

PA081: Programování numerických výpočtů

11. Simulace dynamických dějů

jaro 2011

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

Model interakce molekul

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ dvě molekuly
 - ▶ pevná, velká – **receptor**
 - ▶ menší, pohyblivá – **ligand**
- ▶ pohyblivou molekulu ovládáme
 - ▶ myš a klávesnice, zařízení silové zpětné vazby
- ▶ molekuly silově interagují
 - ▶ přitažlivé i odpudivé síly
 - ▶ každý atom s každým
- ▶ význam
 - ▶ nalezení místa, kde si ligand „sedne“
 - ▶ pochopení vlastností interakce v okolí
- ▶ simulace musí působit důvěryhodně
 - ▶ co nejdokonalejší iluze manipulace s reálnými objekty

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ vyvinula se z teleoperátorů
 - ▶ manipulace na dálku, např. v nebezpečném prostředí
 - ▶ manipulace s virtuálním prostředím
- ▶ impedanční (odporové)
 - ▶ zařízení snímá polohu, případně rychlost
 - ▶ působí vypočtenou silou
 - ▶ modelovaný systém je vyjádřen jako „odpor“ – silová reakce systému na změnu polohy
- ▶ admitanční (vodivostní)
 - ▶ zařízení snímá silové působení
 - ▶ přesune se do vypočtené polohy
 - ▶ modelovaný systém je vyjádřen jako „vodivost“ – ochota systému reagovat na vnější silové působení

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ v ideálním případě lze modelovat vše obojím
 - ▶ vstupují nedokonalosti zařízení
 - ▶ prakticky jsou impedanční zařízení lepší v modelu, kde převládá aktivita operátora

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ v ideálním případě lze modelovat vše obojím
 - ▶ vstupují nedokonalosti zařízení
 - ▶ prakticky jsou impedanční zařízení lepší v modelu, kde převládá aktivita operátora
- ▶ hmat má výrazně nižší latenci než zrak
- ▶ nutná obnovovací frekvence 1 kHz
- ▶ vysoká náročnost na numerické vyhodnocení modelu

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

Přímé mapování síly

- ▶ model je de facto statický
 - ▶ vstup (souřadnice zařízení) jsou přímo promítnuty do modelu
 - ▶ na jejich základě je vypočtena silová interakce interakce
 - ▶ síla je opět přímo aplikována na zařízení
- ▶ např. kolize dvou koulí, modelujeme tvrdou pružinou

$$F = \begin{cases} 0 & r \geq R_1 + R_2 \\ k(R_1 + R_2 - r) & r < R_1 + R_2 \end{cases}$$

Zařízení silové
zpětné vazbyPřímé
mapování síly
vs. dynamikaFyzikálně
věrné modelyMetody
integraceSimulace
pevného tělesaSilové
interakce
molekulProměnlivé
tvary molekul

Přímé mapování síly

- ▶ model je de facto statický
 - ▶ vstup (souřadnice zařízení) jsou přímo promítnuty do modelu
 - ▶ na jejich základě je vypočtena silová interakce interakce
 - ▶ síla je opět přímo aplikována na zařízení
- ▶ např. kolize dvou koulí, modelujeme tvrdou pružinou

$$F = \begin{cases} 0 & r \geq R_1 + R_2 \\ k(R_1 + R_2 - r) & r < R_1 + R_2 \end{cases}$$

- ▶ jednoduché, přehledné, ale takhle reálný svět nefunguje
 - ▶ veškeré dynamické chování (tj. jaký je efekt aplikované síly) jsme z modelu vyloučili
 - ▶ zejména nedokážeme modelovat různé hmotnosti kolidujících objektů
 - ▶ dynamicky se chová fyzické zařízení atd., ale to nestačí
- ▶ nezatrácujeme úplně, na některé aplikace stačí

Zařízení silové
zpětné vazbyPřímé
mapování síly
vs. dynamikaFyzikálně
věrné modelyMetody
integraceSimulace
pevného tělesaSilové
interakce
molekulProměnlivé
tvary molekul

- ▶ „virtual coupling“
- ▶ manipulovaný objekt je k zařízení připojen viskoelastickým spojem
- ▶ paralelní pružina a tlumič

$$F = k\Delta\mathbf{x} + b\Delta\mathbf{v}$$

- ▶ silová zpětná vazba
 - ▶ jakou silou má zařízení působit na operátora
- ▶ vstup pro model
 - ▶ jak působí operátor na manipulovaný virtuální objekt
- ▶ tj. 3. Newtonův zákon v praxi

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ cílem je modelovat virtuální svět
- ▶ ne vše se v takovém světě chová podle očekávání
 - ▶ nemusíme mít ani odpovídající zkušenost
- ▶ chování modelu nemůže být zcela překvapivé
- ▶ musí odpovídat základním zkušenostem z reálného světa
- ▶ ty jsou vyjádřeny elementárními fyzikálními zákony
- ▶ platí obecně pro jakékoli modelování

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ Newtonovy zákon, zejména druhý:

$$F = ma$$

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ Newtonovy zákon, zejména druhý:

$$F = ma$$

- ▶ 1. termodynamický zákon

Celková energie izolovaného systému zůstává konstantní.

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ Newtonovy zákon, zejména druhý:

$$F = ma$$

- ▶ 1. termodynamický zákon

Celková energie izolovaného systému zůstává konstantní.

- ▶ 2. termodynamický zákon

Entropie izolovaného systému nikdy neklesá.

- ▶ vnímání spontánní změny, vnímání času
- ▶ každý systém má tendenci „zbavit se“ své energie
- ▶ <http://secondlaw.oxy.edu>

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

Kinematika a dynamika hmotného bodu

Opakování středoškolské fyziky

PA081:
Programování
numerických
výpočtů

- ▶ rovnoměrný pohyb $x = vt$
- ▶ rovnoměrně zrychlený pohyb $v = at$
- ▶ obecněji (nerovnoměrný pohyb, vektorové vyjádření)

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \quad \mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt}$$

- ▶ spolu s 2. Newtonovým zákonem a zavedením hybnosti $\mathbf{P} = m\mathbf{v}$ dostaneme pohybové rovnice

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{P}}{m} \quad \dot{\mathbf{P}} = \frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mathbf{F}$$

- ▶ postupné řešení (integrace) v ubíhajícím čase je simulace chování systému

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

Kinematika a dynamika hmotného bodu

Příklad – pružinový oscilátor

- ▶ hmotný bod na pružině, pohyb jen v jednom směru
 - ▶ vše ostatní zanedbáno
- ▶ pohybové rovnice

$$\frac{dy}{dt} = \frac{P}{m} \quad \frac{dP}{dt} = -ky$$

- ▶ vede na diferenciální rovnici

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \frac{k}{m}y = 0$$

- ▶ řešením v $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ je funkce

$$y(t) = c_1 \sin \sqrt{\frac{k}{m}}t + c_2 \cos \sqrt{\frac{k}{m}}t$$

- ▶ c_1, c_2 vyplývají z počátečních podmínek

Metody integrace

- ▶ ne vždy lze řešit pohybové rovnice analyticky
- ▶ nemožné, když na proces působí uživatelský vstup
- ▶ řešíme numerickou integrací

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

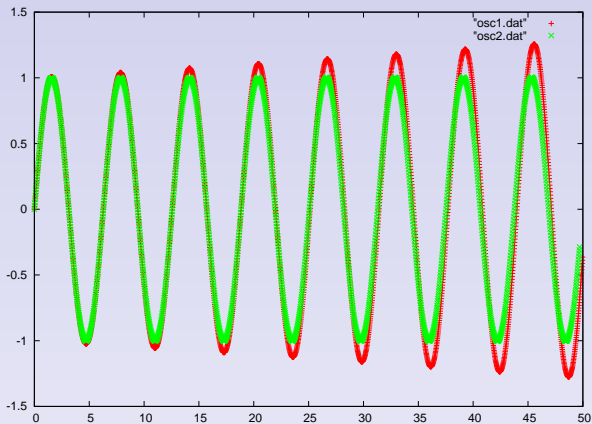
```
main(int argc, char ** argv)
{
    float    km = 1, p = 1, y = 0, t = 0,
            dt = atof(argv[1]);
    int      i, max = 50*km/dt;

    for (i=0; i<max; i++) {
        float p1 = p - km*y*dt,
              y1 = y + p*dt;

        printf("%f %f\n", t, y);
        t += dt;
        p = p1; y = y1;
    }
}
```


Metody integrace

Něco je špatně



$\Delta t = 0.0001$ (zelená), $\Delta t = 0.01$ (červená)

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

Metody integrace

Eulerova dopředná

- ▶ řešíme rovnici (resp. systém rovnic)

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t))$$

- ▶ počítáme posloupnost

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \left. \frac{dy}{dt} \right|_{t_n}$$

- ▶ explicitní metoda

- ▶ k výpočtu dalšího kroku známe vše potřebné

- ▶ $\sin x$ je ideálně nešikovná funkce

- ▶ pro $x \in [0, \pi]$ je $\sin x > 0$ a je konvexní, pro $x \in [\pi, 2\pi]$ je $\sin x < 0$ a je konkávní
 - ▶ použitá derivace vždy nadhodnocuje
 - ▶ výpočet do systému přidává energii

- ▶ pružinový oscilátor je velmi typickou komponentou modelovaných systémů

Zařízení silové
zpětné vazbyPřímé
mapování síly
vs. dynamikaFyzikálně
věrné modelyMetody
integraceSimulace
pevného tělesaSilové
interakce
molekulProměnlivé
tvary molekul

Metody integrace

Eulerova zpětná

- ▶ použijeme derivaci až v bodě t_{n+1}

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \left. \frac{dy}{dt} \right|_{t_{n+1}}$$

- ▶ dosazením vede na řešení rovnice

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t f(t_{n+1}, y_{n+1}))$$

- ▶ implicitní metoda
 - ▶ pro výpočet dalšího kroku musíme řešit rovnici nebo systém rovnic
 - ▶ obecně nemusí být triviální

Metody integrace

Eulerova zpětná

- ▶ pro pružinový oscilátor

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{m} p_{n+1}$$

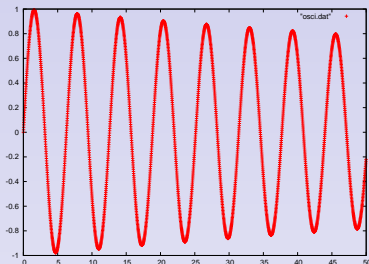
$$p_{n+1} = p_n - \Delta t k y_{n+1}$$

- ▶ jednoduchý systém lineárních rovnic
- ▶ řešení lze vyjádřit analyticky a naprogramovat

Metody integrace

Eulerova zpětná

- ▶ výstup pro $\Delta t = 0.01$



- ▶ metoda také není numericky stabilní
- ▶ má sklon systém tlumit
 - ▶ pro simulace v principu vyhovuje
 - ▶ nutné řešení systému rovnic v každém kroku může být problém
- ▶ stabilní metody samozřejmě existují
 - ▶ příliš komplikované pro naše použití

- ▶ hmotný bod je příliš zjednodušující abstrakce
- ▶ pevné těleso
 - ▶ nenulový objem, nepodléhá žádným deformacím
- ▶ k popsání stavu systému jsou nutné další veličiny
- ▶ aktuální orientace (natočení)
 - ▶ matice 3×3 nebo kvaternion
- ▶ úhlová rychlost
 - ▶ vektor ω
 - ▶ velikost - rychlost rotace
 - ▶ směr - osa rotace
- ▶ matice (tenzor) setrvačnosti
 - ▶ analogie hmotnosti
 - ▶ prostorové rozložení hmotnosti

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

Matrice setrvačnosti a úhlová hybnost

- ▶ lineární hybnost $\mathbf{P} = m\mathbf{v}$ je relativně intuitivní veličina
- ▶ úhlová hybnost $\mathbf{L} = \mathbf{M}\boldsymbol{\omega}$ už ne
 - ▶ jednoduché vyjádření pohybové rovnice

$$\dot{\mathbf{L}}(t) = \mathbf{T}(t)$$

- ▶ analogie $\dot{\mathbf{P}}(t) = \mathbf{F}(t)$
- ▶ pro volně rotující těleso zůstává \mathbf{L} konstantní ($\boldsymbol{\omega}$ ne)
- ▶ matice setrvačnosti
 - ▶ vychází z $\mathbf{T} = \mathbf{F} \times \mathbf{r}$

$$\mathbf{M} = \sum \begin{pmatrix} m(r_y^2 + r_z^2) & -mr_x r_y & -mr_x r_z \\ -mr_y r_x & m(r_x^2 + r_z^2) & -mr_y r_z \\ -mr_z r_x & -mr_z r_y & m(r_x^2 + r_y^2) \end{pmatrix}$$

- ▶ závisí na aktuální orientaci
- ▶ více viz <http://www.cs.cmu.edu/~baraff/sigcourse/>

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

Pohybové rovnice pevného tělesa

- ▶ stavový vektor $\mathbf{y} = (\mathbf{x}, \mathbf{q}, \mathbf{P}, \mathbf{L})^T$
 - ▶ \mathbf{x} - poloha
 - ▶ \mathbf{q} - orientace
 - ▶ \mathbf{P} - lineární hybnost (vyjadřuje rychlost)
 - ▶ \mathbf{L} - úhlová hybnost (vyjadřuje úhlovou rychlost)
- ▶ rovnice

$$\dot{\mathbf{y}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m}\mathbf{P} \\ \frac{1}{2}\omega_q\mathbf{q} \\ \mathbf{F} \\ \mathbf{T} \end{pmatrix}$$

- ▶ úhlovou rychlost ω vypočteme

$$\omega = \mathbf{q}(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{q}^{-1}(\mathbf{L}))$$

- ▶ ω_q je vnoření ω do prostoru kvaternionů

Zařízení silové
zpětné vazbyPřímé
mapování síly
vs. dynamikaFyzikálně
věrné modelyMetody
integraceSimulace
pevného tělesaSilové
interakce
molekulProměnlivé
tvary molekul

- ▶ složitější stabilní metody nestihneme spočítat
- ▶ dopředná Eulerova metoda nevyhovuje - nestabilní simulace
- ▶ zpětná Eulerova metoda vyžaduje řešení systému nelineárních rovnic

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t \dot{\mathbf{y}}_{n+1}$$

- ▶ semiimplicitní metoda (Ostaduy, 2005)

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

**Simulace
pevného tělesa**

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

Integrace pohybové rovnice

- ▶ časovou derivaci $\dot{\mathbf{y}}$ chápeme jako **funkci $\mathbf{f}(\mathbf{y})$**
- ▶ Taylorův rozvoj

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}_{n+1}) = \mathbf{f}(\mathbf{y}_n) + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}_n} (\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n) + \dots$$

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

**Simulace
pevného tělesa**

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

Integrace pohybové rovnice

- ▶ časovou derivaci $\dot{\mathbf{y}}$ chápeme jako **funkci $\mathbf{f}(\mathbf{y})$**
- ▶ Taylorův rozvoj

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}_{n+1}) = \mathbf{f}(\mathbf{y}_n) + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}_n} (\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n) + \dots$$

- ▶ zanedbáme nelineární členy a dosadíme do zpětné metody

$$\left(I - \Delta t \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}_n} \right) (\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n) = \Delta t \dot{\mathbf{y}}_n$$

- ▶ systém lineárních rovnic pro $(\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n)$

Zařízení silové
zpětné vazbyPřímé
mapování síly
vs. dynamikaFyzikálně
věrné modelyMetody
integraceSimulace
pevného tělesaSilové
interakce
molekulProměnlivé
tvary molekul

Integrace pohybové rovnice

- ▶ časovou derivaci $\dot{\mathbf{y}}$ chápeme jako **funkci $\mathbf{f}(\mathbf{y})$**
- ▶ Taylorův rozvoj

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}_{n+1}) = \mathbf{f}(\mathbf{y}_n) + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}_n} (\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n) + \dots$$

- ▶ zanedbáme nelineární členy a dosadíme do zpětné metody

$$\left(I - \Delta t \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}_n} \right) (\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n) = \Delta t \dot{\mathbf{y}}_n$$

- ▶ systém lineárních rovnic pro $(\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n)$
- ▶ musíme spočítat Jakobián $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}$
 - ▶ v čase n , nikoli $n + 1$, proto semiimplicitní metoda
 - ▶ Otaduy vyjadruje analyticky - omezené použití
 - ▶ automatické derivování (příště)

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

Silové interakce molekul

- ▶ molekulu ligandu modelujeme jako pevné těleso
 - ▶ vzájemná poloha atomů se nemění
 - ▶ hmotnosti atomů koncentrovány v jádrech → matice setrvačnosti
 - ▶ silová interakce atomu vždy působí v místě jádra

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ molekulu ligandu modelujeme jako pevné těleso
 - ▶ vzájemná poloha atomů se nemění
 - ▶ hmotnosti atomů koncentrovány v jádrech → matice setrvačnosti
 - ▶ silová interakce atomu vždy působí v místě jádra
- ▶ van der Waalsova - LJ potenciál

$$F_{LJ} = -\frac{12A}{r^{13}} + \frac{6B}{r^7}$$

- ▶ elektrostatická

$$F_{el} = \epsilon \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ molekulu ligandu modelujeme jako pevné těleso
 - ▶ vzájemná poloha atomů se nemění
 - ▶ hmotnosti atomů koncentrovány v jádrech → matice setrvačnosti
 - ▶ silová interakce atomu vždy působí v místě jádra
- ▶ van der Waalsova - LJ potenciál

$$F_{LJ} = -\frac{12A}{r^{13}} + \frac{6B}{r^7}$$

- ▶ elektrostatická

$$F_{el} = \epsilon \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

- ▶ $n \approx 10^4$ atomů receptoru, $m \approx 100$ atomů ligandu
- ▶ $m \times n$ interakcí nespočítáme $1000\times$ za vteřinu

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ předvýpočet potenciálu na mřížce
 - ▶ běžně používáno v chemickém software
 - ▶ interpolace příliš vyhladí strmé stěny

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ předvýpočet potenciálu na mřížce
 - ▶ běžně používáno v chemickém software
 - ▶ interpolace příliš vyhladí strmé stěny
- ▶ díky vysokým exponentům relativně krátký dosah
- ▶ můžeme si dovolit ořez
 - ▶ uvažujeme pouze dvojice atomů o vzájemné vzdálenosti menší než daná konstanta
 - ▶ typicky 4–8 Å
- ▶ vypočítat $m \times n$ vzdáleností dvojic atomů je pořád příliš

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

van der Waalsova interakce

- ▶ prostor rozdělíme na pravidelné buňky
 - ▶ tak, aby se „největší“ atom receptoru vešel do jedné buňky
 - ▶ při náhodné pozici zasahuje nanejvýš do 8 buněk
- ▶ hashovací funkce souřadnic buňky
- ▶ struktura připravená před simulací
 - ▶ projdeme všechny atomy receptoru
 - ▶ atomy, které padnou (i částečně) do buňky zařadíme do příslušného řádku

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ prostor rozdělíme na pravidelné buňky
 - ▶ tak, aby se „největší“ atom receptoru vešel do jedné buňky
 - ▶ při náhodné pozici zasahuje nanejvýš do 8 buněk
- ▶ hashovací funkce souřadnic buňky
- ▶ struktura připravená před simulací
 - ▶ projdeme všechny atomy receptoru
 - ▶ atomy, které padnou (i částečně) do buňky zařadíme do příslušného řádku
- ▶ atom ligandu uměle zvětšíme o vzdálenost ořezu
- ▶ překryje ≈ 10 –500 buněk
- ▶ uvažujeme pouze atomy receptoru v příslušných řádcích

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ i po ořezu zůstává příliš mnoho atomů receptoru
- ▶ silové působení (síla i točivý moment) jsou aditivní
- ▶ první derivace jsou také aditivní
- ▶ lze vše počítat paralelně a na závěr sečíst
- ▶ technicky používáme MPI
- ▶ musí běžet na jednom stroji nebo na velmi rychlé síti
 - ▶ vysoké nároky na latenci
 - ▶ rozeslání dat, výpočet, sesbírání výsledku za méně než 1ms

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ nízký exponent (2) – dlouhý dosah
- ▶ nelze efektivně použít ořez
- ▶ vypočítáme silové pole na mřížce
- ▶ interpolace ořezává vysoké hodnoty
 - ▶ v kombinaci s přesnou VdW interakcí to není problém
 - ▶ extrémy jsou ve stejných místech
 - ▶ VdW nedovolí tohoto stavu dosáhnout
- ▶ mřížka je příliš velká
 - ▶ $256^3 \cdot 3 \cdot 4B \approx 200MB$
 - ▶ adaptivní rozlišení mřížky

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul

- ▶ statické molekuly příliš neodpovídají realitě
 - ▶ při nenulové teplotě mění svůj tvar spontánně
 - ▶ při vzájemné interakci se ovlivňují a mění tvar
- ▶ proměnlivý receptor
 - ▶ změny tvaru nasimulovány dopředu
 - ▶ hashovací struktura se musí průběžně upravovat
 - ▶ mřížka elektrostatického pole jako 3D film - flac-like komprese
- ▶ proměnlivý ligand
 - ▶ přidání stupňů volnosti do simulace
 - ▶ vypsaná diplomová práce

Zařízení silové
zpětné vazby

Přímé
mapování síly
vs. dynamika

Fyzikálně
věrné modely

Metody
integrace

Simulace
pevného tělesa

Silové
interakce
molekul

Proměnlivé
tvary molekul