

Einladung

zum

Mathematischen Kolloquium

Am Donnerstag, dem 24. Mai 2018, spricht

Herr Prof. Dr. Dr.h.c. Peter Deuffhard,
Zuse-Institut Berlin (ZIB)
Gast am Lehrstuhl Angewandte Mathematik
bei Herrn Prof. Dr. Anton Schiela

über das Thema

Neue Mathematik für neue Medikamente

Abstract

Der Entwurf von Medikamenten beginnt heute im Rechner. Allerdings sind die tradierten Algorithmen, meist als Molecular Dynamics (MD) bezeichnet, um Größenordnungen zu langsam. Diese Algorithmen basieren auf der Hamiltonschen Dynamik von molekularen Systemen. Die zugehörigen Anfangswertprobleme sind schlecht konditioniert.

Die Berliner Arbeitsgruppe am ZIB hat deshalb eine neue effizientere mathematische Methode entwickelt. Schlüsselidee ist die direkte Identifikation von metastabilen Konformationen, d.h. von langlebigen molekularen Zuständen. Mathematische Grundlage sind selbstadjungierte Übergangsoperatoren (Schütte) zu reversiblen Markovketten. Nach geeigneter Diskretisierung fokussiert sich das mathematische und biochemische Interesse auf fastentkoppelte Markovketten und die zugehörigen metastabilen Mengen, die Konformationen. Diese Aufgabe wird mittels einer Perron Cluster Analyse (PCCA) geleistet, deren robuste algorithmische Variante dargestellt wird (Deuffhard, Weber).

Im Verlauf des Vortrags wird eine Reihe biomolekularer Beispiele vorgestellt. Abschliessend wird die Grundlage eines Patentes für eine Klasse von Medikamenten erläutert. Nebenbei sei bemerkt, dass die Thematik ihren Ausgang genommen hat, als der Vortragende 1996 in Bayreuth einen Kolloquiumsvortrag gehalten hat.

Beginn: 16.30 Uhr (Kaffee/Tee ab 16.00 Uhr im Seminarraum 748)

Ort: Hörsaal H 19, Gebäude Naturwissenschaften II, Universitätsgelände

gez. V. Ulm