

Obsah

1	Úvod	11
1.1	Statistická fyzika a simulace	11
1.2	Historický přehled	13
2	Základní pojmy a definice	15
2.1	Statistické soubory	16
2.1.1	Klasické systémy	16
2.1.2	Kvantové systémy	19
2.2	Modelové systémy	20
2.2.1	Klasický spojitý systém	20
	Jednoduché párové potenciály	21
	Mezimolekulární potenciály	22
	Vnější síly	24
2.2.2	Kvantový spojitý systém	24
2.2.3	Klasické mřížkové modely	26
	Isingův model	26
	Mřížkový plyn	27
	Model polymeru	27
2.2.4	Kvantové mřížkové modely	27
	Heisenbergův model	27
	Bezspinové fermiony	28
	Hubbardův model	28
2.2.5	Optimalizační úlohy	28
3	Základy molekulární dynamiky	31
3.1	Pohybové rovnice a metoda konečných diferencí	31
3.1.1	Verletova metoda	34
3.1.2	Gearovy integrátory	36
3.2	Volba integrátoru a integrační krok	38
4	Základy metody Monte Carlo	43
4.1	Monte Carlo integrace	43
4.2	Boltzmannovské vzorkování	45
4.2.1	Markovovy řetězce	45
4.2.2	Určení matice přechodu	48

4.2.3	Zkušební změna konfigurace	50
	Mřížkový systém s diskrétním konfiguračním prostorem	50
	Spojité klasický systém	51
4.2.4	Realizace kroku Metropolisovy metody	51
4.3	Zlomek přijetí a nastavení parametrů	52
5	Měření	57
5.1	Mechanické veličiny	58
5.1.1	Teplota a vnitřní energie	58
	Teplota.	58
	Vnitřní energie.	59
5.1.2	Tlak a objem	59
5.1.3	Flukтуаční veličiny	62
5.2	Strukturní veličiny	63
5.2.1	Radiální distribuční funkce	63
5.2.2	Další korelační funkce	64
5.2.3	Korelační funkce a termodynamika	66
5.2.4	Strukturní faktor	66
5.3	Entropické veličiny	68
5.3.1	Metoda termodynamické integrace	69
5.3.2	Metoda vkládání částice	71
5.4	Odhad chyb	72
6	Realizace pseudoexperimentu	75
6.1	Volba metody	75
6.2	Okrajové podmínky	76
6.2.1	Spojité systémy	76
6.2.2	Diskrétní systémy	79
6.3	Velikost systému a dosah potenciálu	79
6.3.1	Krátkodosahové síly	80
6.3.2	Dlouhodosahové síly	81
	Ewaldova sumace	82
	Metoda reakčního pole	85
6.4	Start	86
7	Simulace v jiných souborech	89
7.1	MC simulace	90
7.1.1	NPT soubor	90
7.1.2	Grandkanonický soubor	91
7.1.3	Mikrokanonický soubor	92
7.2	MD metody při konstantní teplotě	93
7.2.1	Přibližný kanonický soubor	93
	Přeskálování rychlostí	93
	Frikční (Berendsenův) termostat	94
7.2.2	Přesný kanonický soubor	94

	Metoda Maxwelllova-Boltzmannova rozložení	95
7.3	Metoda umělých stupňů volnosti v MD	96
7.3.1	Simulace při konstantním tlaku	96
	Andersenova metoda	96
	Další metody	97
7.3.2	Noséův-Hooverův termostat	98
8	Speciální metody a systémy	103
8.1	Nesymetrická matice α	103
8.1.1	Force bias	104
8.1.2	Preferenční vzorkování	104
8.2	Polymery a Rosenbluthovo vzorkování	106
8.3	Neboltzmannovské vzorkování	107
8.4	Fázové rovnováhy	109
8.4.1	Gibbsův soubor	110
8.4.2	Reakční soubor	112
8.4.3	Gibbsova-Duhemova integrace	115
8.5	Metoda fluktuující částice	116
8.6	Simulace molekulárních systémů	117
8.6.1	Tuhé molekuly	118
	Molekuly s osou symetrie	118
	Obecné tuhé molekuly	119
8.6.2	Molekuly s vnitřními stupni volnosti	120
	Monte Carlo	120
	Dynamika s vazbami (constraint dynamics)	121
8.7	Výpočet permitivity	126
8.8	Optimalizace simulací	127
	Metoda zřetězených seznamů	127
	Metoda seznamu sousedů	128
	Metody několikanásobného kroku	128
	Jak efektivně programovat	129
9	Kinetické veličiny a časově závislé systémy	131
9.1	Kinetické koeficienty v MD	131
9.1.1	Základní vztahy	133
	Teorie lineární odezvy	133
	Časové korelační funkce	134
	Einsteinův vztah	135
9.1.2	Rovnovážné metody	136
9.1.3	Nerovnovážná molekulární dynamika (NEMD)	137
9.2	Kinetické Monte Carlo	138
9.2.1	Rovnovážné versus kinetické modely	138
9.2.2	Algoritmy pro kinetické MC	141
9.2.3	Čas v kinetickém MC	144
9.3	Molekulární statika	145

10 Kvantové simulace	147
10.1 Kvantové korekce	148
10.2 Variační metoda	149
10.3 Simulace při konečné teplotě	151
10.3.1 Princip metody	151
10.3.2 Izomorfismus kvantových a klasických systémů	153
Příklad 1	154
Příklad 2	155
10.3.3 Fermionové systémy	157
10.3.4 Znaménkový problém	158
10.4 <i>Ab initio</i> simulace	159
10.4.1 Funkcionál hustoty	161
10.4.2 Metoda MD Carova-Parrinellova	162
10.5 Řešení časové Schrödingerovy rovnice	164
11 Příklady ke studiu	167
11.1 Tekutina tuhých koulí – Monte Carlo	167
11.2 Tekutina tuhých koulí – molekulární dynamika	167
11.3 Lennard-Jonesova tekutina	168
11.4 Krystalizace	168
11.5 Isingův krystal	168
11.6 XY model	168
11.7 Vibrační spektrum molekul	168
11.8 Kulová kvězdokupa	169
11.9 Preferenční vzorkování – částice v gravitačním poli	169
11.10 Model polymerního řetězce – MD	170
11.11 Model polymerního řetězce – entropická pružina	170
11.12 Simulované žíhání	170
11.13 Simulované žíhání – problém obchodního cestujícího	170
11.14 Periodické okrajové podmínky	171
11.15 Náhodná procházka bez protínání	171
11.16 Výpočet koeficientu difúze	171
11.17 Rovnovážný stav adsorpce a desorpce	171
11.18 Šíření epidemií	172
11.19 Růst sněhové vločky	172
11.20 Požár pralesa	172
11.21 Kvantový oscilátor	173
12 Dodatky	175
12.1 Náhodná čísla	175
12.1.1 Základní algoritmy	175
12.1.2 Jiná rozložení	178
Rovnoměrné rozložení v daném intervalu	178
Gaussovo normální rozložení	178
Obecné spojité rozložení	178

Vícedimenzionální rozložení	179
Rovnoměrné diskrétní rozložení	179
Obecné diskrétní rozložení	179
12.2 Kvaterniony a kinematika tuhého tělesa	181
12.3 Gearovy integrátory a stabilita	182
12.4 Rungeova-Kuttova integrace	184
12.5 Analýza časové řady a odhad chyb	185
12.6 Silové pole velkých molekul	186
12.6.1 Nevazebné síly	187
12.6.2 Vazebné síly	188
12.7 Redukované jednotky	188
12.8 Jazyk algoritmů	189
12.9 Seznam symbolů a zkratk	190
Literatura	196