

Schnupperstudium Computing in Science

Bioinformatik – Chemieinformatik – Physikinformatik

Am 22. April 2017, 10:15 – 17:30

im Zentrum für Bioinformatik

Bundesstr. 43, 20146 Hamburg, Raum 16

Programm:

10:15 – 10:45 **Vortrag** zum Studium Computing in Science, Prof. Dr. J. Kirchmair

10:45 – 11:15 **Vortrag** "Computergestützter Wirkstoffentwurf", Prof. Dr. J. Kirchmair

11:30 – 12:00 **Führung** durch den Serverraum (HPC-Cluster) des Zentrums für Bioinformatik

12:00 – 13:00 Mittagspause

13:00 – 15:00 **Workshop I**

Angebotene Themen, siehe nächste Seite

15:00 – 15:30 Pause

15:30 – 17:30 **Workshop II**

Angebotene Themen, siehe nächste Seite

Infos und Anmeldung:

<http://www.zbh.uni-hamburg.de/schnupperstudium-cis>, ZBH, Bundesstr. 43, 20146 Hamburg,

Anfahrtsskizze: <http://www.zbh.uni-hamburg.de/service/lageplan.html>

Mit öffentlichen Verkehrsmitteln: U-Bahn Station Schlump und 5 Minuten Fußweg oder
S-Bahn Dammtor, Metrobus 4 oder 5 bis Station Grindelhof und 3 Minuten Fußweg.

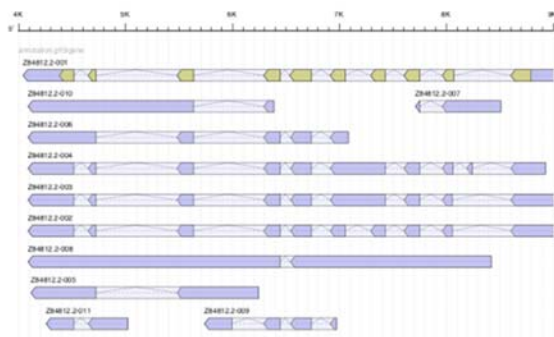
Aufgabenstellungen für die Workshops

In allen Workshops werden Sie - betreut von Mitarbeitern - ein kleines Forschungsprojekt am Computer durchführen. Es werden keine besonderen Vorkenntnisse erwartet.

Bioinformatik Workshop

„Überraschungen in der Welt der Gene“

Viele Wissenschaftler definieren den Beginn des 21. Jahrhunderts als das Gen Zeitalter. Wissenschaftler sequenzieren heutzutage die gesamte DNA (Genom) einer Art und stellen diese Daten über das Internet frei zur Verfügung. Mit Hilfe von Computerprogrammen können Molekularbiologen und Biochemiker aus den Daten wichtige Erkenntnisse gewinnen und gezielt für ihre Laborexperimente nutzen. Bioinformatik ist zu einem wichtigen Bestandteil der modernen Life-Science-Forschung geworden.

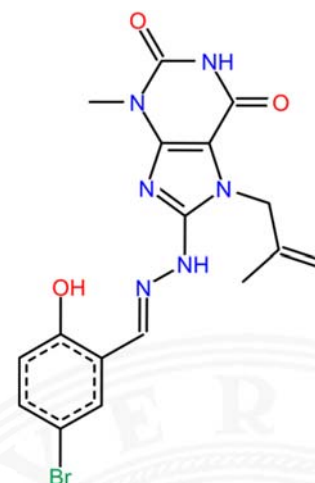


Was wäre eine typische Anwendung? Als Beispiel untersuchen wir das Myostatin-Gen, ein wichtiges Steuerungselement für das Muskelwachstum. Wie findet man das Gen in einer DNA Sequenz? Wie kann man nach verwandten Genen in anderen Arten suchen und Aussagen zur Evolution dieses Gens machen? Wir nutzen hierzu Programme zum Vergleich von Genen und Proteinen. Sie werden sehen: In DNA Sequenzen kann man lesen wie in einem Buch.

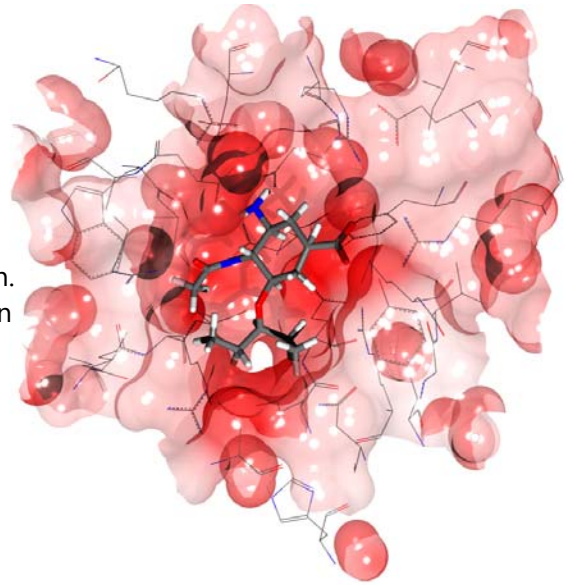
Chemieinformatik und Modelling Workshop

Tamiflu und Co.: Mit dem Computer auf der Suche nach neuen Medikamenten

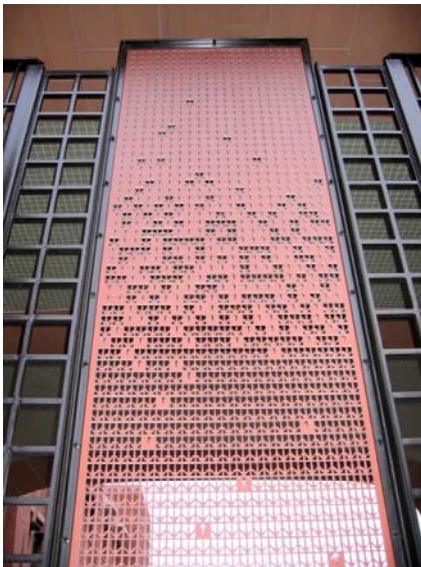
Die Entwicklung neuer Wirkstoffe für Medikamente gehört zu den schwierigsten Entwurfsprozessen und größten Herausforderungen in unserer Zeit. Gleichzeitig erleben wir rasante Entwicklungen im Bereich der Computer- und Informationstechnologie: ein explosionsartiges Wachstum an Informationen und auch an Computerleistung, die uns den Zugriff auf diese Informationen ermöglicht. Computer spielen heute auch in der modernen Life- Science-Forschung eine ganz wichtige Rolle. Die Bio- und Chemieinformatik befasst sich mit der Entwicklung und dem Einsatz von Computerverfahren für diesen Anwendungsbereich.



Im Rahmen des Workshops werden Sie am Beispiel wichtiger Medikamente wie Tamiflu den Einsatz von Computern in Forschung und Entwicklung kennenlernen. Neben der zwei- und dreidimensionalen Darstellung von Molekülen werden wir Modelle für die Findung neuer Wirkstoffe entwickeln und damit im Computer größere Moleküldatenbanken analysieren.

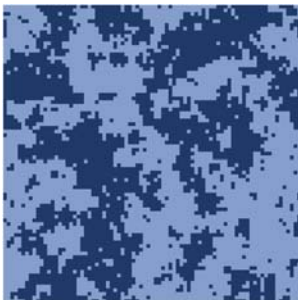


Physikinformatik Das ‚Ising Modell‘



Der Einsatz computergestützter Verfahren ist aus der modernen Physik nicht mehr wegzudenken. In der Experimentalphysik haben sich die computergestützte Steuerung von Messprozessen, die Datenerfassung in Echtzeit, die Auswertung sehr großer Datenmengen sowie die Aufbereitung und Darstellung von Messresultaten mit Hilfe von Rechnern zu Standardverfahren entwickelt, die beständig weiterentwickelt und optimiert werden. Noch entscheidender ist der Einsatz von Rechnern in der Theoretischen Physik, die das breite Spektrum von der Entwicklung grundlegender Modelle und abstrakter Formalismen auf der einen Seite bis hin zu detaillierten Vorhersagen in ganz konkreten Anwendungszusammenhängen oder in Bezug auf spezielle technische Fragestellungen auf der anderen Seite umfasst.

Das von Ernst Ising in seiner Promotion 1922-24 an der Universität Hamburg bearbeitete und nach ihm benannte Ising-Modell ist eines der grundlegenden Modelle im Bereich der theoretischen Physik. Neben einer Vielzahl von Phänomenen aus der statistischen Physik beschreibt es insbesondere spontane kollektive magnetische Ordnung.



In dem Computerexperiment zum Ising-Modell können Sie die physikalischen Eigenschaften des Modells durch eigene Forschung herausarbeiten. Versuchen Sie beispielsweise, die Abhängigkeiten von der Temperatur und einem äußeren Magnetfeld zu untersuchen und lernen Sie neue Phänomene kennen, die im Blickpunkt der aktuellen Forschung an magnetischen Systemen stehen. Weiterführende Aspekte zur numerischen Umsetzung und zu den theoretischen Grundlagen werden diskutiert.