

Alak és hasonlóság a matematikában, a molekulák világában, és a művészetben

**Dr. Mezey Pál
(Paul G. Mezey)**

**Canada Research Chair,
Scientific Modeling and Simulation Laboratory,
Department of Chemistry and Department of Physics and
Physical Oceanography, Memorial University of
Newfoundland, St. John's, NL, Canada, A1B 3X7,
pmezey@mun.ca, paul.mezey@gmail.com**

**External Faculty
Collegium Budapest, Institute for Advanced Study, Budapest,
Hungary,**

**Guest Professor
Eötvös University of Budapest, ELTE TTK Kémia Intézet,
Budapest, Hungary,**

**Guest Professor
Babes-Bolyai University
Cluj-Napoca, Transylvania, Romania**

Absztrakt

Az előadás az alakelemzés és hasonlósági mértékek matematikai alapjainak ismertetése után a kémiai, biokémiai és más területeken, például a művészetekben fellépő alkalmazások közös vonásait és érdekességeit tárgyalja.

Az alakelemzés és a hasonlóság számszerű jellemzésére a matematika egy izgalmas fejezete, a topológia nyújt érdekes eszközöket, amelyek igen széles körben alkalmazhatók. Sok esetben a kémiai és biokémiai alak és hasonlósági problémák a művészet világában fellépő példákkal illusztrálhatók.

A bioinformatika és a molekuláris informatika modern számítógépes modellezési módszereinek kidolgozása során a matematika eddig még ritkán alkalmazott területei fontos, új jelentőségre tettek szert, és több új matematikai probléma is fellépett.

Különösen fontossá váltak az alakelemzés geometriai és topológiai módszerei, amelyek alkalmasak a kisebb molekulák és a nagyobb biomolekulák, például gyógyszer molekulák, fehérjék, és enzimek alakjának részletes leírására, ahol az elektronfelhő kvantummechanikai tulajdonságai folytán a hagyományos, klasszikus tárgyaknál használható geometriai alakleírási módszerek már nem alkalmazhatóak.

Az előadás egy rövid ismertetőt ad a molekuláris informatikában fellépő alakelemzés matematikai módszereiről, a molekulák hasonlóságának leírására szolgáló módszerek kvantummechanikai alapjairól, és az ezekre épülő számítógépes módszerek alkalmazásairól a bioinformatikában, molekulatervezésben, különös tekintettel a gyógyszertervezésre.