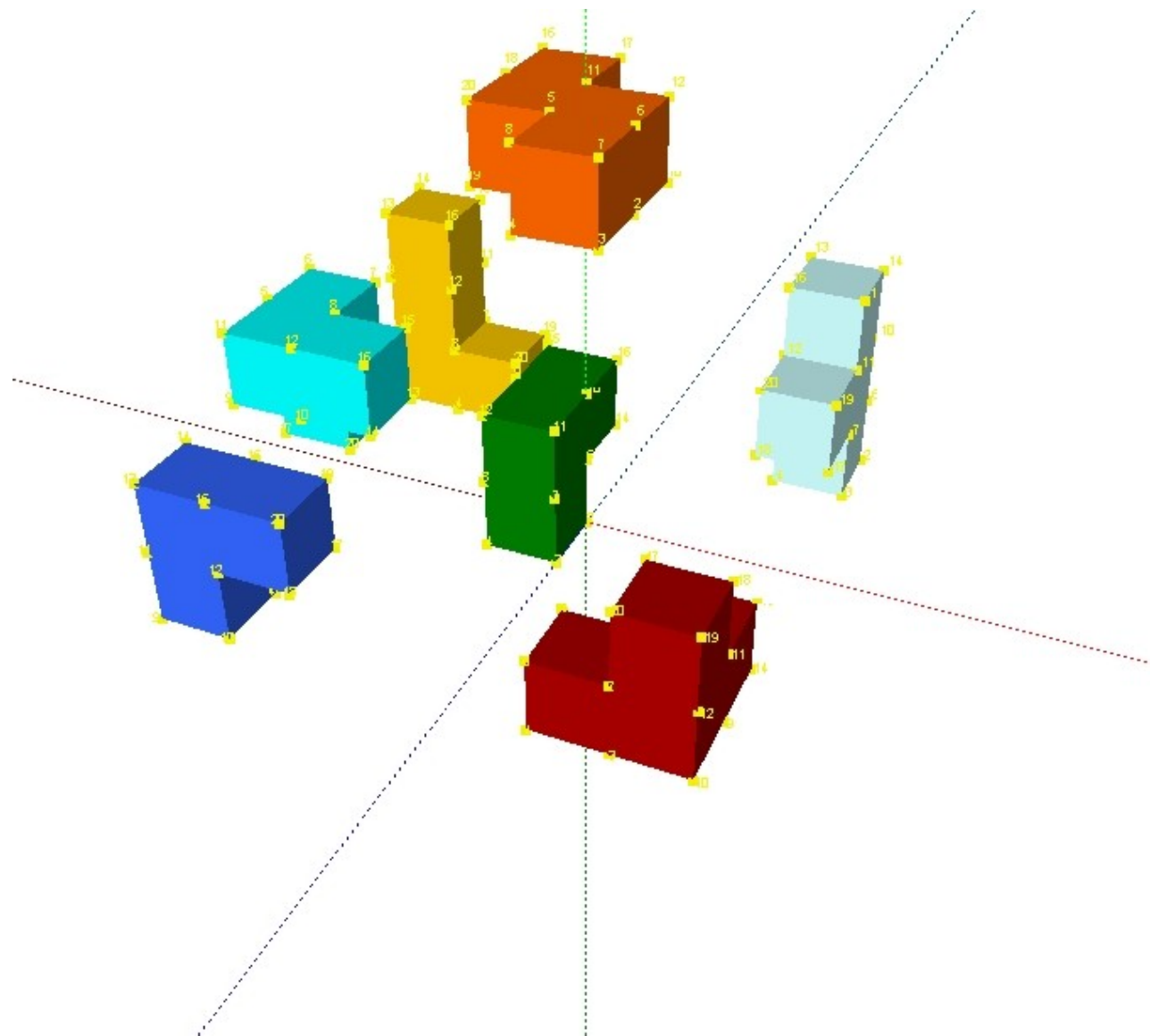
- Félig szabályos poliéderek:
 - konvex
 - lapjai szabályosak
 - testszögletei egybevágók
 - csúcs-tranzitívvagy
 - konvex
 - lapjai egybevágók
 - testszögletei szabályosak
 - lap-tranzitív



Térgeometria struktúrák modellezése

- *Egy szabályos vagy félig szabályos poliéder előállítható, ha az egyetlen lapját transzformációval másoljuk*
 - *Forgatás*
 - *Tükrözés*
 - *Eltolás*

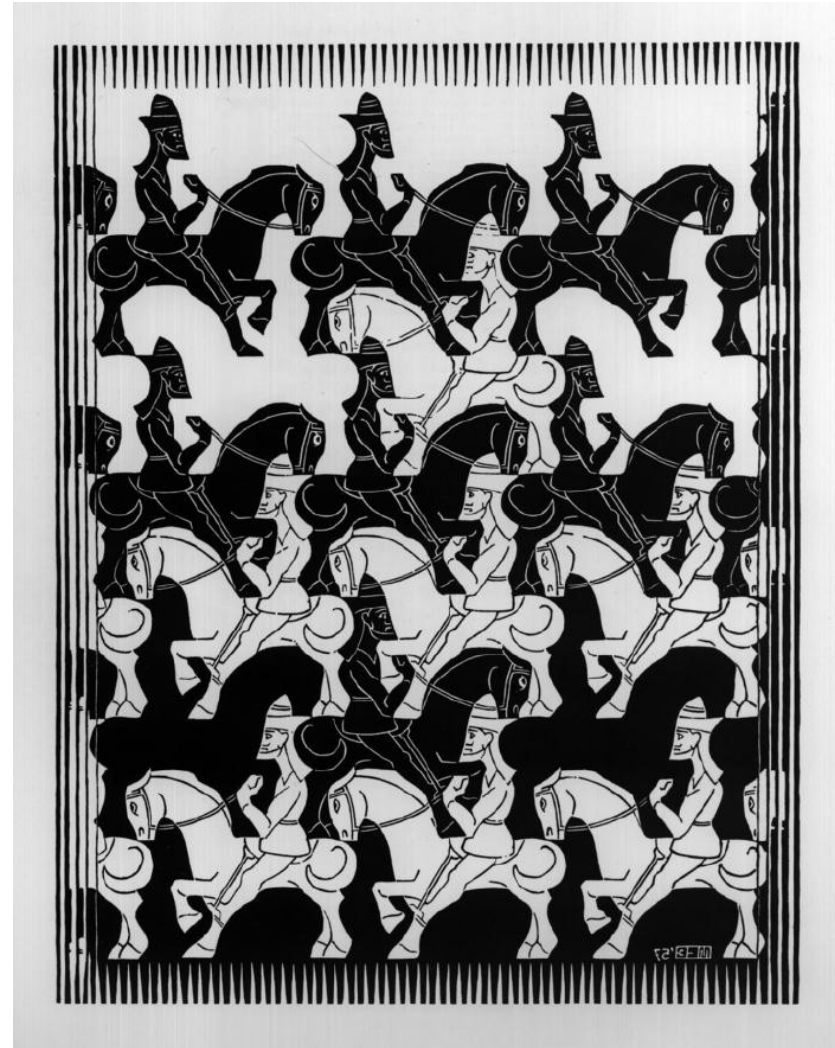
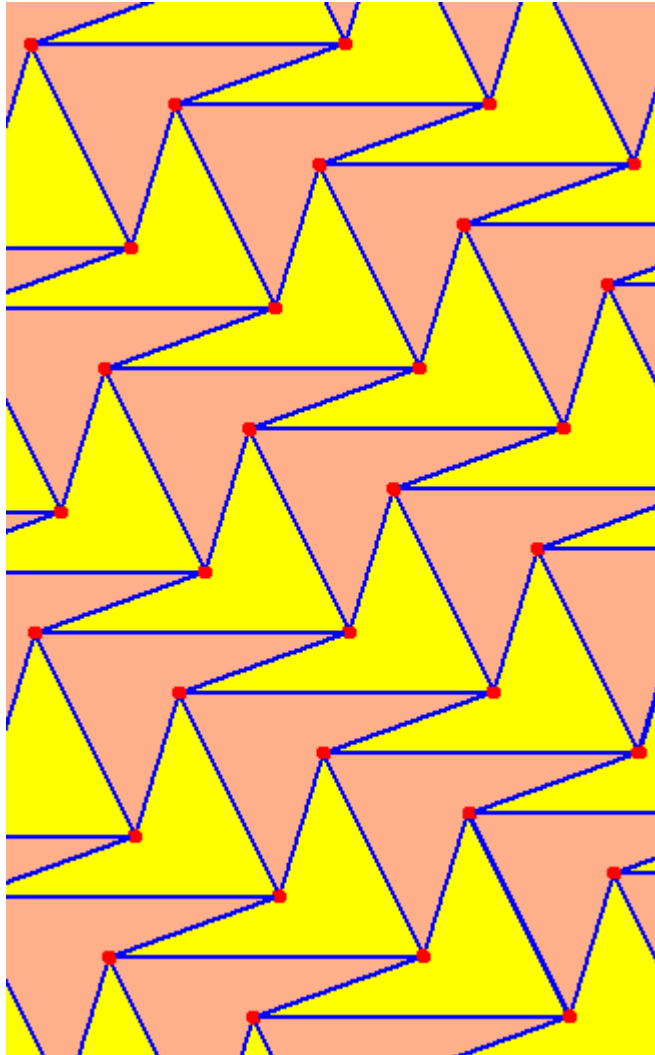
Térgeometriai struktúrák modellezése



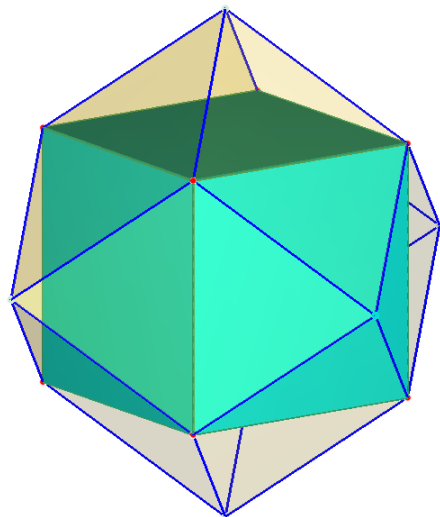
Térgeometriai struktúrák modellezése

- *Térkitöltés:*
 - *a szabályos sokszögek közül a háromszöggel, négyzettel és a szabályos hatszöggel kiparkettázható a sík*
 - *nem csak szabályos sokszögeket használhatunk*
 - *egy poliéderrel kiparkettázható a tér, ha visszavezethető a kockára*

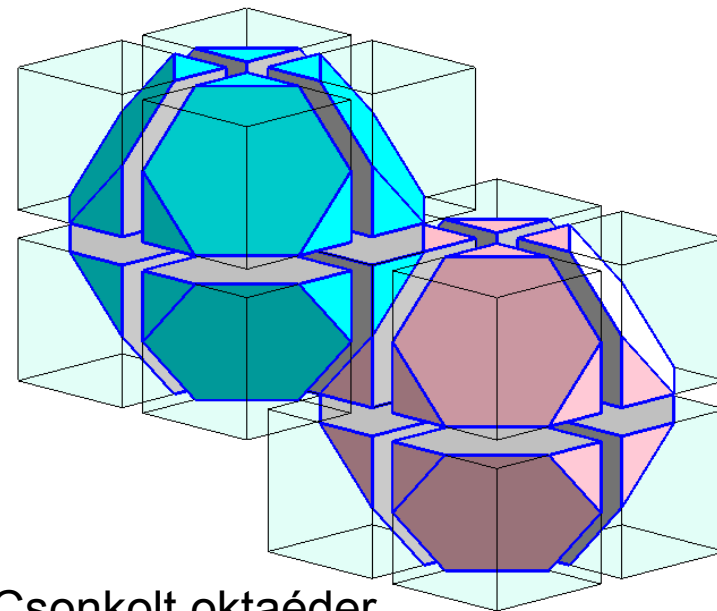
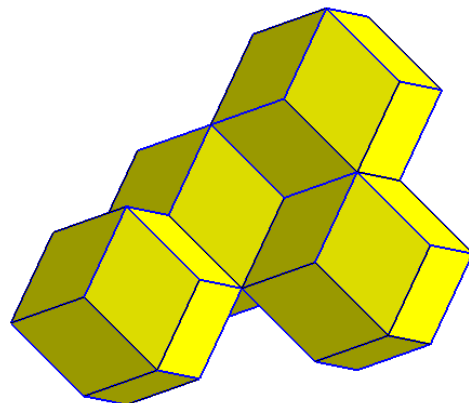
Térgeometriai struktúrák modellezése



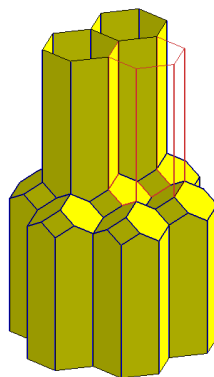
Térgeometriai struktúrák modellezése



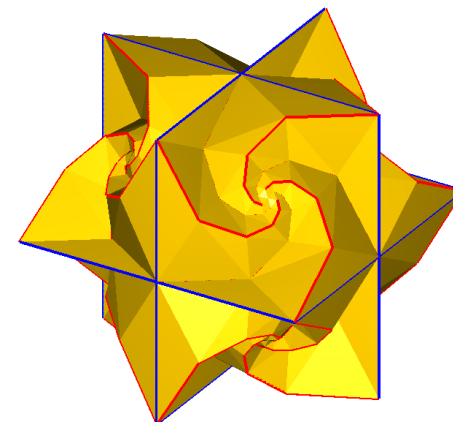
Romb-dodekaéder



Csonkolt oktaéder



Méhsejt modell



Térgeometriai struktúrák modellezése

- *Az Euler3D programmal térbeli poliédereket modellezhetünk*
- *A programmal poligonokat rajzolhatunk a térbe, és így akár poliédereket is rajzolhatunk*
- *A programban a poligonokat pontjaival adhatjuk meg*
- *Szabályos vagy félig szabályos poliédereket megadhatunk az egyik oldalának transzformáltjaival.*

Térgeometriai struktúrák modellezése

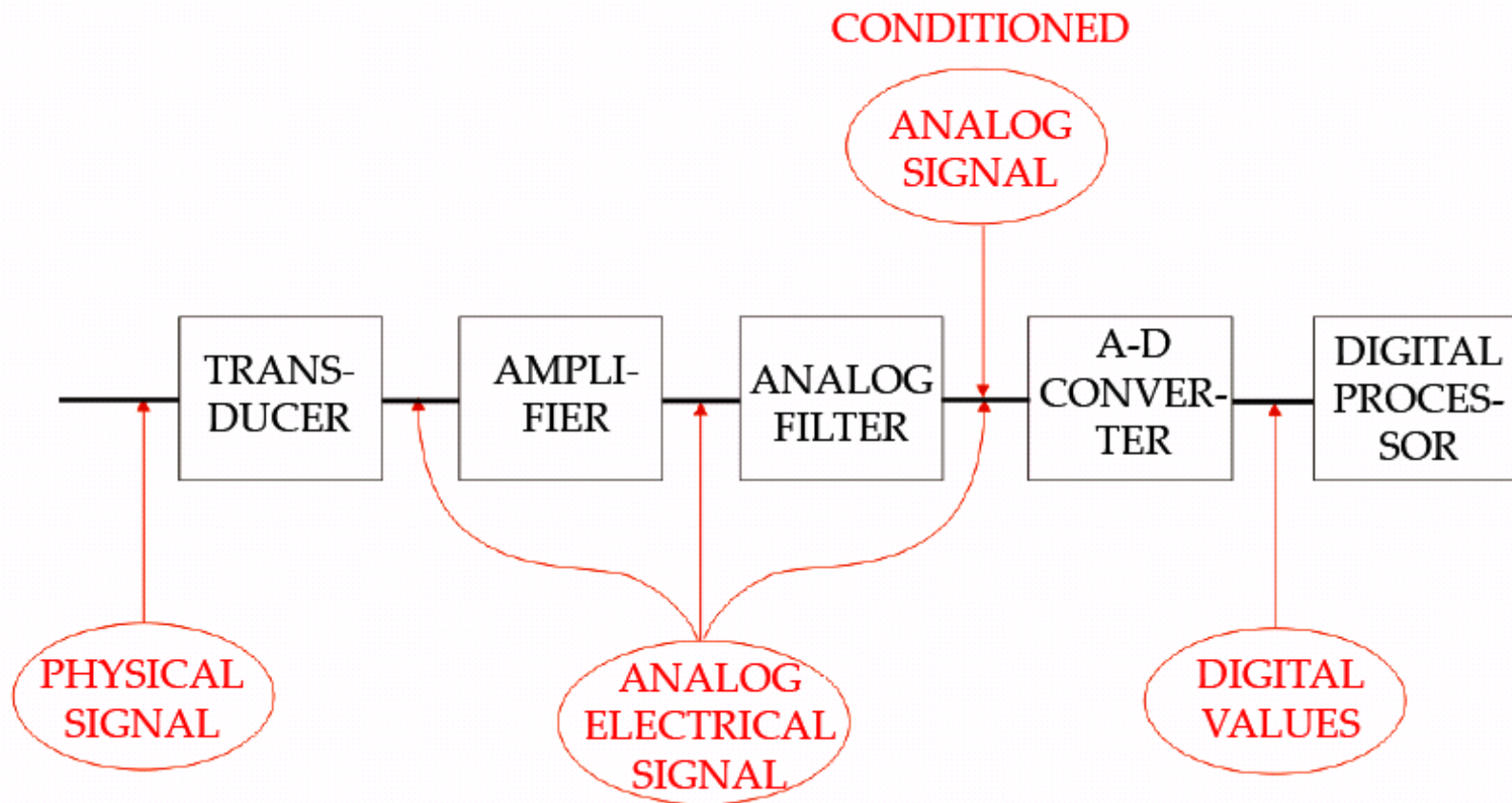
- *Euler3D*
 - *Ingyenes, magyar fejlesztésű alkalmazás poliéderek szerkesztésére és vizsgálatára*
 - *Transzformációk*
 - *Megjelenítés*
 - *Pontokat kell megadni, poliédereket, szakaszokat a pontok alapján lehet megadni*
 - *Kicsi, de hasznos*

Számítógéppel segített méréstechnika

Számítógéppel segített méréstechnika

- *Fizikai mennyiségeket szeretnénk mérni*
- *A mérő berendezések csak elektromos mennyiségeket tudnak mérni*
- *A nem-villamos mennyiségeket át kell alakítani villamos mennyiségekké*
- *Az adatokat rögzíteni kell és fel kell dolgozni*

Számítógéppel segített méréstechnika



Számítógéppel segített méréstechnika

- *Adatok:*
 - *Periódikusak*
 - *Nem-periódikusak*
- *Adatok feldolgozása:*
 - *Jellemzők vagy esetleg bizonyos frekvenciák szűrése az adatokból*

Számítógéppel segített méréstechnika

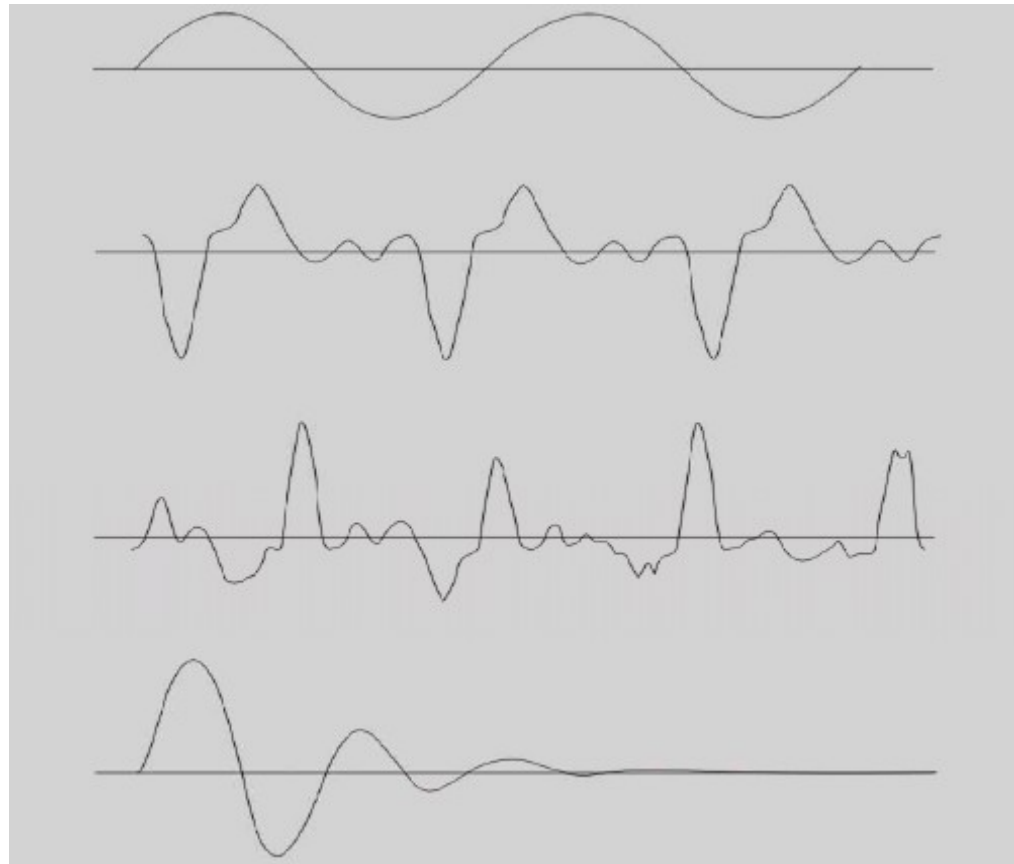
- *Determinisztikus adatok:*

Harmonikus

Periódikus

Kvázi-periódikus

Lecsengő



Számítógéppel segített méréstechnika

- *Nem-determinisztikus adatok*

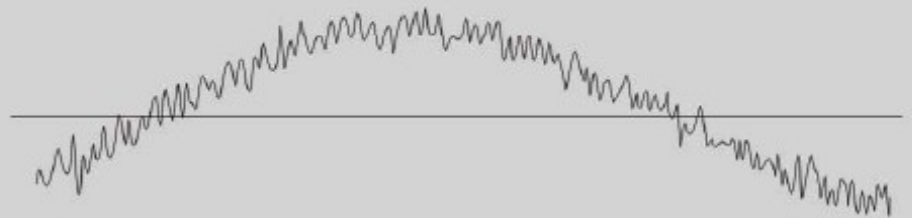
Stacionárius



Nem stacionárius
(változó teljesítmény)



Nem stacionárius
(változó középérték)



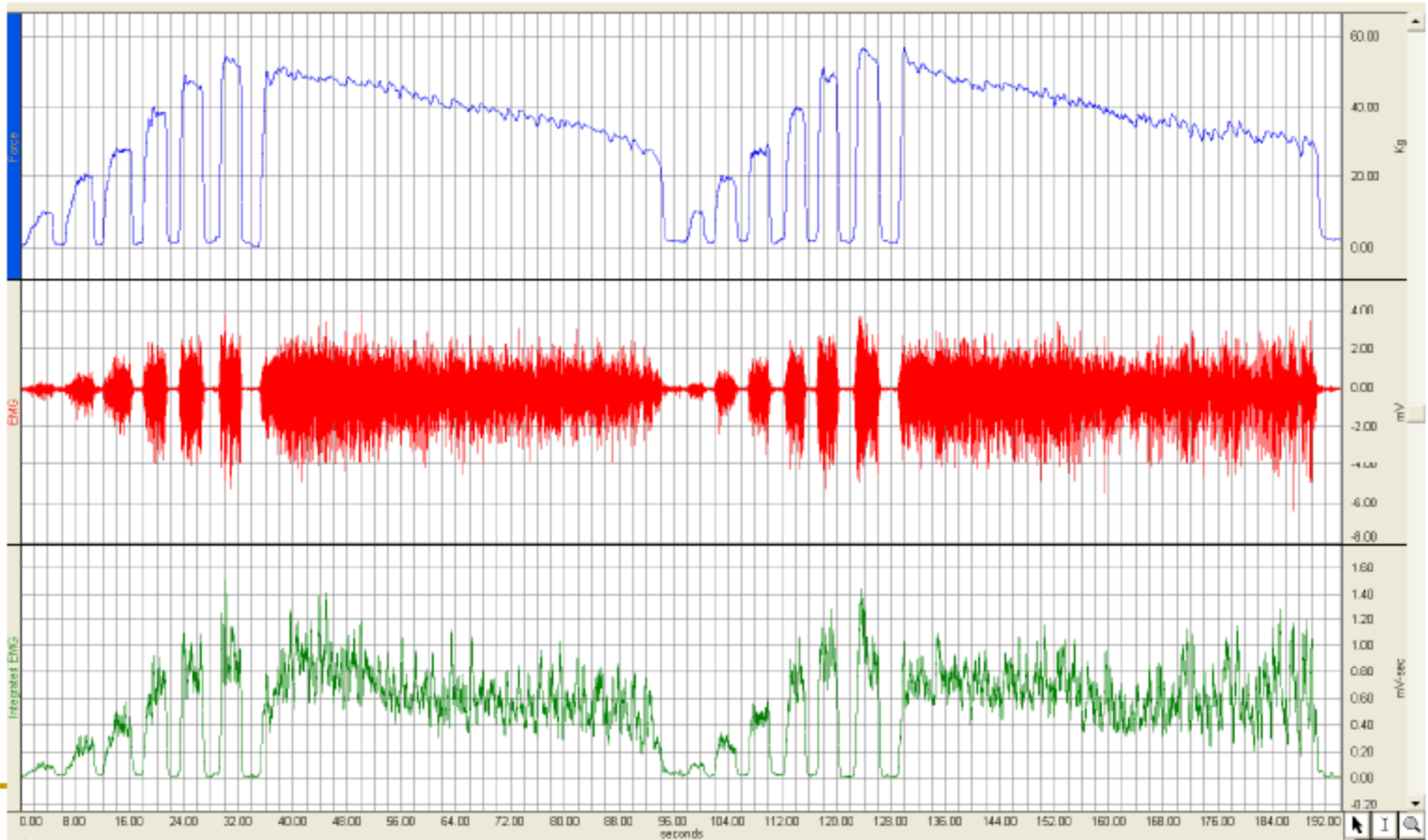
Számítógéppel segített méréstechnika

- *Mire kell figyelni?*
 - *Kalibrálni kell a műszert mérés előtt*
 - *Kellően sűrű mintavételezés*
 - *A mérőműszer (és szoftver) paramétereit helyesen
legyenek beállítva*
 - *Elegendő adat felvétele*
 - *Minél pontosabb feldolgozás és kiértékelés*

Számítógéppel segített méréstechnika



Számítógéppel segített méréstechnika



Matematikai és vizualizációs csomagok

Matematika és vizualizációs csomagok

- *Mathematica 6 (Wolfram)*
 - *Dokumentáció készítés*
 - *Számítások elvégzése a dokumentumon belül*
 - *Grafikonok, diagramok*
 - *Formázás (stílusok)*
 - *Matematikus szemlélet a programozó szemlélettel szemben*

***Statisztikai szoftverek,
biostatisztika***

Statisztikai szoftverek, biostatisztika

- *Miért fontos?*
 - *Adatokat gyűjtünk betegekről (vagy bármi másról)*
 - *A túl sok adat feldolgozhatatlan*
 - *Az adatból mintát veszünk, és a minta alapján próbálunk meg következtetni az adathalmaz egészére*
 - *A mintának reprezentatívnak kell lennie*
 - *A feldolgozott adatok összefüggést mutathatnak bizonyos jellemzők között*
 - *Betegségek időben történő felismerése*
 - *Terápia hatékonyságának jellemzése*

Statisztikai szoftverek, biostatisztika

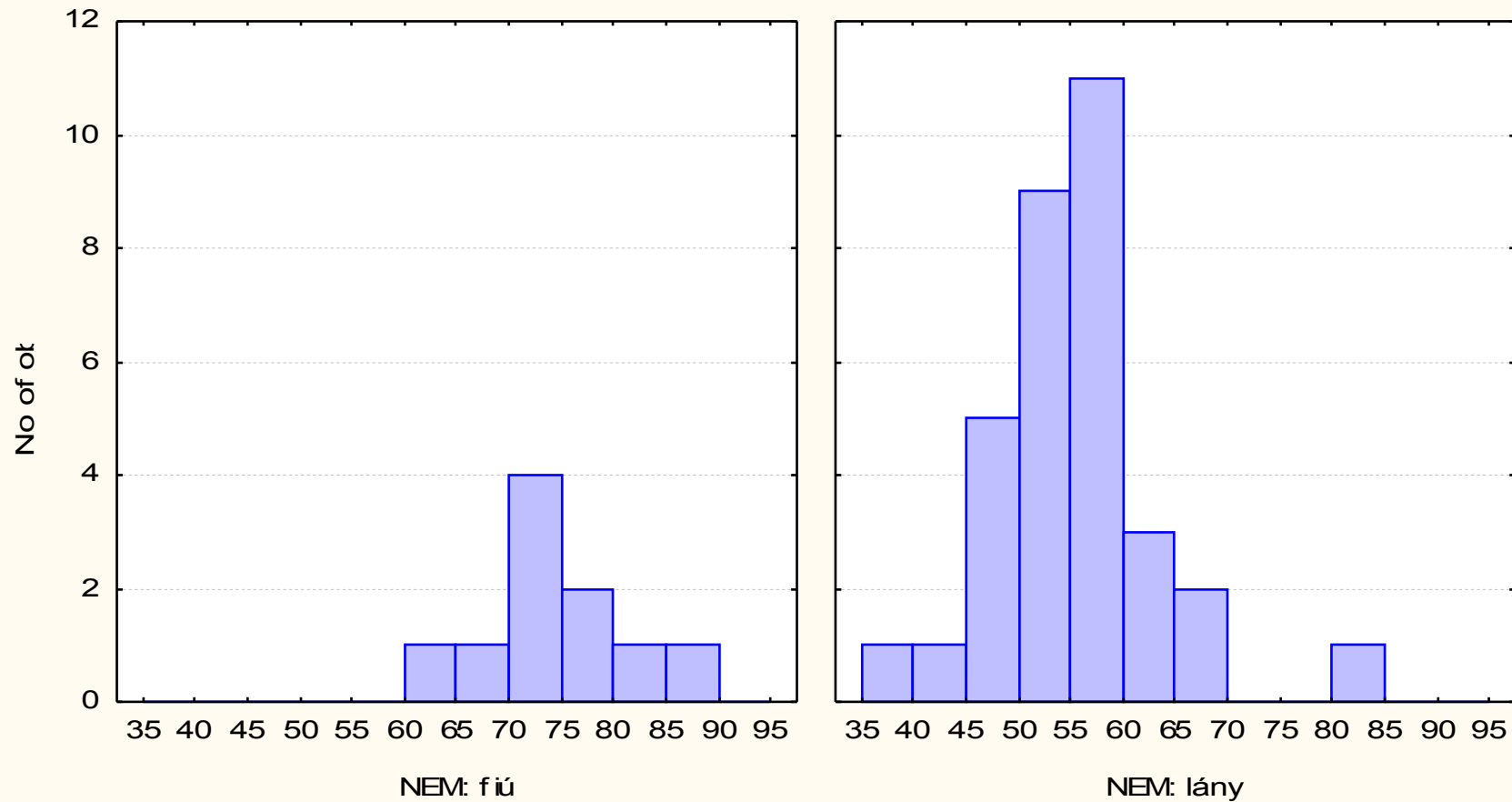
- *Várható érték*
- *Szórás*
- *Eloszlás*
- *Adatok transzformációja*
- *Középértékek*
- *Statisztikai becslés*
- *Statisztikai próbák*

Statisztikai szoftverek, biostatisztika

- *A statisztika szoftverek nagy segítséget nyújtanak az adatok feldolgozásában*
- *Bonyolult matematikai számítások gyorsan végrehajthatók*
- *Az eredmények megjelenítése dokumentálható formában*
 - *Diagramok*
 - *Nem mindegy, hogy milyen reprezentációhoz milyen diagramot választunk (kategórikus adat, folytonos adat)*

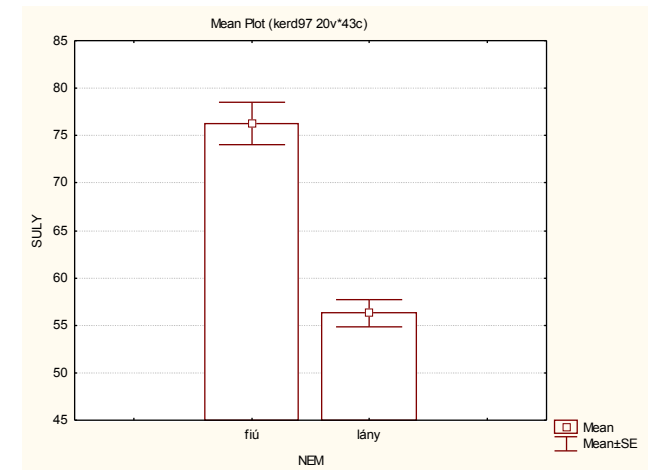
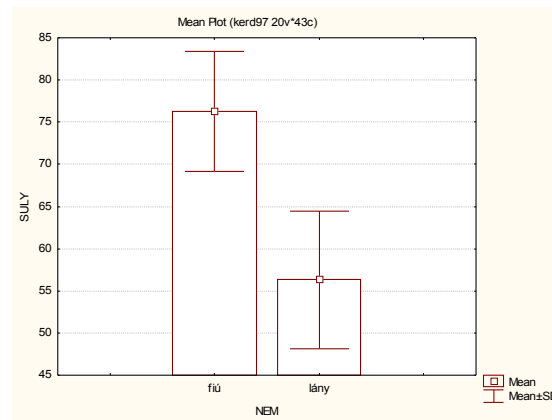
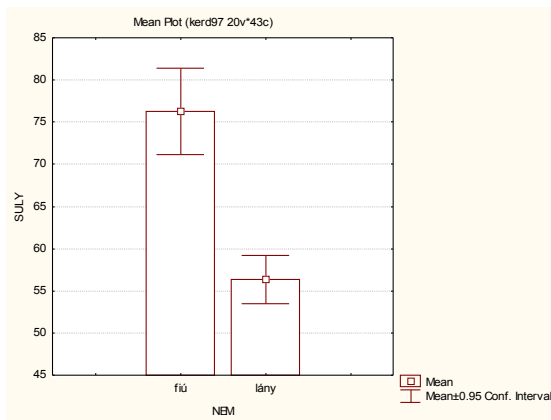
Statisztikai szoftverek, biostatisztika

Histogram (kerd97.STA 20v*43c)

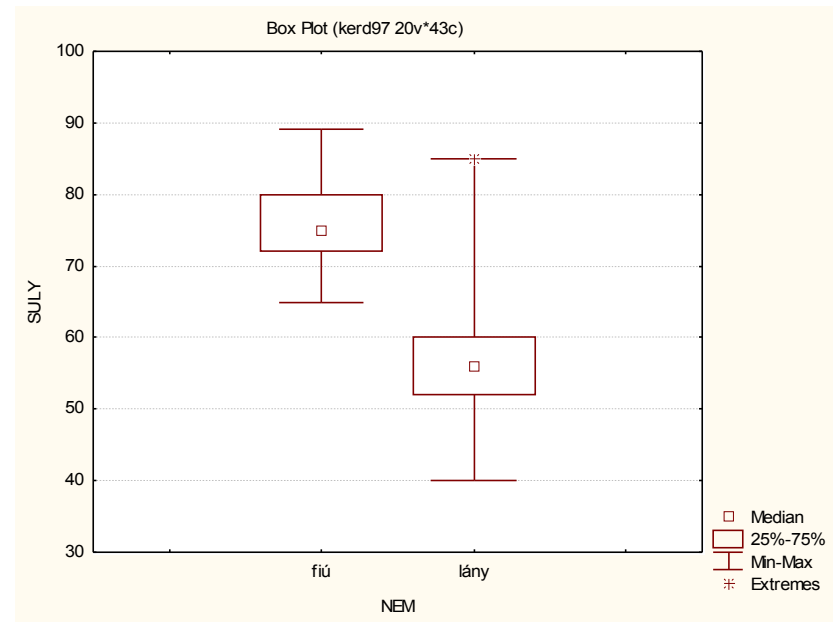
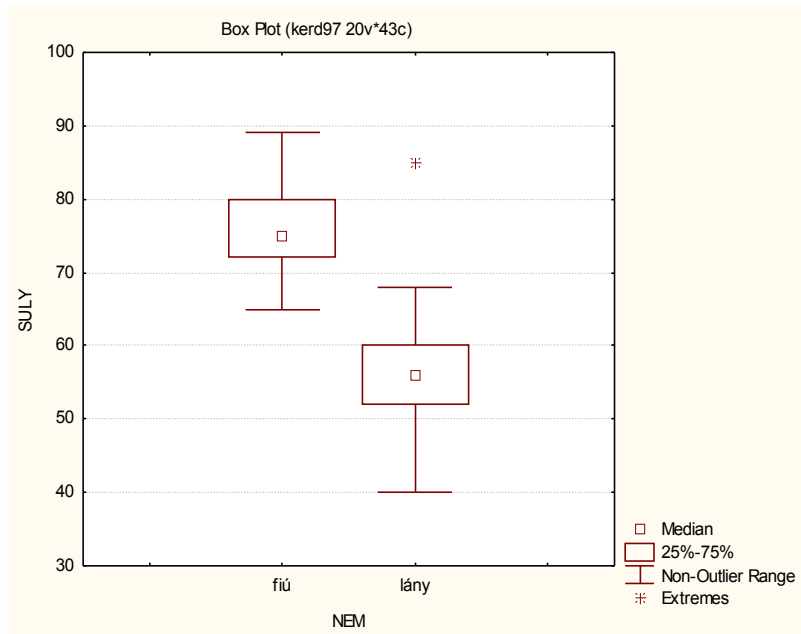


SULY

Statisztika szoftverek, biostatisztika



Statisztikai szoftverek, biostatisztika



Szoftvergyűjtemény

http://ngweb.atw.hu/science/modelling_softwares.html

Köszönöm a figyelmet!