

# PA081: Programování numerických výpočtů

## 11. Simulace dynamických dějů

jaro 2012

Model  
interakce  
molekul

Zařízení silové  
zpětné vazby

Přímé  
mapování síly  
vs. dynamika

Fyzikálně  
věrné modely

Metody  
integrace

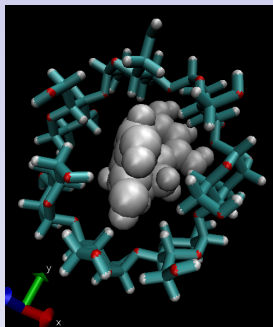
Simulace  
pevného tělesa

Silové  
interakce  
molekul

Proměnlivé  
tvary molekul

# Model interakce 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



## 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

# Zařízení silové zpětné vazby

- ▶ 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

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

# Zařízení silové zpětné vazby

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

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

# Zařízení silové zpětné vazby

- ▶ 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

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

# 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

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

Model  
interakce  
molekulZařízení 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
- ▶ neztracujeme úplně, na některé aplikace stačí

Model  
interakce  
molekulZařízení 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

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



- ▶ 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

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

- ▶ Newtonovy zákon, zejména druhý:

$$F = ma$$

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

- ▶ Newtonovy zákon, zejména druhý:

$$F = ma$$

- ▶ 1. termodynamický zákon

*Celková energie izolovaného systému zůstává konstantní.*

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

- ▶ 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>

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

# Kinematika a dynamika hmotného bodu

## Opakování středoškolské fyziky

- ▶ 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

# 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

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

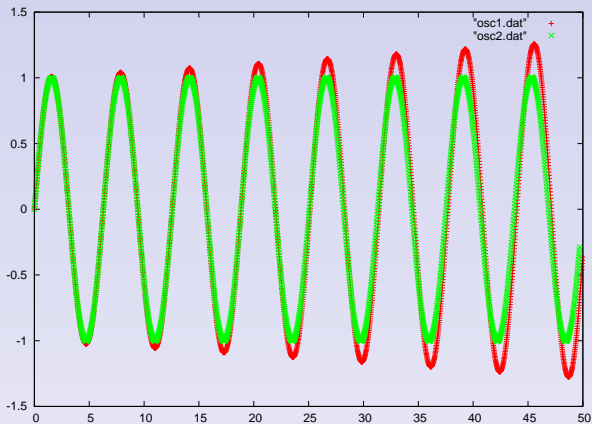
```
main(int argc, char ** argv)
{
    float    km = 1, p = 1, y = 0, t = 0,
            dt = atof(argv[1]);
    int      i, max = 50*km/dt;

    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)

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



# 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

Model  
interakce  
molekulZařízení 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

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

# Metody integrace

## Eulerova zpětná

- ▶ pro pružinový oscilátor

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

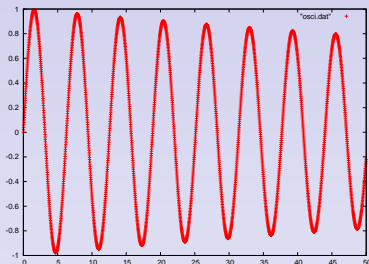
$$p_{n+1} = p_n - \Delta t k y_{n+1}$$

- ▶ 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  $3 \times 3$  nebo kvaternion
- ▶ úhlová rychlost
  - ▶ vektor  $\omega$
  - ▶ velikost - rychlost rotace
  - ▶ směr - osa rotace
- ▶ matice (tenzor) setrvačnosti
  - ▶ analogie hmotnosti
  - ▶ prostorové rozložení hmotnosti

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

# 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/>

Model  
interakce  
molekulZařízení silové  
zpětné vazbyPřímé  
mapování síly  
vs. dynamikaFyzikálně  
věrné modelyMetody  
integraceSimulace  
pevného tělesaSilové  
interakce  
molekulProměnlivé  
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

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

- ▶ úhlovou rychlost  $\boldsymbol{\omega}$  vypočteme

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

- ▶  $\boldsymbol{\omega}_q$  je vnoření  $\boldsymbol{\omega}$  do prostoru kvaternionů

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

# Integrace pohybové rovnice

- ▶ 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)

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



# Integrace pohybové rovnice

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

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

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

# 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  $(\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n)$

Model  
interakce  
molekulZařízení 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)

Model  
interakce  
molekulZařízení silové  
zpětné vazbyPřímé  
mapování síly  
vs. dynamikaFyzikálně  
věrné modelyMetody  
integraceSimulace  
pevného tělesaSilové  
interakce  
molekulProměnlivé  
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

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

# 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
- ▶ van der Waalsova - LJ potenciál

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

- ▶ elektrostatická

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

Model  
interakce  
molekulZařízení silové  
zpětné vazbyPřímé  
mapování síly  
vs. dynamikaFyzikálně  
věrné modelyMetody  
integraceSimulace  
pevného tělesaSilové  
interakce  
molekulProměnlivé  
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
- ▶ van der Waalsova - LJ potenciál

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

- ▶ elektrostatická

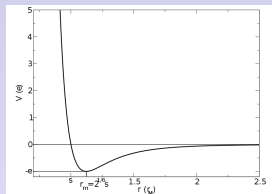
$$F_{el} = \epsilon \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

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

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

# van der Waalsova interakce

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



Model  
interakce  
molekul

Zařízení silové  
zpětné vazby

Přímé  
mapování síly  
vs. dynamika

Fyzikálně  
věrné modely

Metody  
integrace

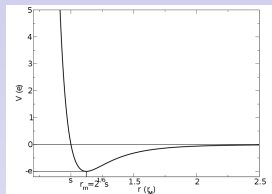
Simulace  
pevného tělesa

Silové  
interakce  
molekul

Proměnlivé  
tvary molekul

# van der Waalsova interakce

- ▶ 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



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



# 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

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

- ▶ 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  $\approx 10$ –500 buněk
- ▶ uvažujeme pouze atomy receptoru v příslušných řádcích

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

- ▶ 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
  - ▶ round-robin rozdělení atomů receptoru mezi jádra CPU
  - ▶ statisticky rovnoměrné
- ▶ 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

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

- ▶ nízký exponent (2) – dlouhý dosah
- ▶ nelze efektivně použít ořez
- ▶ vypočítáme silové pole na mřížce
  - ▶ působení na jednotkový náboj
  - ▶ lze spočítat dopředu
- ▶ při běhu simulace interpolace pro všechny atomy ligandu
  - ▶ 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

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

# Shrnutí simulace

- ▶ off-line výpočet
  - ▶ elektrostatického pole
  - ▶ hashovací tabulka pro VdW interakce
- ▶ řídicí simulační vlákno (1 kHz)
  - ▶ elektrostatické působení na všechny atomy ligandu
  - ▶ součet dílčího silového působení VdW sil
  - ▶ působení zařízení silové zpětné vazby na ligand (3 nebo 6 DoF)
  - ▶ integrace pohybové rovnice (systém 13 lineárních rovnic)
- ▶  $N \times$  výpočty dílčích VdW sil
  - ▶ synchronně s řídicím vlákem
  - ▶ pevně mezi sebe rozdělené atomy receptoru
  - ▶ každý pro všechny atomy ligandu
- ▶ řízení zařízení silové zpětné vazby (1 kHz)
  - ▶ asynchronní
  - ▶ implementace viskoelastického spojení s ligandem
- ▶ grafika (25 Hz)

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

- ▶ model tuhé molekuly neodpovídá realitě
  - ▶ při nenulové teplotě mění svůj tvar spontánně
  - ▶ při vzájemné interakci se ovlivňují a mění tvar
- ▶ spontánní pohyby receptoru umíme napočítat dopředu
- ▶ ~ 1000 a více snímků
- ▶ hash tabulka pro všechny snímky
  - ▶ 1000 × 200 kB není problém
  - ▶ neřešíme, i když umíme přepočítávat změny dostatečně rychle
- ▶ elektrostatické pole
  - ▶ 1000 × 50 MB, kdo neplýtvá diskem s námi ...
  - ▶ komprese proměnlivého vektorového pole

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

# Kompresie vektorového pole

- ▶ série snímků, každý 3D mřížka  $256^3$  vektorů
- ▶ výrazná časová i prostorová spojitost
- ▶ algoritmus komprese vycházející z audia a videa
- ▶ sekvence snímků IBBBBPBBBBP apod.
  - ▶ I - komprimovaný samostatně
  - ▶ P - závisí na předchozím I nebo P
  - ▶ B - interpolace mezi I-P resp. P-P

Model  
interakce  
molekul

Zařízení silové  
zpětné vazby

Přímé  
mapování síly  
vs. dynamika

Fyzikálně  
věrné modely

Metody  
integrace

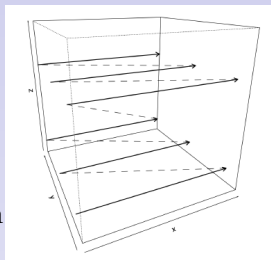
Simulace  
pevného tělesa

Silové  
interakce  
molekul

Proměnlivé  
tvary molekul

# Kompresie vektorového pole

- ▶ I-snímek
- ▶ analogie komprese audia
  - ▶ každá složka zvlášť
  - ▶ logaritmická transformace
  - ▶ kvantizace na 16 bitů
  - ▶ průchod 3D mřížkou definovaným způsobem
- ▶ lineární prediktor
  - ▶ předpokládáme, že následující bod je stejný
  - ▶ zaznamenáváme odchylku
- ▶ Riceovo kódování odchylek
  - ▶  $i = n \operatorname{div} 2^k, j = n \operatorname{mod} 2^k$
  - ▶ unární zakódování  $i$ , následované 0 a  $k$  bity  $j$
  - ▶ vhodné pro geometrické rozložení



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





- ▶ časově náročná komprese příliš nevdá (off-line)
- ▶ rychlá dekomprese je kritická
- ▶ ligand je malý – není třeba celý snímek
- ▶ aktualizace 1–10 Hz
- ▶ paralelní implementace
  - ▶ sady procesů pro I a P/B snímky
  - ▶ celý I s předstihem (závislosti mezi bloky)
  - ▶ B/P jen potřebné bloky (podle polohy ligandu)

Model  
interakce  
molekul

Zařízení silové  
zpětné vazby

Přímé  
mapování síly  
vs. dynamika

Fyzikálně  
věrné modely

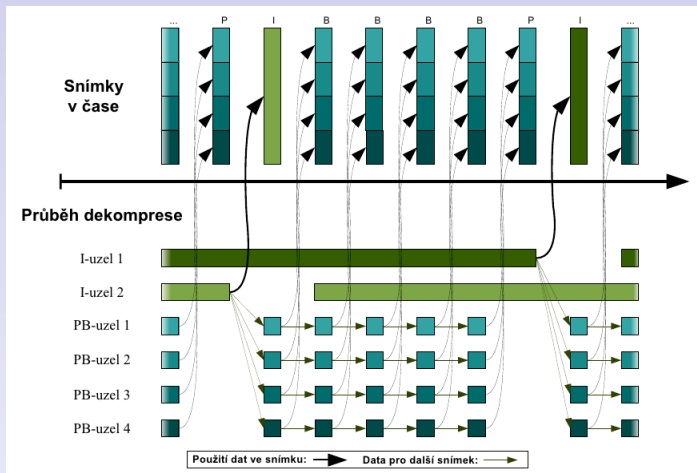
Metody  
integrace

Simulace  
pevného tělesa

Silové  
interakce  
molekul

Proměnlivé  
tvary molekul

# On-line dekomprese



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

- ▶ změny v tvaru důsledkem interakce s receptorem
  - ▶ nelze napočítat dopředu
- ▶ řádově menší molekula
  - ▶ popsat změny tvaru dalšími volnými proměnnými
  - ▶ zahrnout do on-line simulace
- ▶ vypsaná diplomová práce

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