PA081: Programování numerických výpočtů

10. Simulace dynamických dějů

jaro 2013

Model interakce molekul

Zařízení silové zpětné vazby

Přímé mapování síly vs. dynamika

Fyzikálně věrné modely

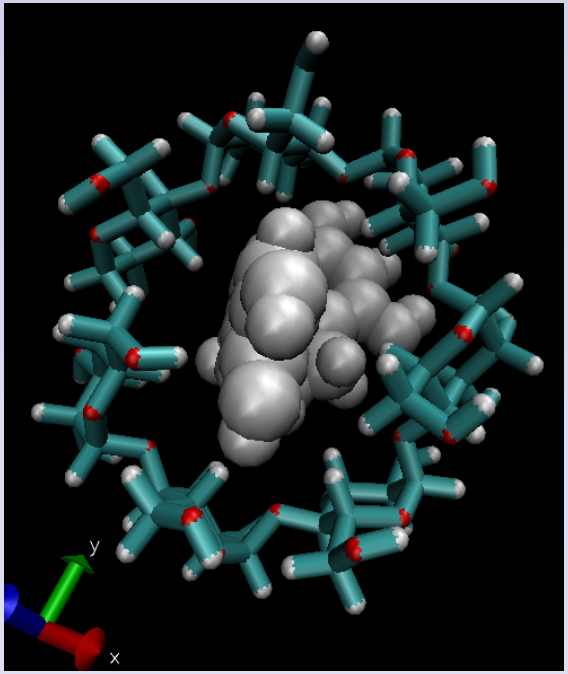
Metody integrace

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 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

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

- 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
- nezatracujeme úplně, na některé aplikace stačí

Virtuální spojení

- „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

Fyzikálně věrné modely

- 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

Fyzikálně věrné modely

- 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

Fyzikálně věrné modely

- 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

Fyzikálně věrné modely

- 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)

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

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

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

- 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

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

- vede na diferenciální rovnici

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

- řešením v $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 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

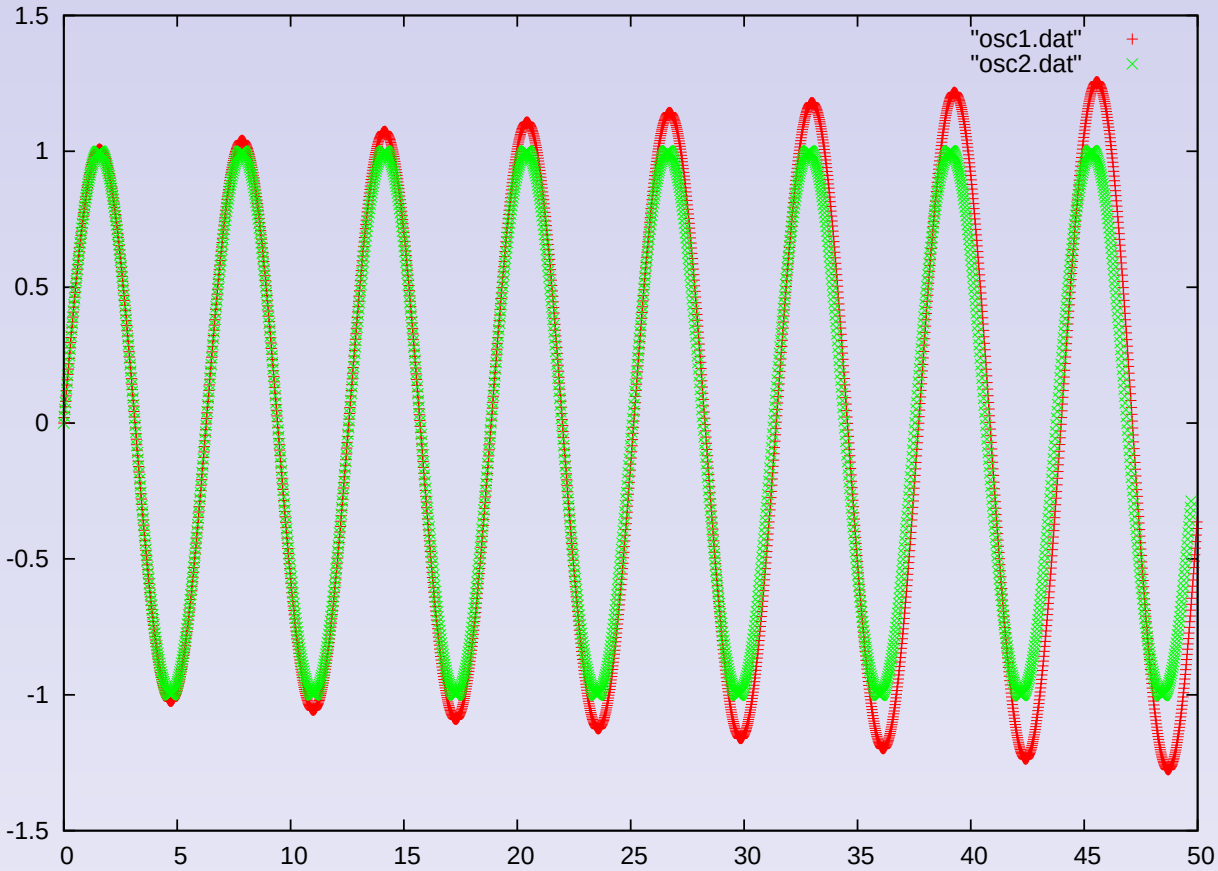
- ne vždy lze řešit pohybové rovnice analyticky
- nemožné, když na proces působí uživatelský vstup
- řešíme numerickou integrací

```
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;
    }
}
```


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

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

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 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 zpětná

- pro pružinový oscilátor

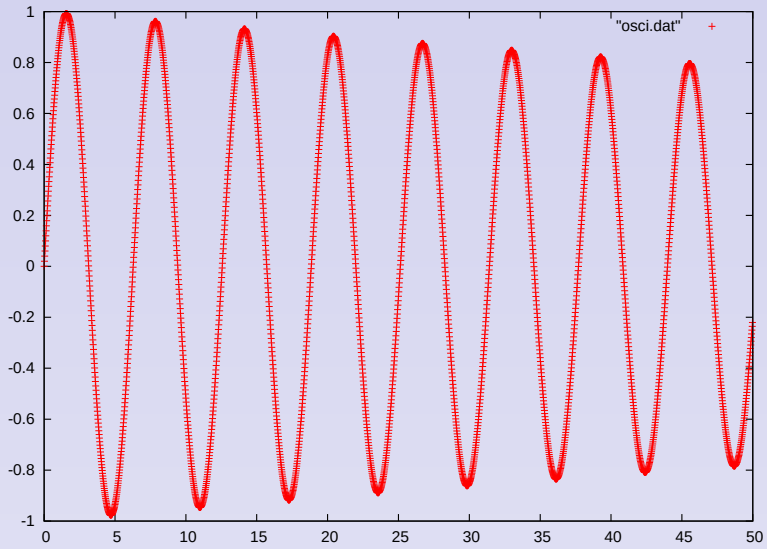
$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{m} p_{n+1}$$
$$p_{n+1} = p_n - \Delta t k y_{n+1}$$

- 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

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 pevného tělesa

- 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

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

Matice setrvačnosti a úhlová hybnost

- lineární hybnost $\mathbf{P} = m\mathbf{v}$ je relativně intuitivní veličina
- úhlová hybnost $\mathbf{L} = \mathbf{M}\omega$ 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 (ω 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/`

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

PA081: Programování numerických výpočtů

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

- 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 (Otaduy, 2005)

Integrace pohybové rovnice

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

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

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

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

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

Integrace pohybové rovnice

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

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

- 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 vyjadřuje analyticky – omezené použití
  - automatické derivování (příště)

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 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

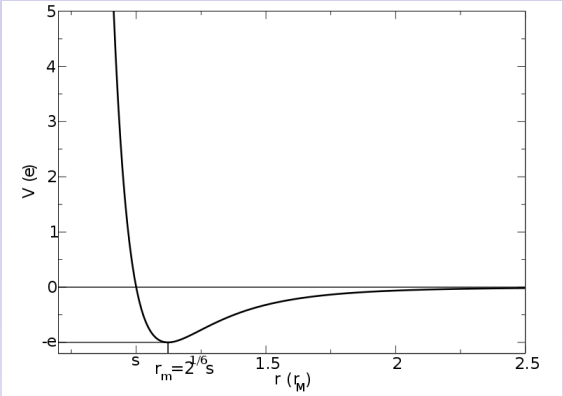
$$F_{el} = \epsilon \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

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

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

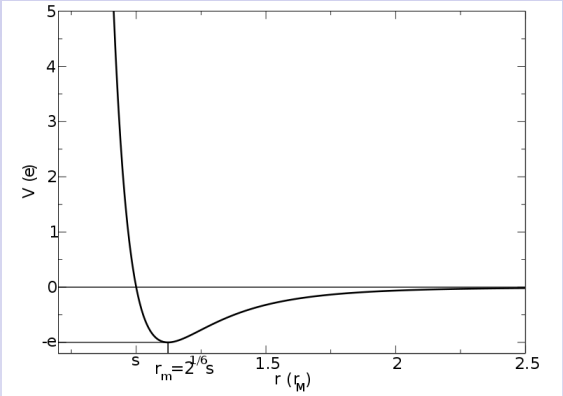
van der Waalsova interakce

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



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

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
- atom ligandu uměle zvětšíme o vzdálenost ořezu
- překryje $\approx$ 10–500 buněk
- uvažujeme pouze atomy receptoru v příslušných řádcích

van der Waalsova interakce

- 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

Elektrostatická interakce

- 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
  - $256^3 \cdot 3 \cdot 4\text{B} \approx 200\text{MB}$
  - adaptivní rozlišení mřížky

Shrnutí simulace

- off-line výpočet
  - elektrostatického pole
  - hashovací tabulka pro VdW interakce
- řídící 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 řídícím vláknem
  - 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

Pohyblivý receptor

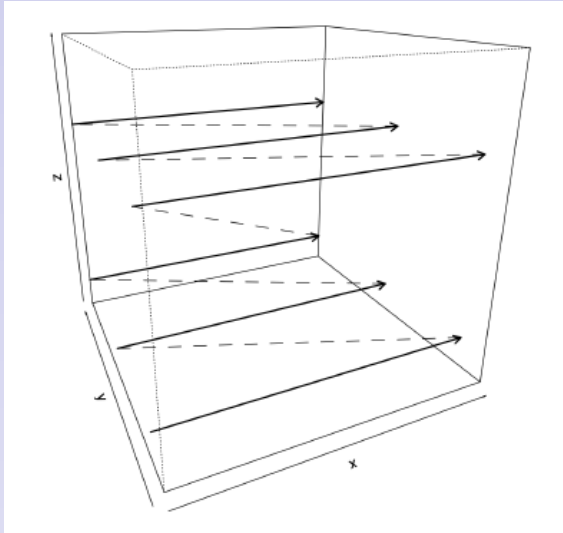
- model tuhé molekuly neodpovídá realitě
  - při nenulové teplotě mění svůj tvar spontánně
  - při vzájemné interakci se ovlivňují a mění tvar
- spontánní pohyby receptoru umíme napočítat dopředu
- ~ 1000 a více snímků
- hash tabulka pro všechny snímky
  - 1000×200 kB není problém
  - neřešíme, i když 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

Komprese vektorového pole

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

Komprese vektorového pole

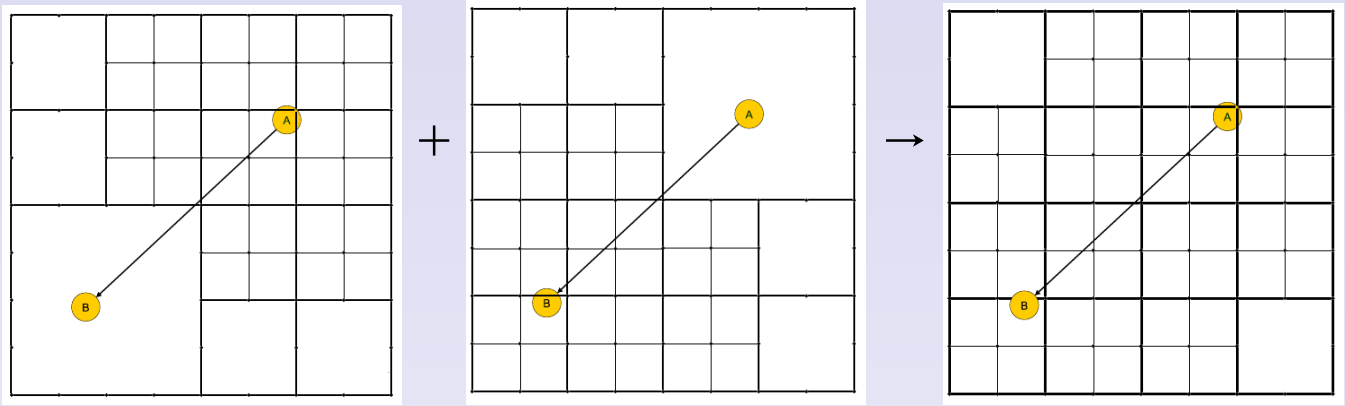


- I-snímek
- analogie komprese audia
  - každá složka zvlášť
  - logaritmická transformace
  - kvantizace na 16 bitů
  - průchod 3D mřížkou definovaným způsobem
- lineární prediktor
  - předpokládáme, že následující bod je stejný
  - zaznamenáváme odchylku
- Riceovo kódování odchylek
  - $i = n \operatorname{div} 2^k$, $j = n \bmod 2^k$
  - 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

Komprese vektorového pole

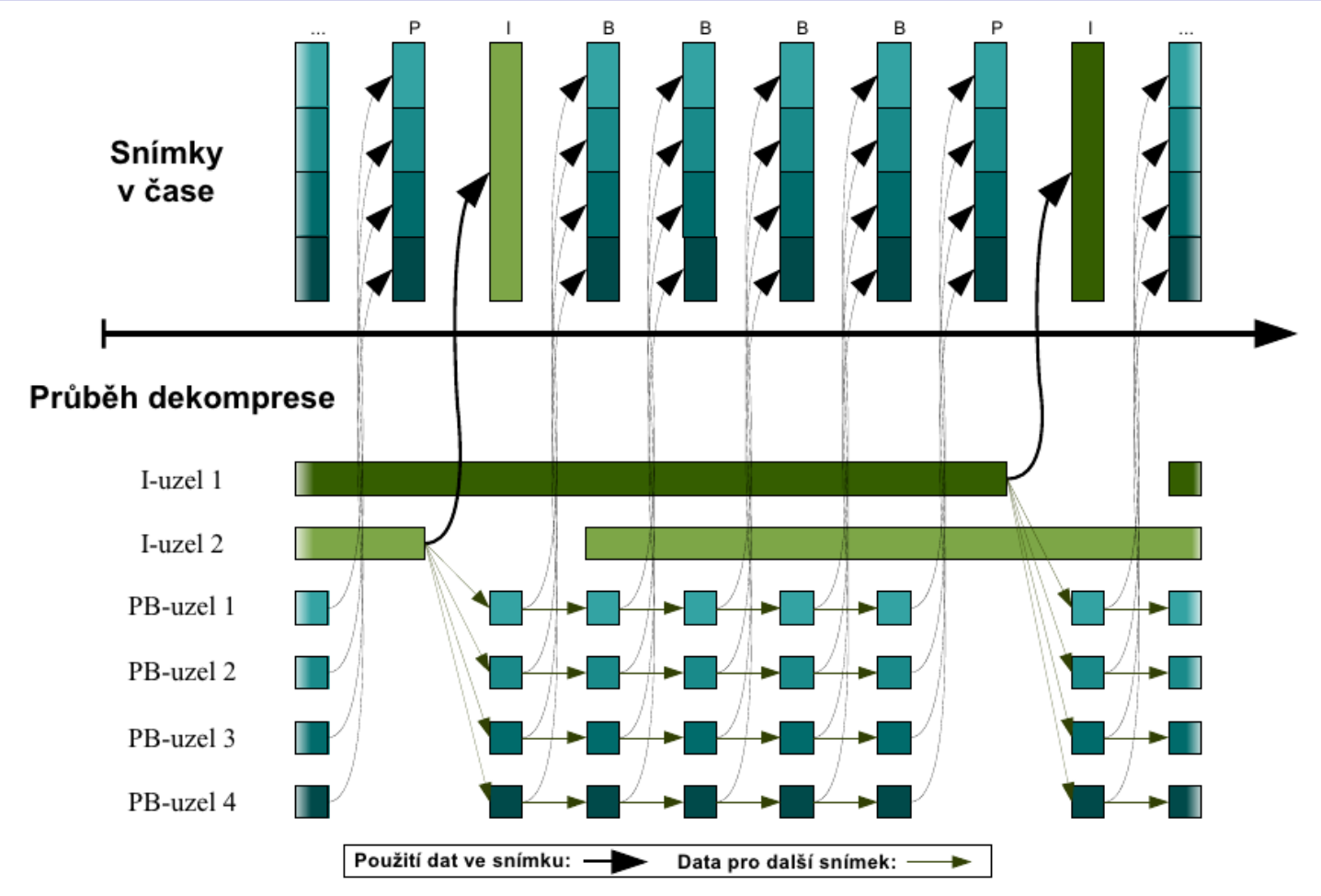
- B,P snímky
  - opět Riceovo kódování odchylek
- adaptivní mřížka
  - strukturu fixujeme pro frameset
  - změna mezi framesety může způsobit nespojitosti
  - zpětné sjednocení mřížek



On-line dekomprese

- časově náročná komprese příliš nevadí (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)

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

Proměnlivý ligand

- 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