

DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas	Kodas
Biomolekulių geometrija	

Dėstytojas (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis: Rimvydas Krasauskas	Matematinės informatikos katedra Matematikos ir informatikos fakultetas Vilniaus universitetas
Kitas (-i):	

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) lygmuo	Dalyko (modulio) tipas
Pirmoji		Pasirenkamas

Igyvendinimo forma	Vykdymo laikotarpis	Vykdymo kalba (-os)
Auditorinė	6 semestras	Lietuvių, anglų

Reikalavimai studijuojančiajam	
Išankstiniai reikalavimai: turi būti išklaustyti pradiniai algebros ir geometrijos kursai; baziniai programavimo įgūdžiai.	Gretutiniai reikalavimai (jei yra): kompiuterinės grafikos įgūdžiai - privalumas

Dalyko (modulio) apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
5	136	76	60

Dalyko (modulio) tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos		
Modulio tikslas - suteikti studentams žinių apie biomolekulių geometriją ir topologiją, taip pat jų tyrimo metodus bei algoritmus. Išugdyti gebėjimus savarankiškai parinkti tinkamą geometrinį modelį, mokėti jį analizuoti panaudojant skaičiavimo geometrijos algoritmus, panaudoti tam tinkamas programines priemones.		
Bendrosios kompetencijos: - Gebėjimas ieškoti duomenų informacijos šaltiniuose, analizuoti, vaizduoti ir sisteminti gautus duomenis (BK1). - Gebėjimas žinias pritaikyti praktikoje (BK2).		
Dalykinės kompetencijos: - Tolydžiuųjų diskrečiųjų matematinių struktūrų bei modelių analizė ir taikymas (DK4) - Algoritmai ir duomenų struktūros (DK5) - Matematinio ir kompiuterinio modeliavimo (DK 10).		
Dalyko (modulio) studijų siekiniai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
Suvoks geometrijos taikymą biomolekulių tyrimams prielaidas, pvz.: kodėl erdvinė struktūra labai svarbi, kaip ji apsprendžia funkciją, kokia yra fizikinė van der Waalso paviršiaus modelio priežastis.	Paskaitos ir savarankiškas mokslinės literatūros studijavimas.	Teorinių žinių ir praktinių gebėjimų vertinimas per kontrolinio darbo ir egzamino rezultatus.
Gebės suprasti pagrindines skaičiavimo geometrijos sąvokas ir uždavinius (iškilas apvalkas, taško lokalizacija, Voronojaus diagrama, Delaunay trianguliacija) ir jų sprendimo algoritmus.	Paskaitos, atskirų pavyzdžių ir algoritmų nagrinėjimas pratybų metu, savarankiškas uždavinių sprendimas ir literatūros studijos.	Uždavinių sprendimo pratybų metu ir namų darbų pristatymo vertinimas. Teorinių žinių ir praktinių gebėjimų vertinimas per kontrolinio darbo ir egzamino rezultatus.
Išmanys alfa kompleksų konstrukcijas ir gebės jas konstruktyviai taikyti molekulių ertmių, kišenių ir tunelių radimui, molekulės tūrio ir paviršiaus ploto apskaičiavimui.	Paskaitos, atskirų pavyzdžių ir algoritmų nagrinėjimas pratybų metu, savarankiškas uždavinių sprendimas ir literatūros studijos.	Uždavinių sprendimo pratybų metu ir namų darbų pristatymo vertinimas. Teorinių žinių ir praktinių gebėjimų vertinimas per egzamino rezultatus.
Susipažins su geometrinės algebros elementais: vektoriai ir multivektoriai, vidinė ir išorinė	Paskaitos, atskirų pavyzdžių nagrinėjimas pratybų metu, savarankiškas uždavinių	Uždavinių sprendimo pratybų metu ir namų darbų pristatymo vertinimas. Teorinių

sandaugos, kvaternionai ir posūkių representacija rotoriais, Cliffordo-Bezier kreivės ir paviršiai.	sprendimas ir literatūros studijos.	žinių ir praktinių gebėjimų vertinimas per egzamino rezultatus.
Išmanys Laguerre geometrijos pagrindus ir jos taikymus Voronojaus rutulių diagramos celių briaunų ir sienų parametrizacijai.	Paskaitos ir literatūros studijos.	Uždavinių sprendimo Pratybų metu. Teorinių žinių ir praktinių gebėjimų vertinimas per egzamino rezultatus.

Temos	Kontaktinio darbo valandos							Savarankiškų studijų laikas ir užduotys	
	Paskaitos	Konsultacijos	Seminarai	Pratybos	Laboratoriniai darbai	Praktika	Visas kontaktinis darbas	Savarankiškas darbas	Užduotys
1. Įvadas: geometrijos vaidmuo biochemijoje. Molekulių reprezentavimas naudojant van der Waalso sferas. Baltymų ir DNR trimatės struktūros apžvalga.	2				2		4	4	Teorinės medžiagos studijos iš privalomos literatūros
2. Skaičiavimo geometrija plokštumoje: baigtinės taškų aibės iškilas apvalkas, taško lokalizacijos uždavinys, Voronojaus diagrama, Delaunay trianguliacija, jų radimo algoritmai. Apibendrintos diagramos: Apolonijaus ir svorinės Voronojaus diagramos. Svorinės Delaunay trianguliacijos.	6				6		10	8	Individualios programavimo užduotys: atskirų algoritmų realizacijos ir vizualizacijos
3. Trimatė erdvė: iškiliaji briaunainiai, Platono kūnai, Eulerio formulė, Voronojaus diagramos, Delaunay trianguliacijos. Erdvę užpildantys molekulių modeliai: van der Waalso paviršius, tirpikliui prieinamas paviršius, „molekulės oda“ (molecular skin).	6	2			6		14	10	Uždaviniai iš privalomos literatūros atitinkamų skyrių
4. Alfa kompleksai: plokštumos ir trimatės erdvės atvejai, jų konstravimo algoritmai. Taikymai molekulių ertmių, kišenių ir tunelių radimui, molekulės tūrio ir paviršiaus ploto apskaičiavimui.	6	2			6		14	8	
5. Geometrinės algebros elementai: skaliariai, vektoriai, multivektoriai, vidinė ir išorinė sandauga. Cliffordo geometrinė algebros struktūra ir geometrinės interpretacijos. Algebros $Cl(2,0)$, $Cl(1,1)$, $Cl(3,0)$. Kvaternionai ir posūkiai erdvėje. $Cl(1,3)$ algebra ir reliatyvumo teorija.	6				8		14	10	
6. Laguerre geometrija: orientuotų sferų skaliarinė sandauga, Minkowskio erdvė ir jos transformacijos. Taikymai Voronojaus rutulių diagramos celių briaunų ir sienų parametrizacijai.	4				6		10	6	Teorinė medžiaga iš papildomos literatūros
7. Pasiruošimas kontroliniam darbui ir jo rašymas	2	2					4	2	
8. Pasiruošimas egzaminui, egzaminas	2	4					6	2	
Iš viso	34	10			32		76	60	

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Darbas pratybų metu ir namų darbų užduočių pristatymas	40	Semestro metu	Uždavinių sprendimai ir namų darbų užduočių pristatymai vertinami taškais

Tarpinis kontrolinis darbas	20	Semestro viduryje	Rašto darbas: teoriniai klausimai ir uždaviniai
Egzaminas	40	Sesijos metu	Rašto darbas: teoriniai klausimai ir uždaviniai

Autorius	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas	Leidimo vieta ir leidykla ar internetinė nuoroda
Privalomoji literatūra				
H. Edelsbrunner	2014	A Short Course in Computational Geometry and Topology		Springer
H. Edelsbrunner, P. Koehl	2005	The geometry of biomolecular solvation	Discrete Comp. Geometry Vol. 52	MSRI Publications http://pub.ist.ac.at/~edels/Papers/2005-B-01-GeometryBiomolecularSolvation.pdf
Papildoma literatūra				
H. Edelsbrunner	2006	Geometry and topology for mesh generation		Cambridge University Press
M. de Berg, O. Cheong, M. Overmars	2008	Computational Geometry: Algorithms and Applications		Springer
A. Dargys, A. Acus	2015	Cliffordo geometrinė algebra ir jos taikymai		UAB "Petro ofsetas"