

Obsah

1 Úvod	3
2 HW a SW základy počítačové fyziky	6
2.1 Hardwarové prostředky	6
2.2 Softwarové prostředky	9
2.3 Zásady programování	13
2.4 Historický vývoj hardwarových a softwarových prostředků	16
2.5 Shrnutí	20
3 Počítačové modelování	21
3.1 Počítačové modelování	21
3.2 Techniky počítačového modelování	23
3.3 Shrnutí	25
4 Metoda Monte Carlo	26
4.1 Princip metody	26
4.2 Základy počtu pravděpodobnosti a matematické statistiky	28
4.2.1 Zavedení náhodných veličin	29
4.2.2 Charakteristiky náhodných veličin	31
4.2.3 Vybrané náhodné veličiny	34
4.2.4 Vybrané limitní věty	37
4.2.5 Statistické testování hypotéz	38
4.2.6 Entropie a informace	43
4.3 Základní techniky metody Monte Carlo	44
4.3.1 Generování náhodných čísel	44
4.3.2 Transformace náhodných veličin	50
4.3.3 Metoda Monte Carlo a matematická statistika	55
4.4 Řešení numerických problémů pomocí metody Monte Carlo	57
4.4.1 Výpočet určitých integrálů	57
4.4.2 Řešení Laplaceovy rovnice	64
4.4.3 Další problémy	68

4.5	Použití metody Monte Carlo ve fyzice	72
4.5.1	Transportní problém	74
4.5.2	Modelování fyzikálních procesů se zvýšenou účinností	87
4.5.3	Jiné fyzikální problémy	94
4.6	Shrnutí	95
4.7	Problémy k řešení	96
5	Metoda molekulární dynamiky	108
5.1	Princip metody	108
5.2	Použití metody molekulární dynamiky	109
5.2.1	Pracovní oblast	110
5.2.2	Výpočet silového působení	113
5.2.3	Pohybové rovnice	115
5.2.4	Další otázky	117
5.3	Metoda P-I-C a další postupy urychlující výpočet	120
5.3.1	Formulace problému	120
5.3.2	Metoda P-I-C	121
5.3.3	Další postupy	124
5.4	Shrnutí	125
5.5	Problémy k řešení	126
6	Spojité modelování a hybridní postupy	128
6.1	Spojité modelování	128
6.2	Hybridní modelování	131
6.3	Shrnutí	133
7	Závěr	134