

E – Charakteristika studijního předmětu				
Název studijního předmětu	Molekulární modelování a simulace			
Typ předmětu	povinný		dopor. ročník / semestr	3/Z
Rozsah studijního předmětu	1+1	hod. za týden	2	kreditů 4
Jiný způsob vyjádření rozsahu				
Způsob zakončení	zkouška		Forma výuky	přednáška, cvičení
Další požadavky na studenta				
Zápočet je udělen za zvládnutí jednoduché MC/MD simulace v libovolném programovacím jazyce. Zkouška je ústní.				
Vyučující	doc. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.			
Stručná anotace předmětu				
<p>Předmět "Molekulární modelování a simulace" seznamuje posluchače se základy modelování molekul (okrajově i jiných systémů mnoha částic) metodami klasické mechaniky od konstrukce silového pole po metody molekulární dynamiky a Monte Carlo. Důraz je kladen na metodiku počítačového experimentu (pseudoexperimentu). Nedílnou součástí je práce na projektu, tj. simulace jednoduchého systému. K dispozici jsou česky psaná skripta i demonstrační software.</p> <p>Témata:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Statistická termodynamika: soubory, pravděpodobnosti stavů2. Modely: mřížkové a spojitě, popis tekutin, biomolekul3. Molekulární dynamika: integrace pohybových rovnic (Verlet, Gear)4. MD: izotermický a izobarický soubor5. MD: tuhé molekuly, molekuly s pevnými vazbami (SHAKE)6. Monte Carlo: MC integrace, Markovovy řetězce, Metropolisovo vzorkování7. Náhodná čísla: algoritmy, spojitá a diskrétní rozložení8. MC: tuhé molekuly, MC v jiných souborech, neboltzmannovské vzorkování9. Počítačový experiment: volba metody a podmínek, start simulace10. Periodické okrajové podmínky, dlouhodobé síly11. Měření, statistická analýza časových řad a odhad chyb12. Entropické veličiny (termodynamická integrace, Widom)13. MD: kinetické veličiny, rovnovážné a nerovnovážné metody14. Práce na projektu (MC či MD simulace jednoduchého systému)				
Studijní literatura a studijní pomůcky				
<p>I. Nezbeda, J. Kolafa a M. Kotrla: Úvod do počítačových simulací. Metody Monte Carlo a molekulární dynamiky, skriptum University Karlovy (Karolinum, Praha 1998, 2003) www.icpf.cas.cz/jiri/skripta</p> <p>D. Frenkel a B. Smit: Understanding Molecular Simulation (Academic Press, 1996, 2002)</p> <p>M. P. Allen a D. J. Tildesley: Computer Simulation of Liquids (Clarendon Press, Oxford 1986, 2002)</p>				