

- ? *elementární částice + gravitace*: „teorie všeho“
- (známé) *elementární částice*: standardní model – at. jádra...
- *jádra + elektrony + fotony*: QED – přesná spektroskopie...
- *jádra + elektrony*: Schrödingerova rovnice – vlastnosti malých molekul, spektra, rovnováhy v plynné fázi, kinetika, fotochemie...
- *atomy**: klasické (nebo kvantové) atomistické modelování
- *implicitní rozpouštědlo*: kontinuum + náhodné síly
- *hrubozrnné/zhrubené (coarse-grained) modely*: mezo/nanoskopická škála
element = víceatomová skupina
(surfaktant = hlava + ocas, polymer = [článek]_n,...)
- *mikroskopická škála*: větší částice – hromada písku, micely...
- *materiál jako kontinuum*: parciální diferenciální rovnice – tok tepla, statika, atomová bomba...
- *gravitace*: Einsteinovy rovnice – černé díry, gravitační vlny...

viz DOI: [10.1017/S0033583515000256](https://doi.org/10.1017/S0033583515000256)
pro přehled časových a prostorových škál simulačních technik

multiscale modeling: QM/MM – enzymy...

*příp. pomocná centra / větší skupiny (-CH₃)

(Hyper)plocha potenciální energie

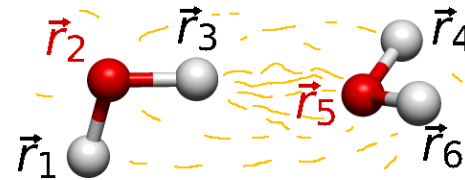
Jádra jsou mnohem těžší než elektrony \Rightarrow elektronové pohyby jsou mnohem rychlejší
(**Bornova–Oppenheimerova aproximace**)



potential energy surface (PES)

energie jako funkce souřadnic poloh všech atomových jader

$$E_{\text{pot}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$$



Jak získám PES?

z kvantových výpočtů (Schrödingerova rovnice):

- ⊖ velmi drahé, zvl. pro mnoho atomů
- ⊕ nepotřebuje „silové pole“ \Rightarrow velká predikční schopnost
- ⊖ pro některé jevy dost nepřesné

aproximujeme vzorcem = **silové pole**, též molekulová mechanika, potenciál, model:

- ⊕ levné
- ⊖ jen tak přesné, jak přesné je silové pole \Rightarrow malá predikční schopnost

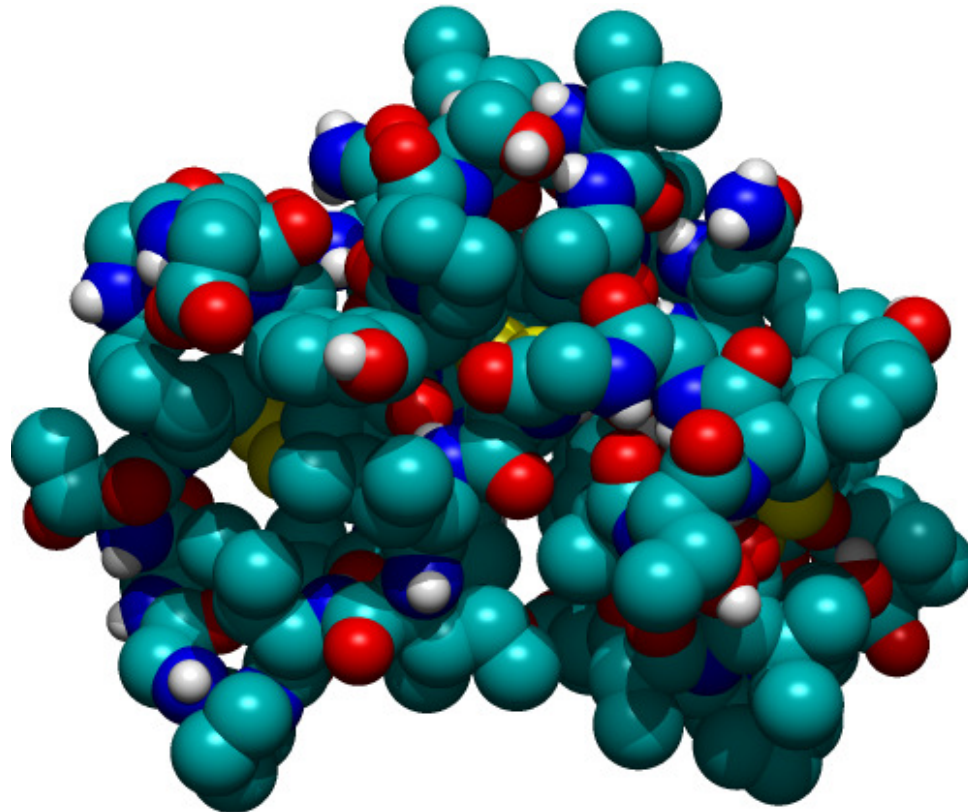
kombinace = QM/MM metody (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics)

- použiju klasickou mechaniku:
 - na statické výpočty (minimum energie, potenciál v okolí aj.)
 - na výpočet vývoje systému v čase (**m**olekulová **d**ynamika, MD)
 - na výpočet termodynamických veličin vzorkováním (**M**onte **C**arlo, MC)
- použiju kvantovou mechaniku (na jádra):
 - metoda dráhového integrálu (PI MC, PI MD)
- použiju klasickou mechaniku s kvantovými korekcemi

kombinace silové pole + klasická mechanika = „**m**olekulová **m**echanika“ (MM); v užším smyslu nezahrnuje MC a MD

Používáme PES, zpravidla popsanou silovým polem

- Minimalizace energie ($T = 0$), „optimalizace struktury“
- Refinement – zpřesnění struktury (z rozptylových experimentů)
- Biochemie: tvar molekul (klíč + zámek), síly (hydrofilní/hydrofobní...)
- Deskriptory pro QSAR (Quantitative Structure–Activity Relationship)



... ale co **pohyb**?

- „Skutečný“ pohyb molekul v čase
- Všechny možné konfigurace (molekul) zprůměrované v čase:



Statistická termodynamika se zabývá výpočtem veličin (bod varu, afinita ligandu k receptoru. . .) na základě představy (makro)stavu systému jako „průměru“ všech možných konfigurací

- molekulová dynamika (MD)
 - časový vývoj systému složeného z mnoha molekul
 - pohyb každého atomu je určen silami, které na něj v každém okamžiku působí
- metoda Monte Carlo (MC); přesněji Metropolisova metoda a varianty
 - posloupnost konfigurací systému generována pomocí náhodných čísel
 - provedeme náhodný pohyb molekuly a rozhodneme se, zda jej přijmeme (tak, aby pravděpodobnosti výskytu konfigurací molekul byly stejné jako v realitě)
- kinetické Monte Carlo
 - simulovaný děj je rozdělen na elementární události (např. adsorpce atomu na rostoucím krystalu, reakce na katalyzátoru)
 - událost, ke které dojde, vybíráme podle známé pravděpodobnosti
- kvantové simulace – MD, MC
- metody Las Vegas – náhodná cesta k deterministickému výsledku (náhodný pivot)

● Kapaliny:

- vliv struktury na vlastnosti (anomálie vody), roztoky
- fázové rovnováhy, rozpustnost
- povrchy a rozhraní, surfaktanty

● Pevné látky:

- struktura krystalů, materiály (poruchy)
- adsorpce (zeolity)

● Biochemie:

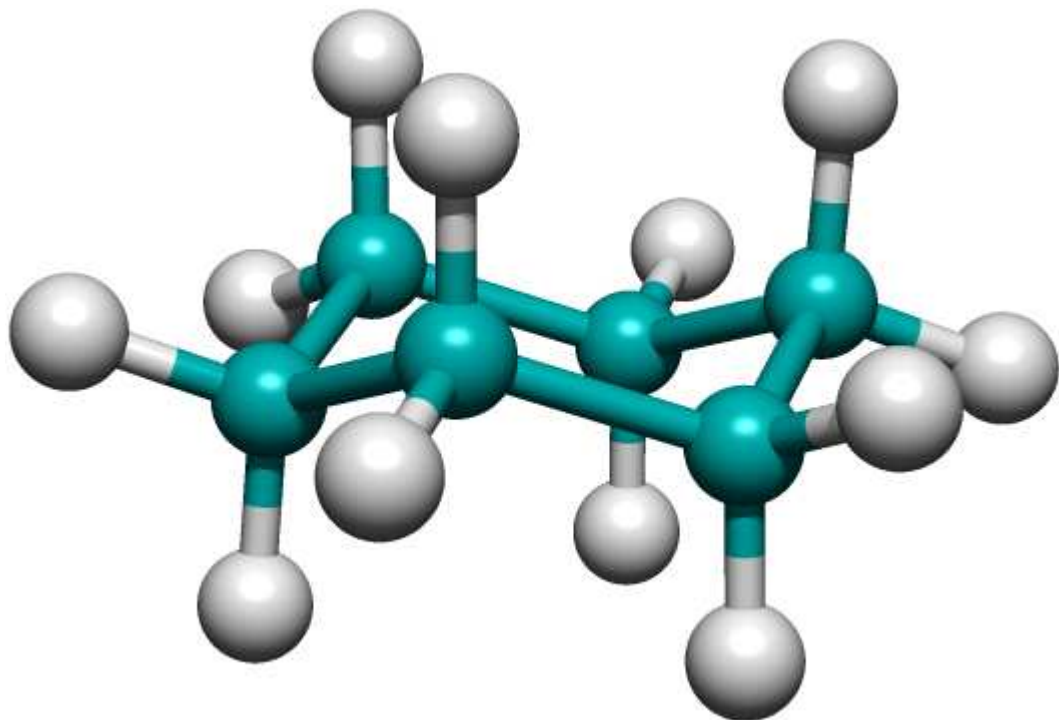
- proteiny, nukleové kyseliny, iontové kanály, lipidické membrány

● Nanoobjekty:

- micely, polymery, samoskladba (coarse-grained modely, mřížky)

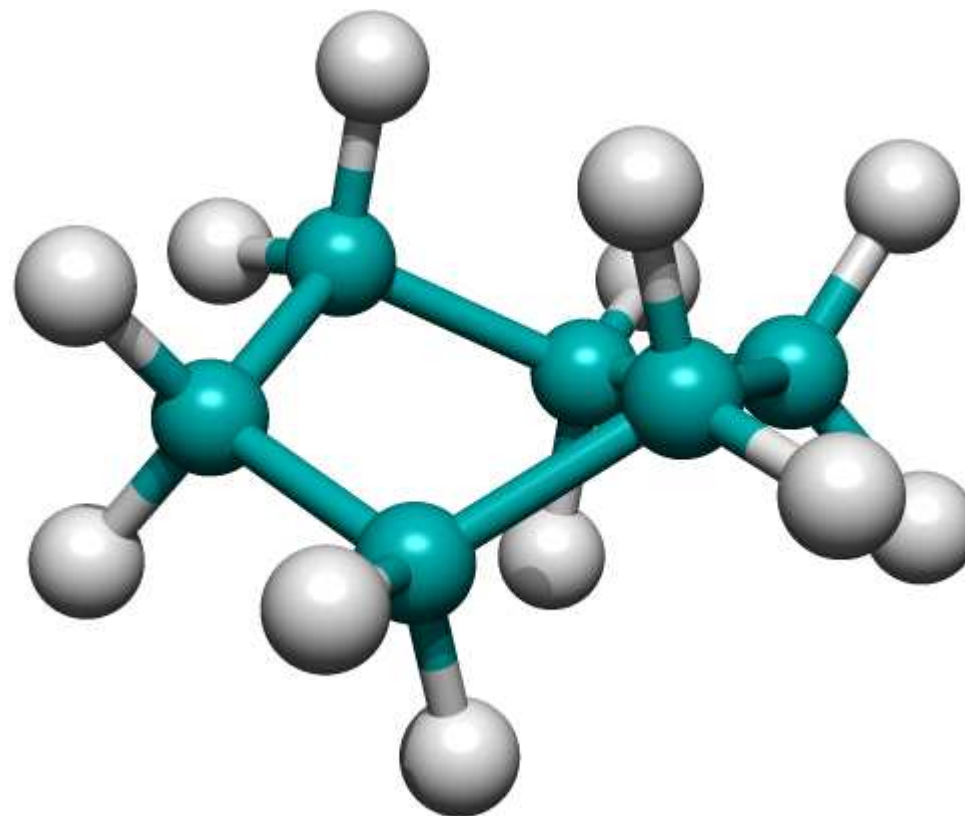
● Podobnými metodami lze studovat:

- sypké materiály, optimalizace, šíření epidemií, evo-devo...



židlička
chair

experiment: 28 kJ/mol
model: 26 kJ/mol

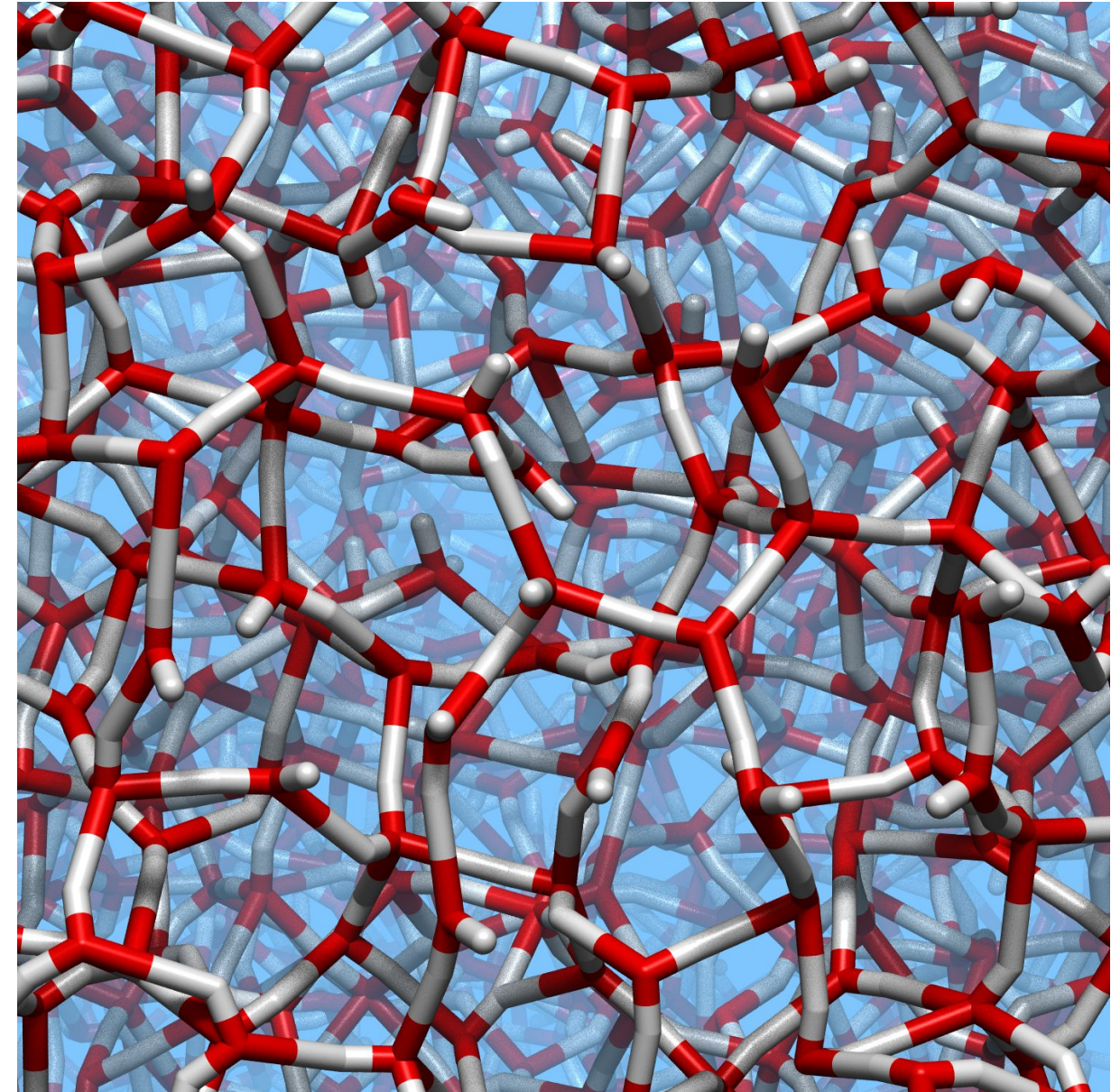


zkřížená vanička
twist (skew) boat

experiment: 45 kJ/mol
model: 53 kJ/mol

Kapalná voda (rovnovážná MD)

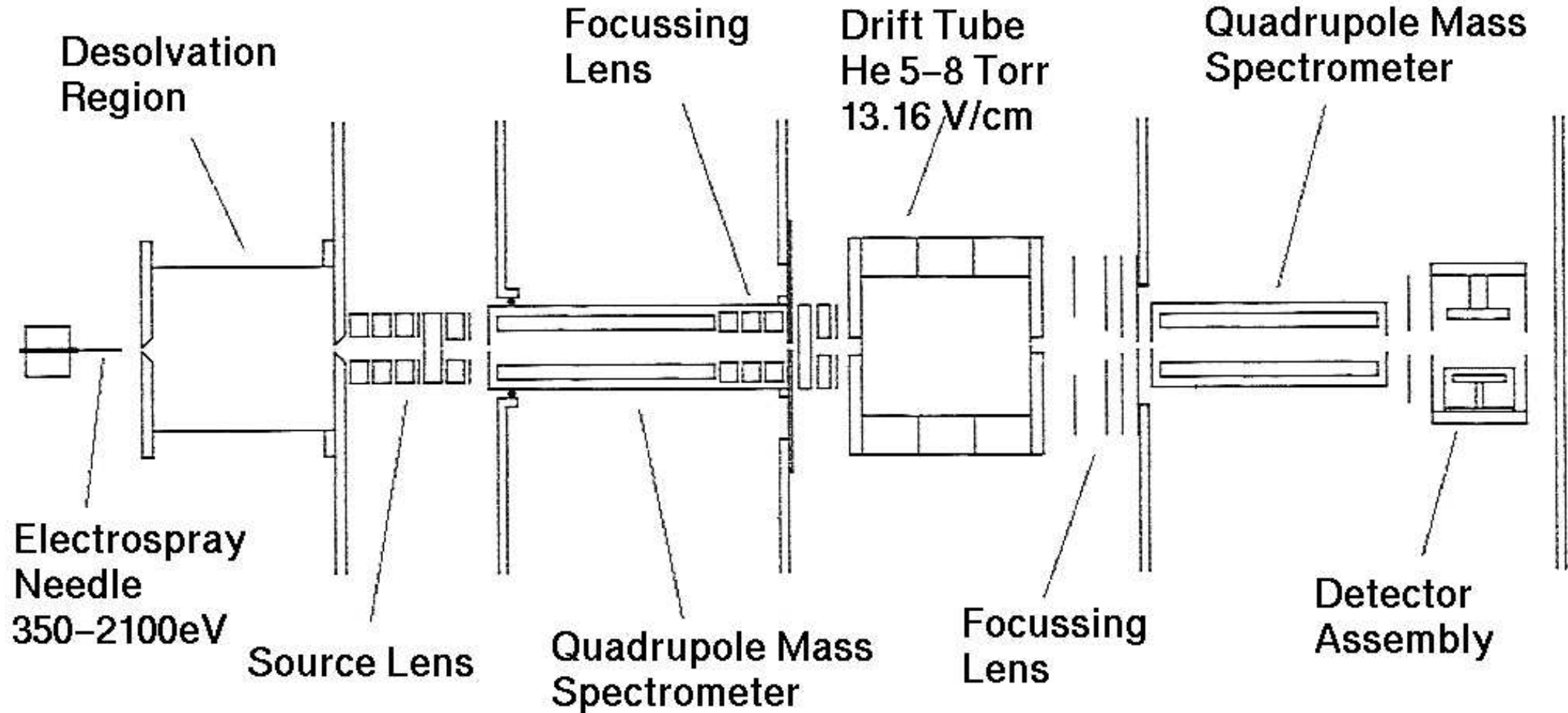
- 10000 molekul
- 300 K
- periodické ve směrech x, y
- adhezivní podložka
- neadhezivní poklička



Další videa: <https://vesmir.cz/cz/on-line-clanky/2014/07/struktura-anomalie-vody.html>

Elektrosprej cytochromu C

- Elektrosprej: rozprašování nabitých částic
- Měří se účinný průřez

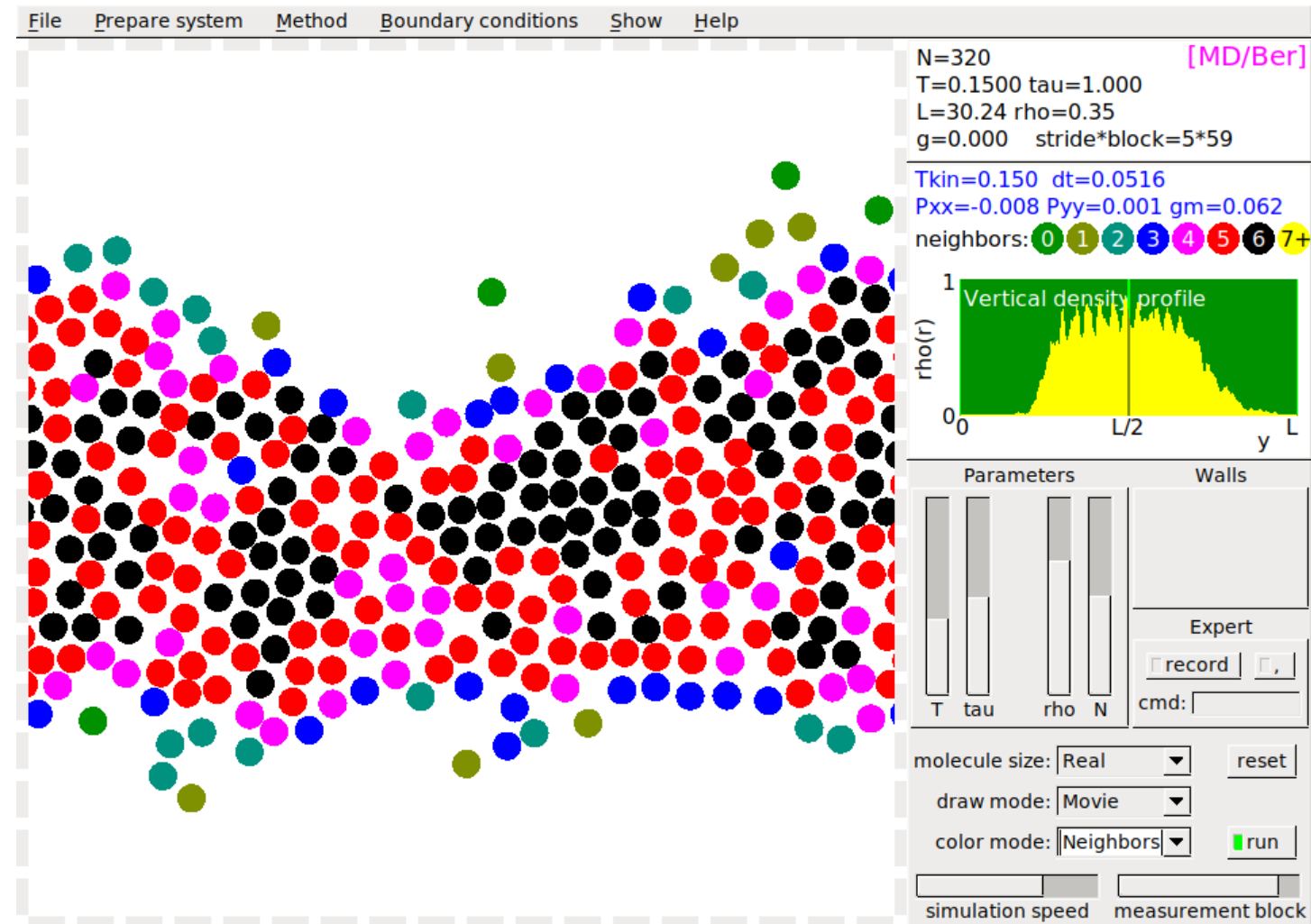


Vlastnosti:

- 2D „atomy“ (potenciál Lennard-Jonesova typu)
- odpuzivé/přitažlivé stěny, gravitace
- MC i MD
- konstantní energie i termostat

Jevy:

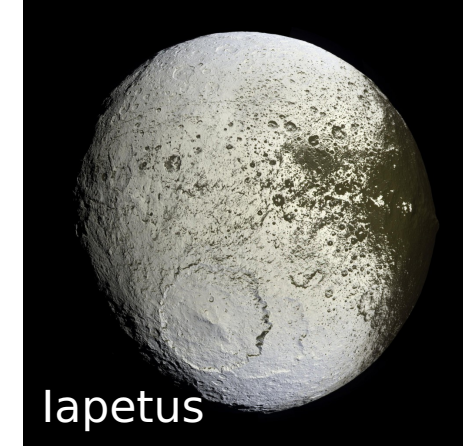
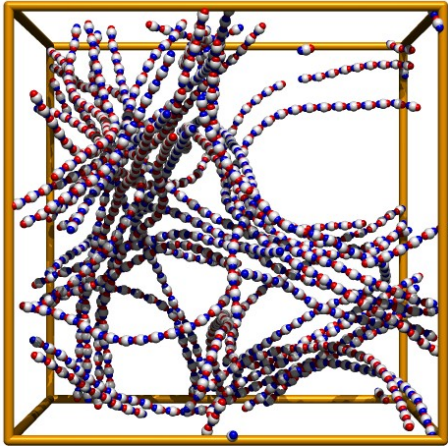
- kondenzace plynu
- zmrznutí kapky
- poruchy krystalu
- kapilární deprese a elevace
- plyn v gravitačním poli
- rovnováha kapalina–pára
- nukleace



Self-assembly (samoskladba)

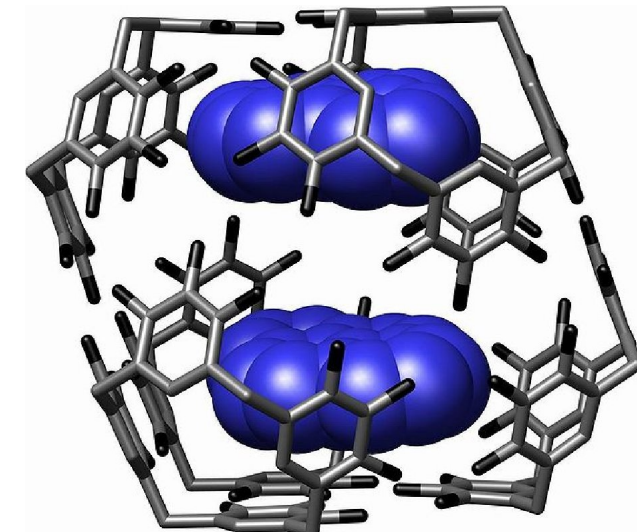
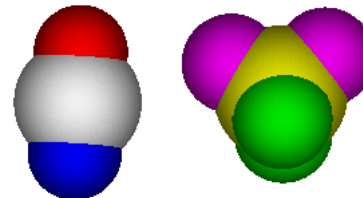
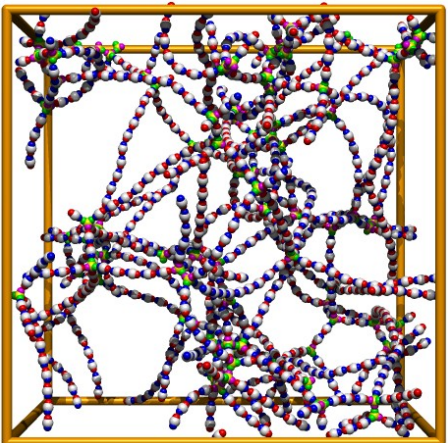
Supramolekulární chemie: skládání molekul pomocí (zpravidla) nekovalentních sil (van der Waals, vodíkové vazby) do strukturovaných celků

● Ukázka: dvoufunkční částice v roztoku \approx Janus particles



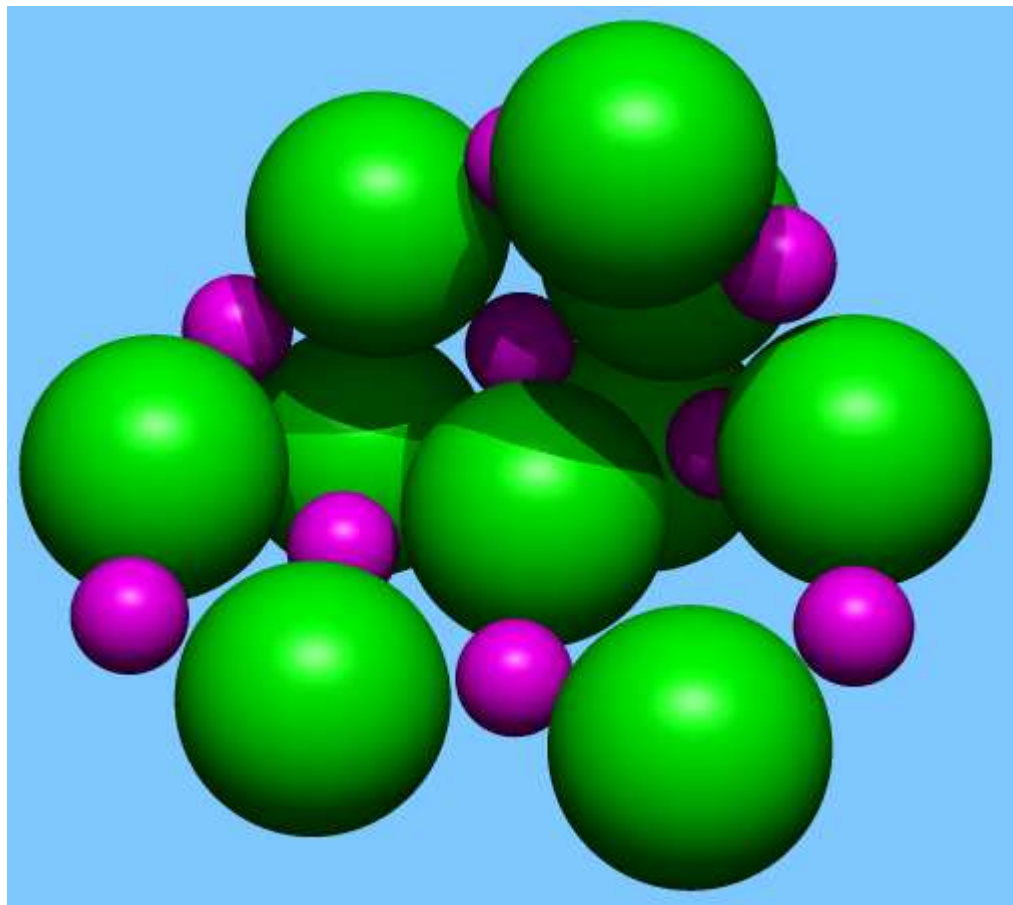
credit: wikipedia, www.nasa.gov/mission_pages/cassini

● Ukázka: + čtyřfunkční částice

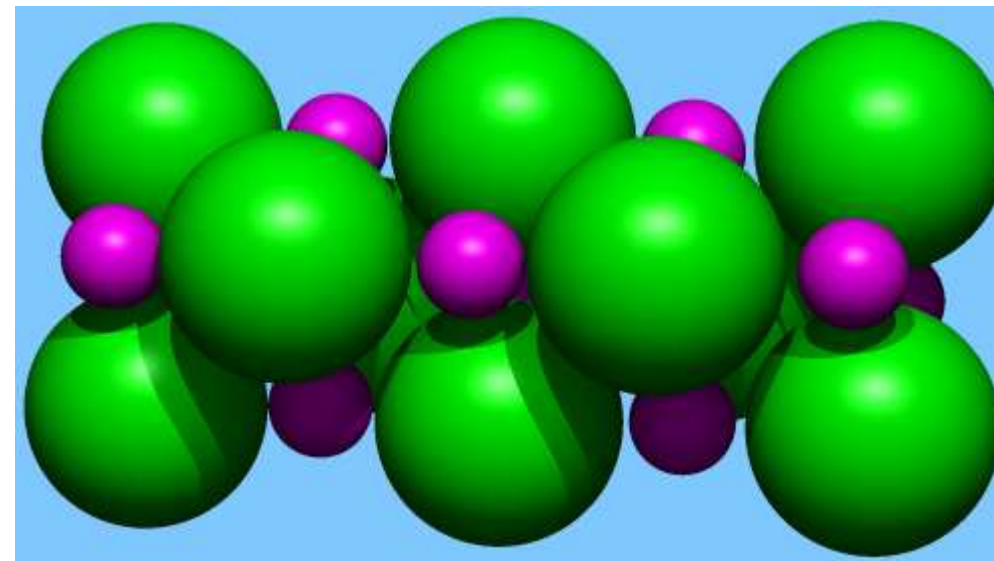


credit: Atwood et al., *Science* 309, 2037 (2005)

Minimum energie (modelu) klastru $\text{Na}_{10}\text{Cl}_{10}$



rychlé chlazení (kalení)
minimalizace energie metodou
konjugovaných gradientů



pomalé chlazení (popouštění)
„simulované žhání“
simulace MD za snižující se teploty
(Berendsenův termostat)

Simulované žíhání (*simulated annealing*)

Hledáme globální minimum funkce („energie“) s mnoha lokálními minimy

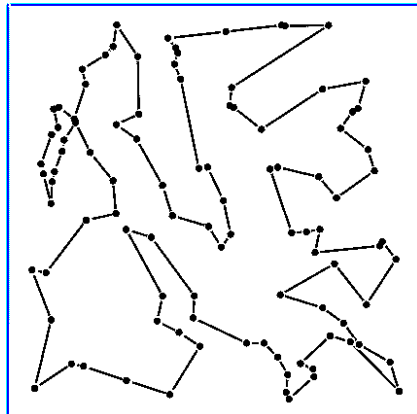
- Začneme nějakou špatnou konfigurací (např. náhodnou)
- Navrhujeme vhodné změny konfigurace $A_i \rightarrow A_j$
- Aplikujeme Metropolisovu metodu za snižující se „teploty“ T

Příklad: Problém obchodního cestujícího (*traveling salesman*)

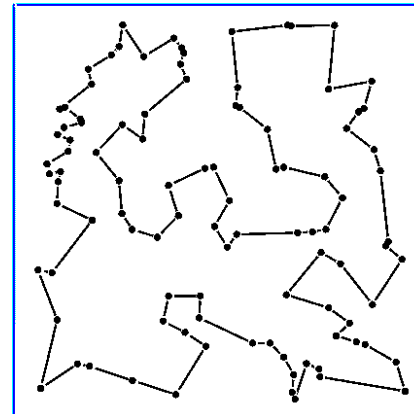
- 100 měst náhodně ve čtverci 1×1
- Konfigurace = pořadí měst
- „energie“ = délka cesty
- Změna konfigurace = záměna 2 náhodně zvolených měst

for me (uvodsim/salesman.sh):
- random start
- numerical results in the console

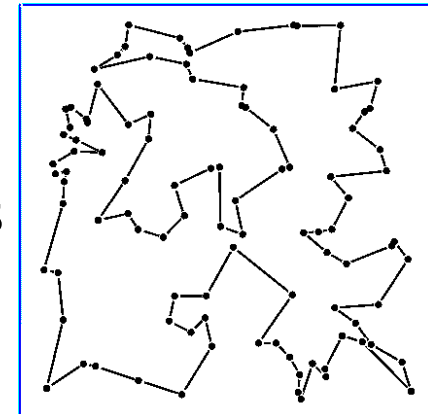
“greedy”
(Metropolis $T = 0$)
 $l = 8.5778$



simulované
žíhání
 $l = 7.6663$



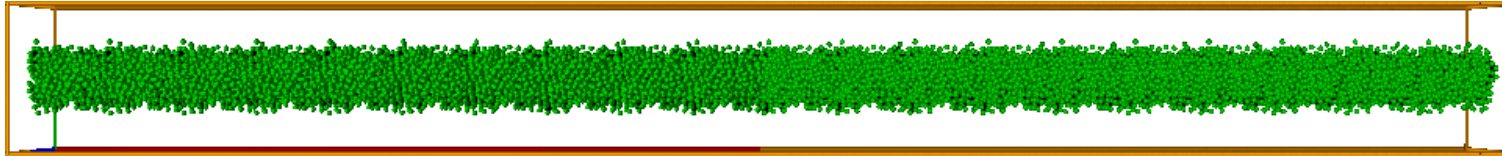
genetický
algoritmus
 $l = 8.1817$



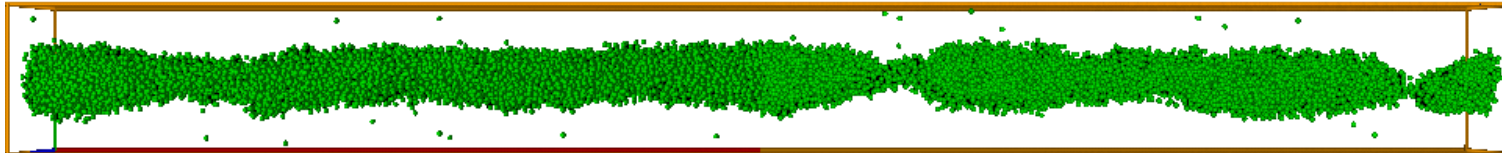
(Plateauova-)Rayleighova nestabilita

Čúrek vody se rozpadá na kapky.

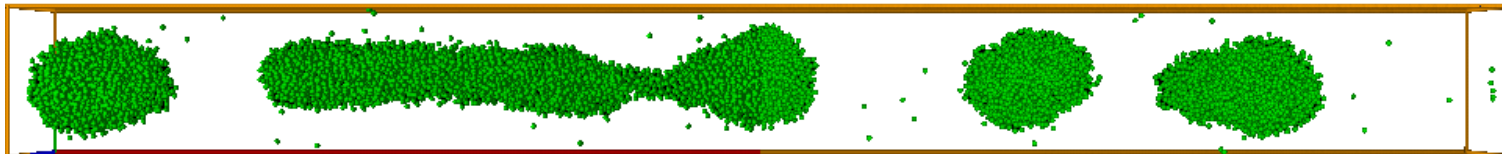
Pro poruchu $\propto \sin(kz)$ vznikne nestabilita pro $kr < 1$,
maximální nestabilita pro $kr = \ln 2$.



1/2101



992/2101



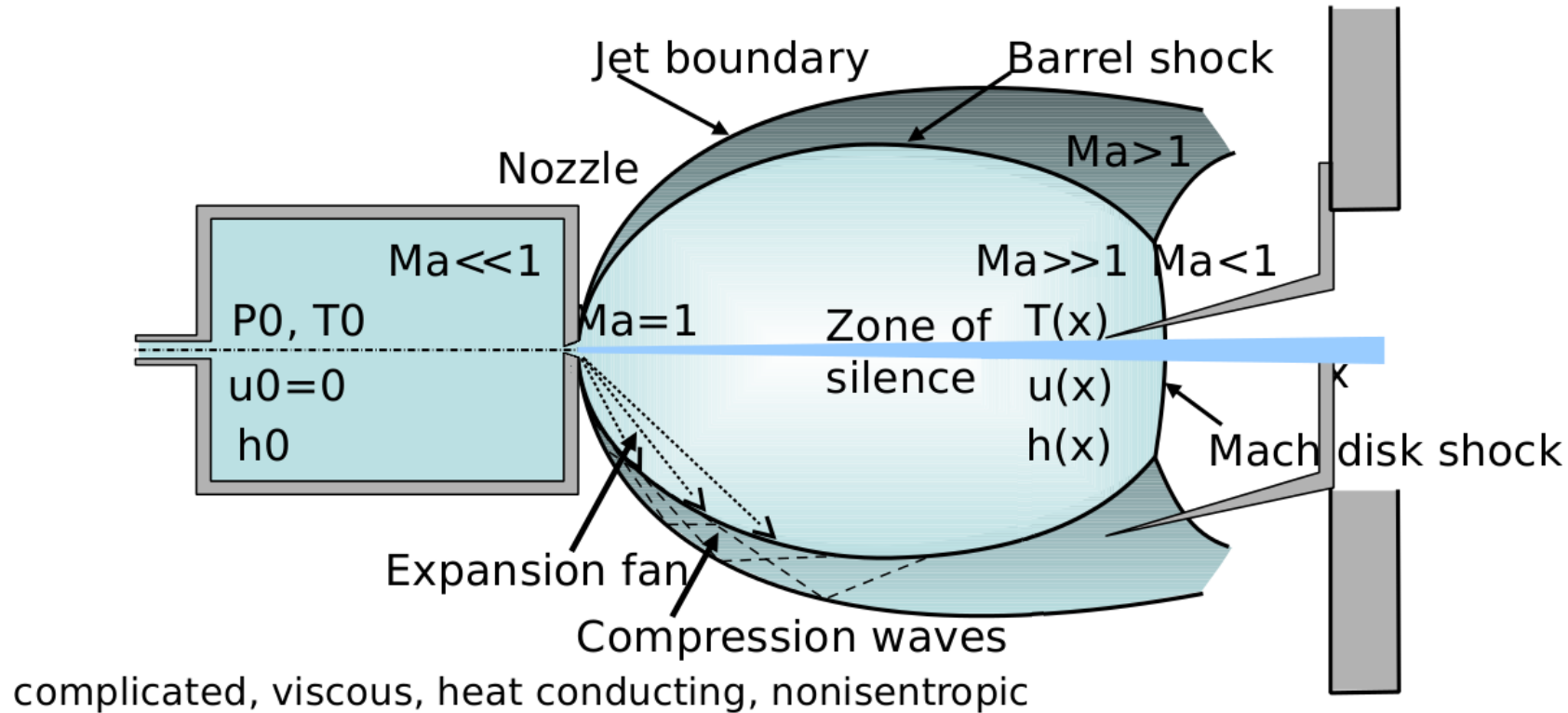
1366/2101



Nukleace při supersonické expanzi

Vodní pára o tlaku cca 5 bar se pouští velmi úzkým otvorem přes trysku do vakua a adiabaticky se ochlazuje pod bod mrazu. Lze tak studovat např. chemické reakce ve stratosféře.

Free Jet Expansion



credit: M. Fárník

Otázka: Jaký je tvar, velikost a struktura klastrů ledu?

J. Klíma, J. Kolafa: *J. Chem. Theory Comput.* **14**, 2332–2340 (2018)

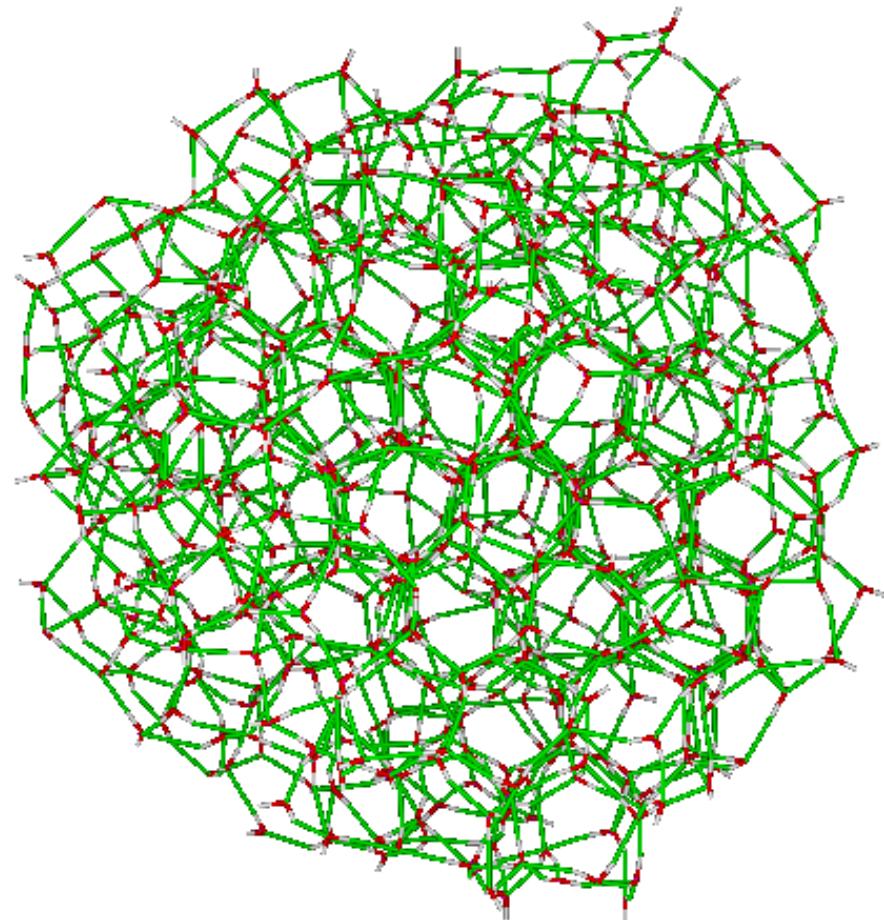
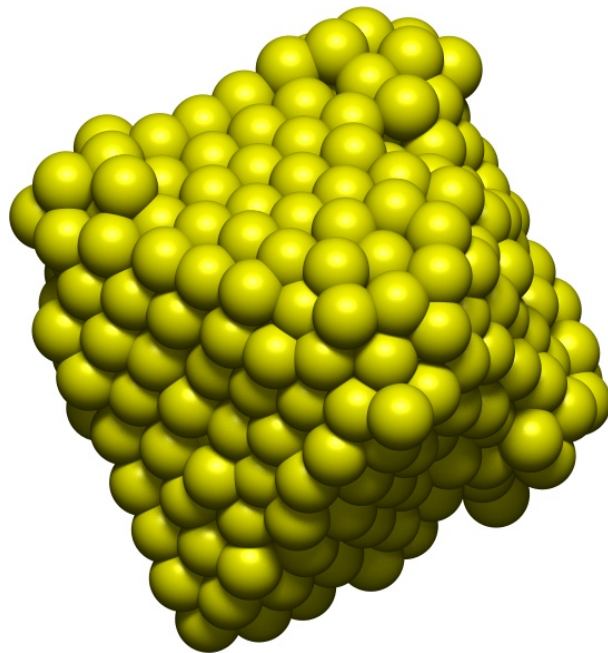
led

- kroupa z 600 molekul vody (led Ih)
- postupné ohřívání
- čas simulace = 5 ns
- tento model vody taje při 250 K

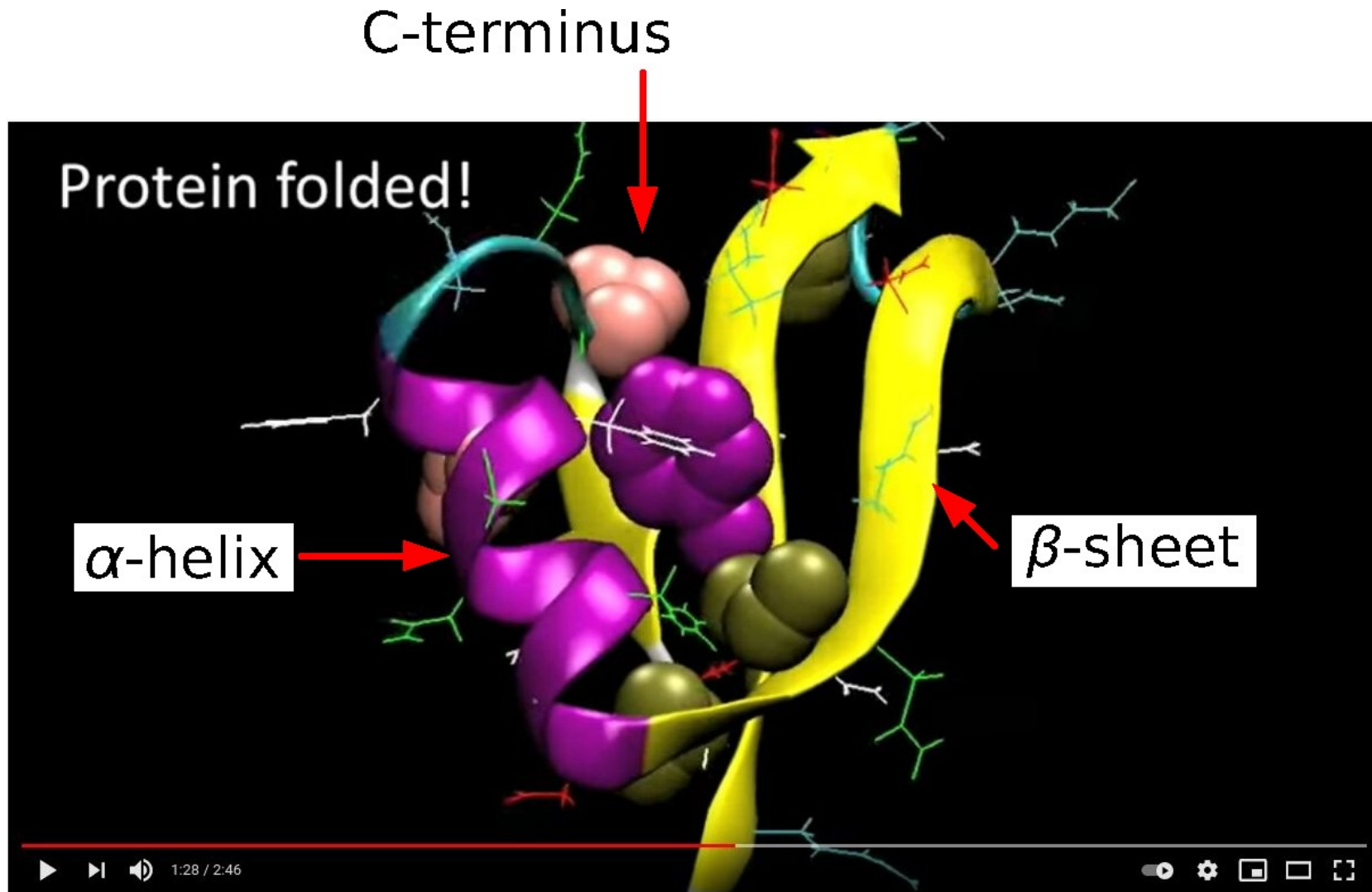
zlato

- nanokrystal s 489 atomy zlata
- postupné ohřívání
- čas simulace = 77 ps

nanočástice tají při nižší teplotě



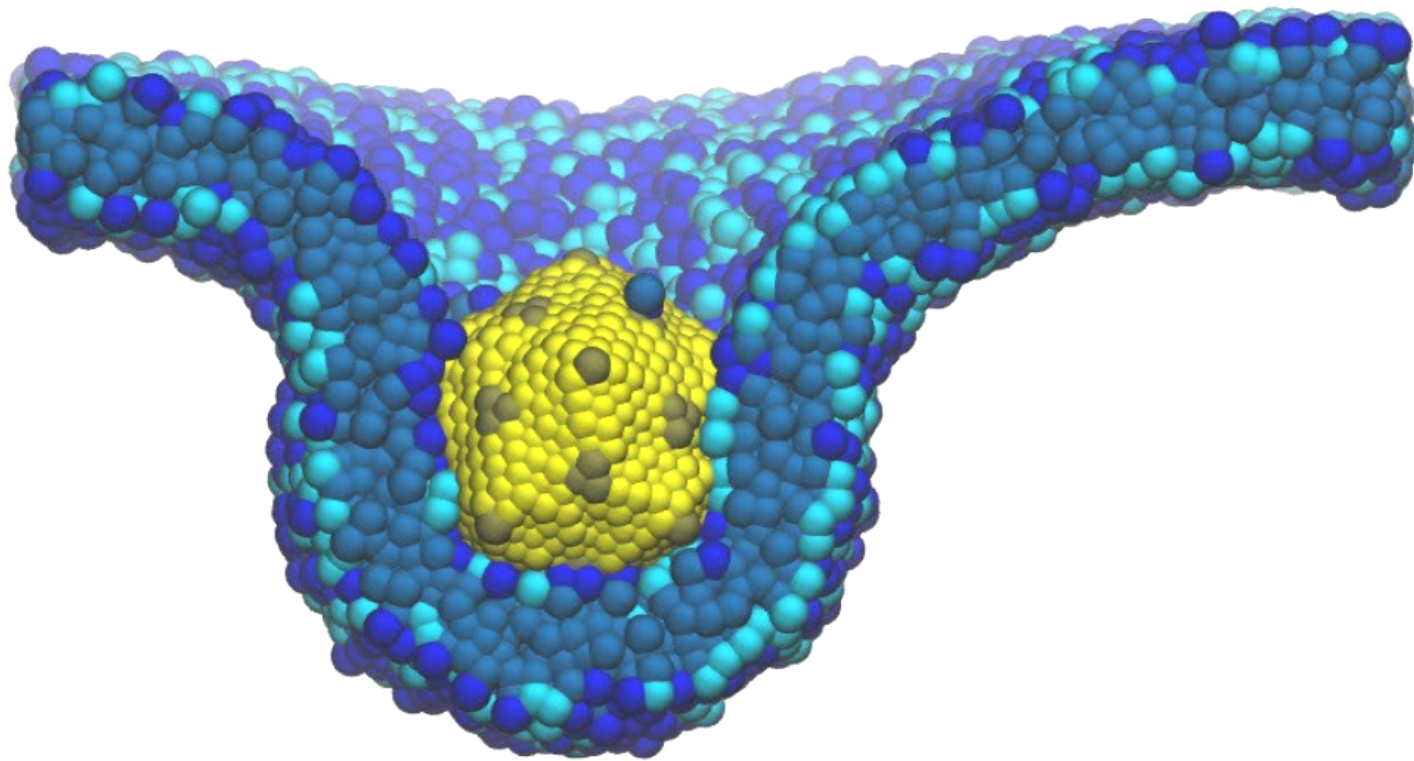
Protein folding on the millisecond timescale



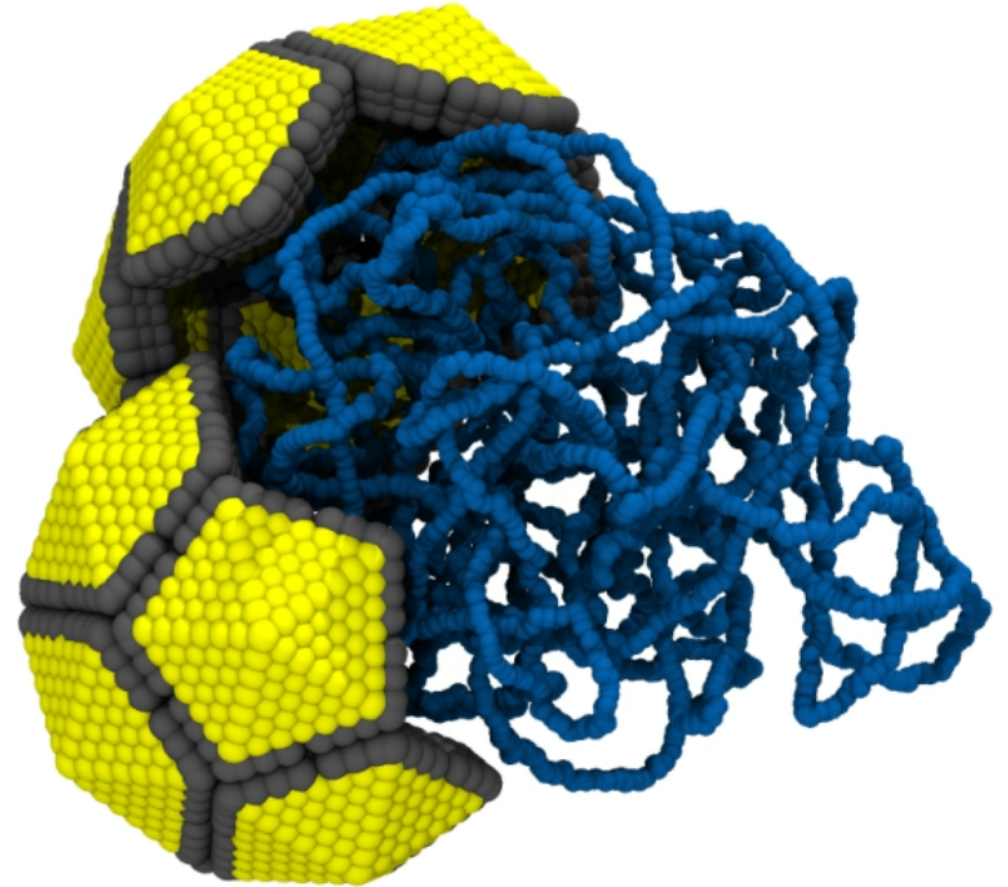
Credit: Pande Lab Science, <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja9090353>

Hrubozrnné simulace

- zhrubený (hrubozrnný, *coarse-grain*) model, Langevinův termostat (náhodné síly)
- voda není ukázána

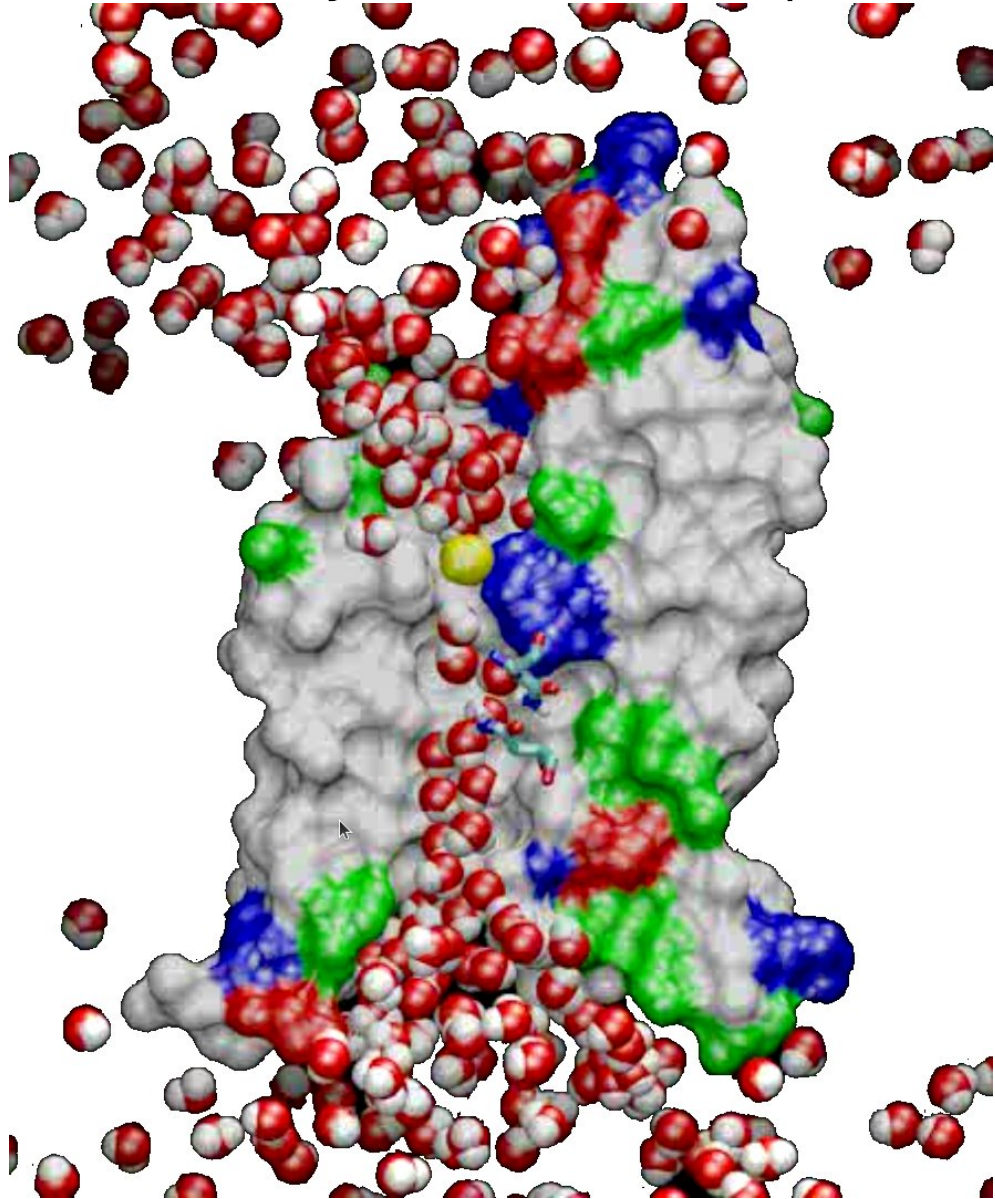


endocytoza

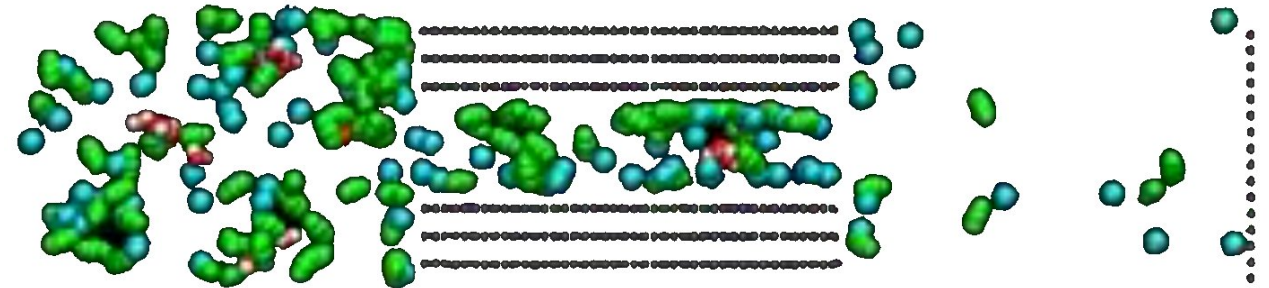


uvolnění RNA z kapsidy

difuze vody skrz kanál akvaporinu

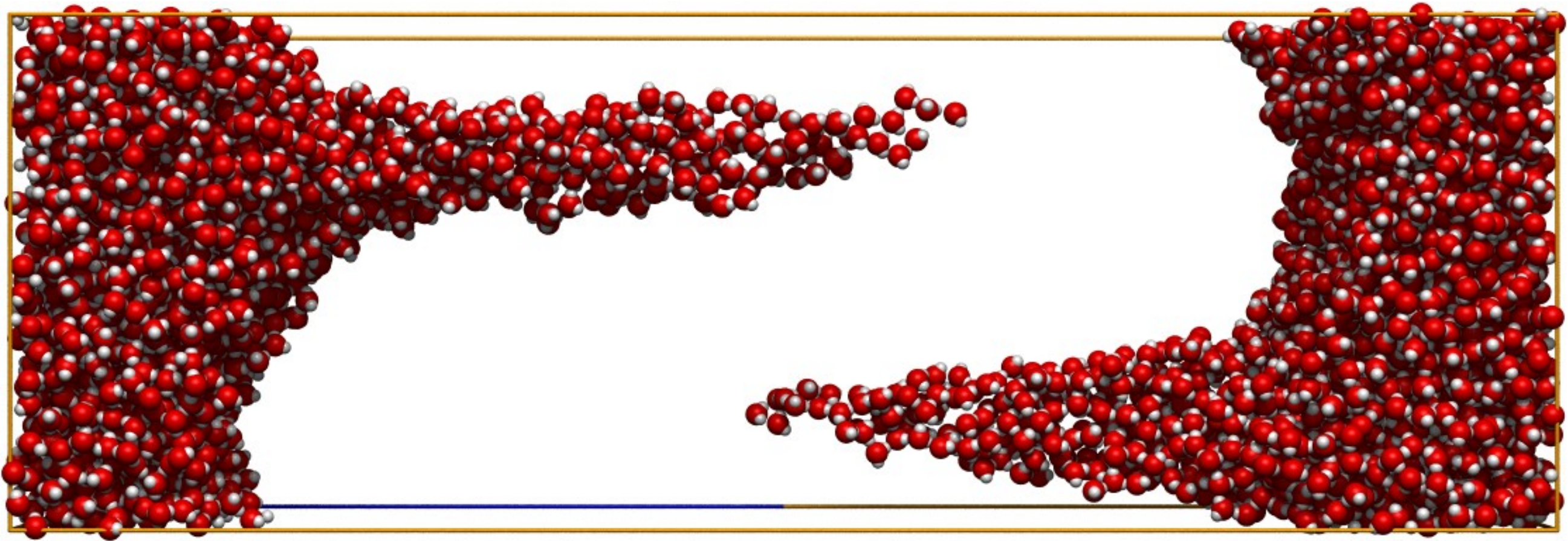


permeace uhlíkovou nanotrubičkou



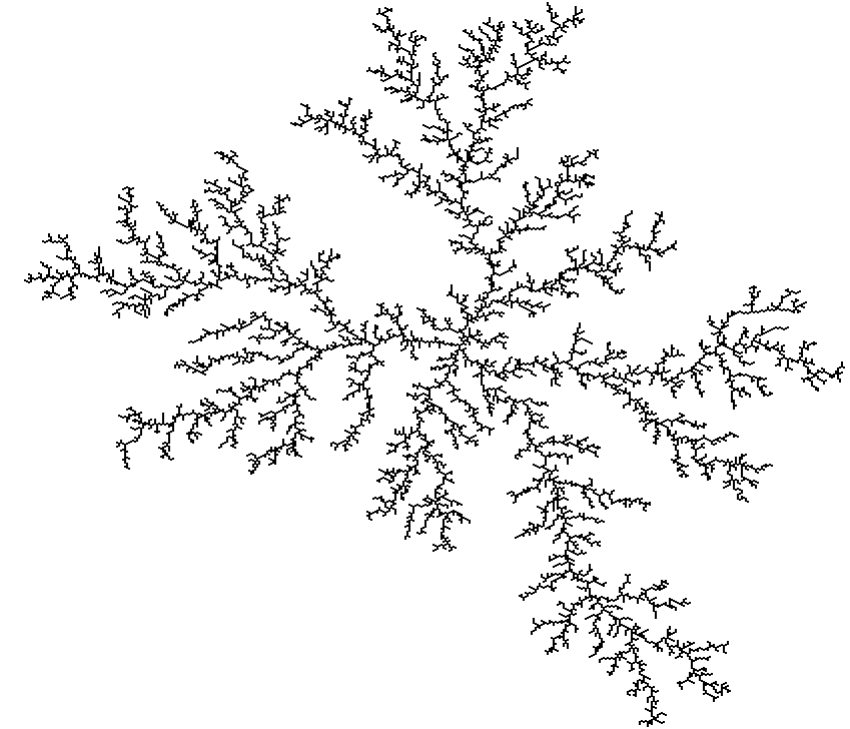
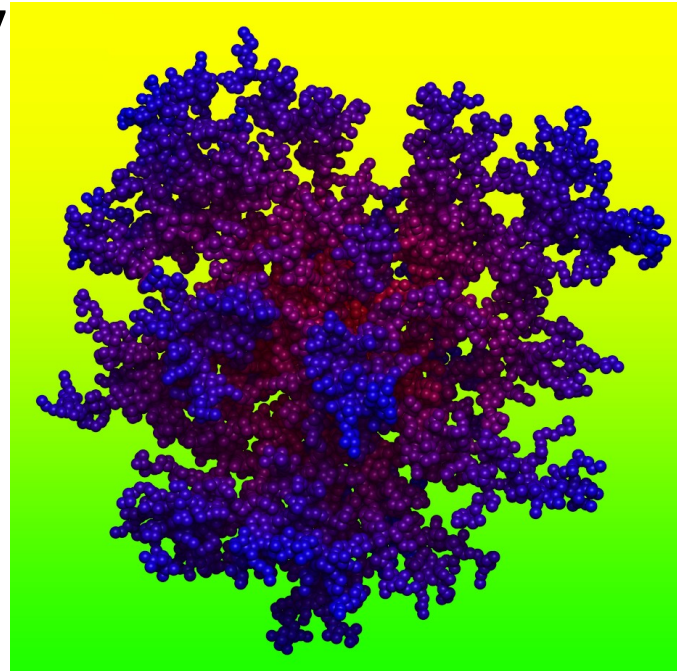
Electrospinning

- 5000 molekul SPC/E vody, pole 1.5 V/nm, čas simulace 135 ps
- vzniká tzv. Taylorův kužel, který se protáhne na vlákno, jež je stabilizované elektrickým polem



Fraktální dimenze – náhodné fraktály

- Trajektorie Brownova pohybu (náhodná procházka s protínáním, lineární polymer v θ -rozpouštědle): $D = 2$
- Náhodná procházka bez protínání (lineární polymer v dobrém rozpouštědle) ve 3D: $D = 1.7$
- Dendrimer vzniklý difuzně řízenou agregací (ve 2D): $D = 1.7$
- Dendrimer vzniklý difuzně řízenou agregací (ve 3D): $D = 2.5$
- Brokolice $D = 2.66$
- Povrch plic $D = 2.97$

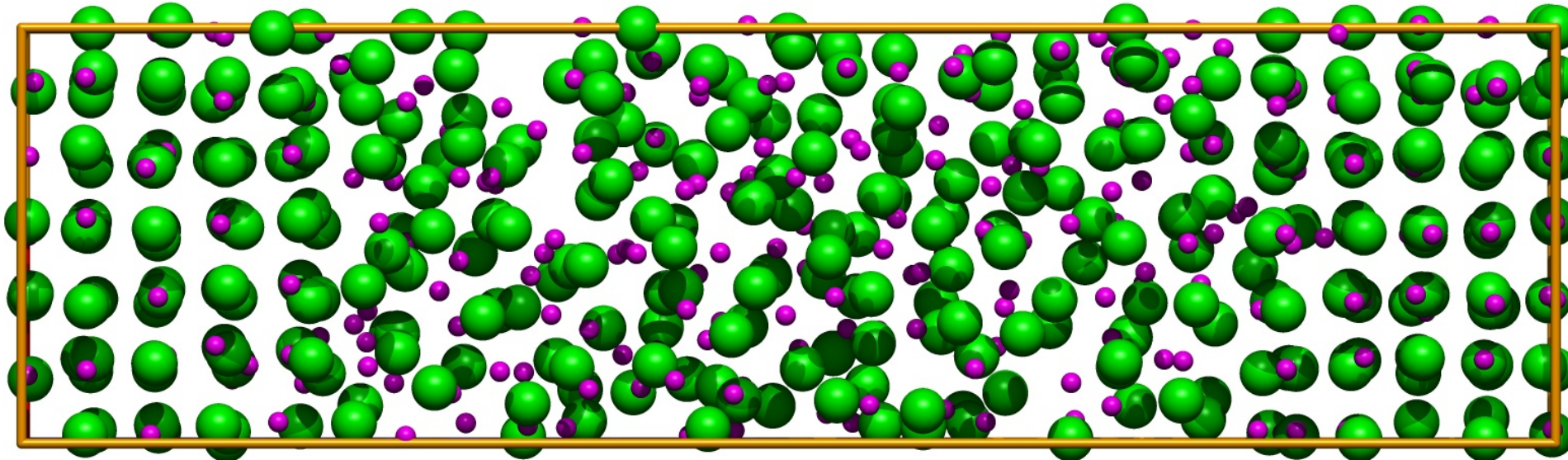
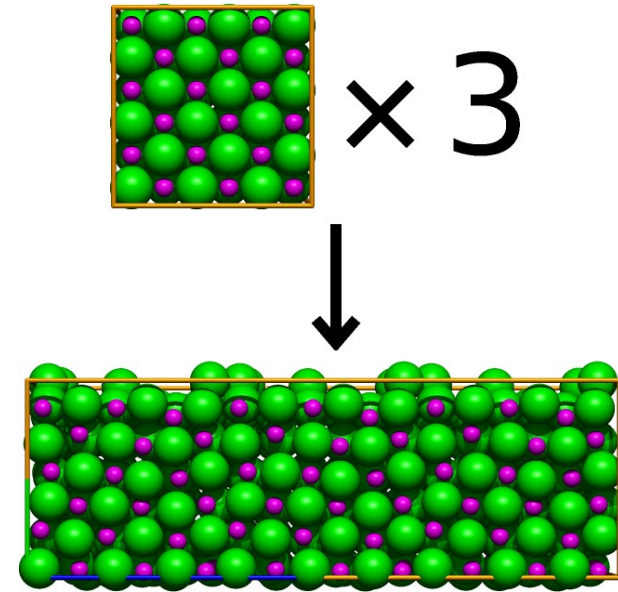


elektrodepozice mědi →

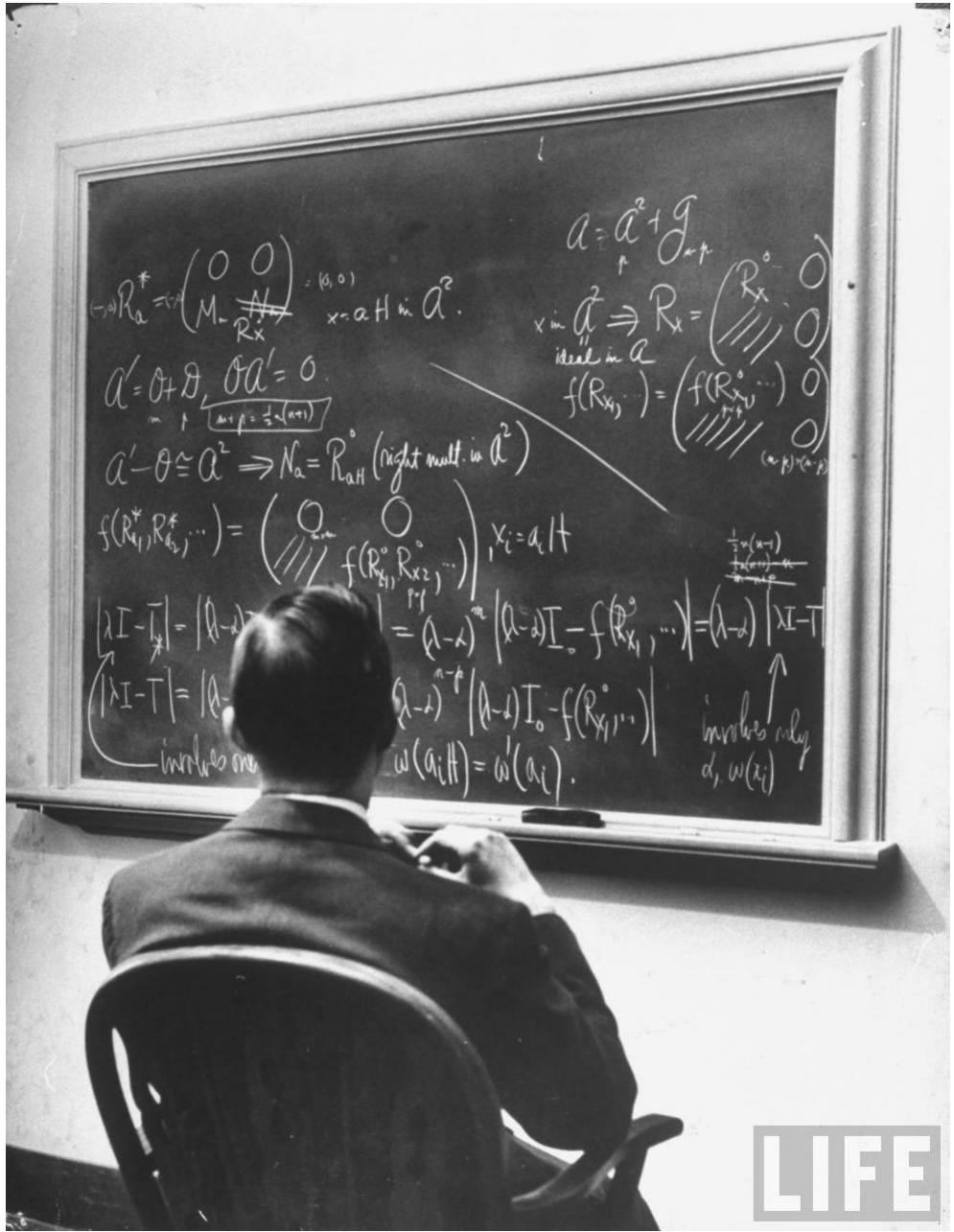
credit: wikipedia

Ukázka: „zonální tavba“ krystalu NaCl

- příprava krystalku $\text{Na}_{108}\text{Cl}_{108}$
- simulace krystalku za dané teploty a tlaku \Rightarrow rovnovážná velikost
- příprava trojnásobného krystalku (hranol)
- roztavení poloviny krystalku
delší rozměr se může měnit za konstantního tlaku
- simulace v rovnováze: krystal roste: $T < T_{\text{tání}}$
krystal taje: $T > T_{\text{tání}}$



Konec úvodu – teď nastane přednáška...



LIFE

Např dva atomy argonu ● ● ve vzdálenosti r

Odpuzování (repulze) na kratších vzdálenostech je způsobeno překryvem orbitalů:

● Pauliho repulze: $u(r) \propto e^{-\text{const}r}$

● méně přesně: $u(r) \propto r^{-12}$

● kvalitativně: tuhá koule (tuhé těleso)

Přitahování (atrakce) na delších vzdálenostech
– model fluktuující dipól–indukovaný dipól:

$$E \propto \frac{1}{r^3}, \quad \mu_{\text{ind}} \propto E, \quad u(r) \propto E\mu_{\text{ind}}$$

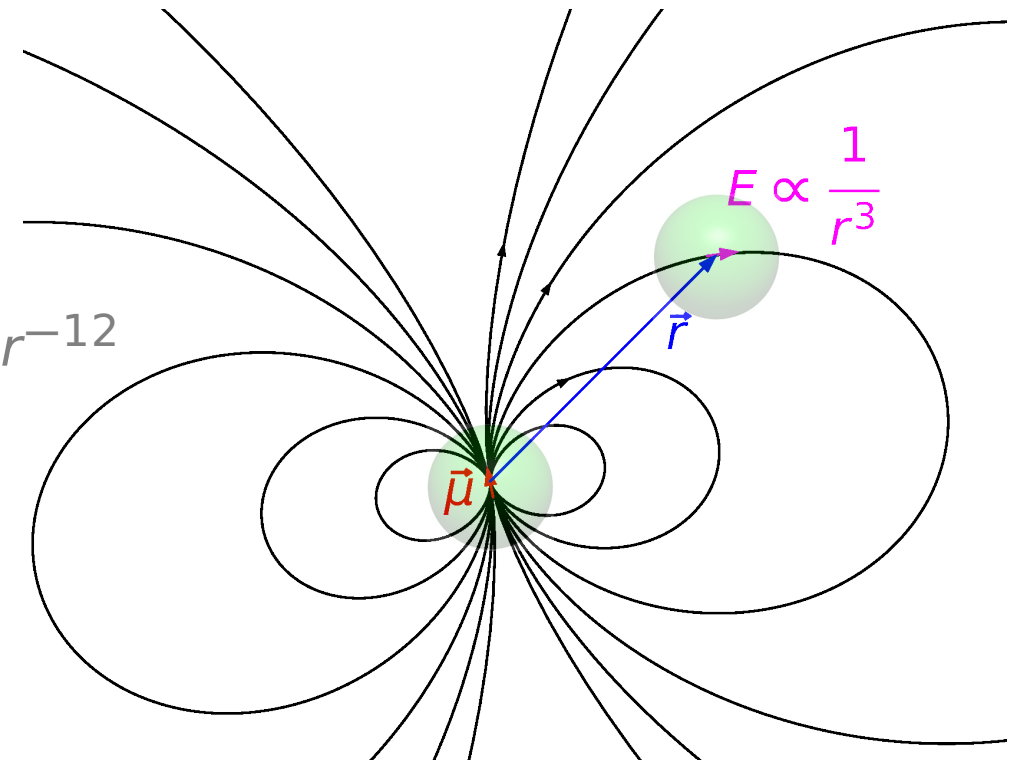
● Londonovy (disperzní) síly: $u(r) \propto r^{-6}$ proto repulze $\approx r^{-12}$

● méně přesně: pravoúhlá jáma (*square-well*)

● ještě méně přesně: dlouhodosahové pozadí

Tyto interakce působí mezi všemi atomy ve všech molekulách

symbol \propto znamená „je úměrný“



Lennard-Jonesův potenciál

$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$$

odpudivý člen

přitažlivý člen

● ε = hloubka potenciálové jámy

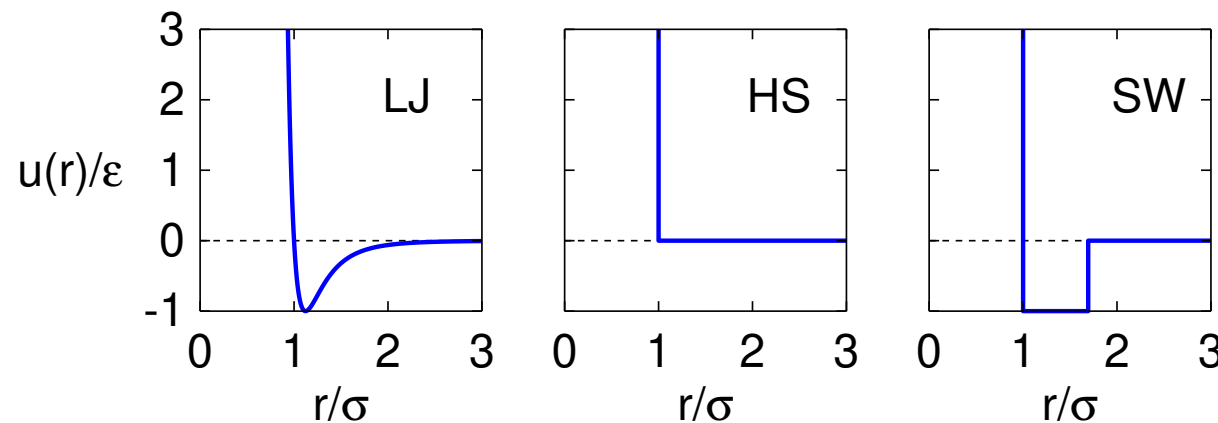
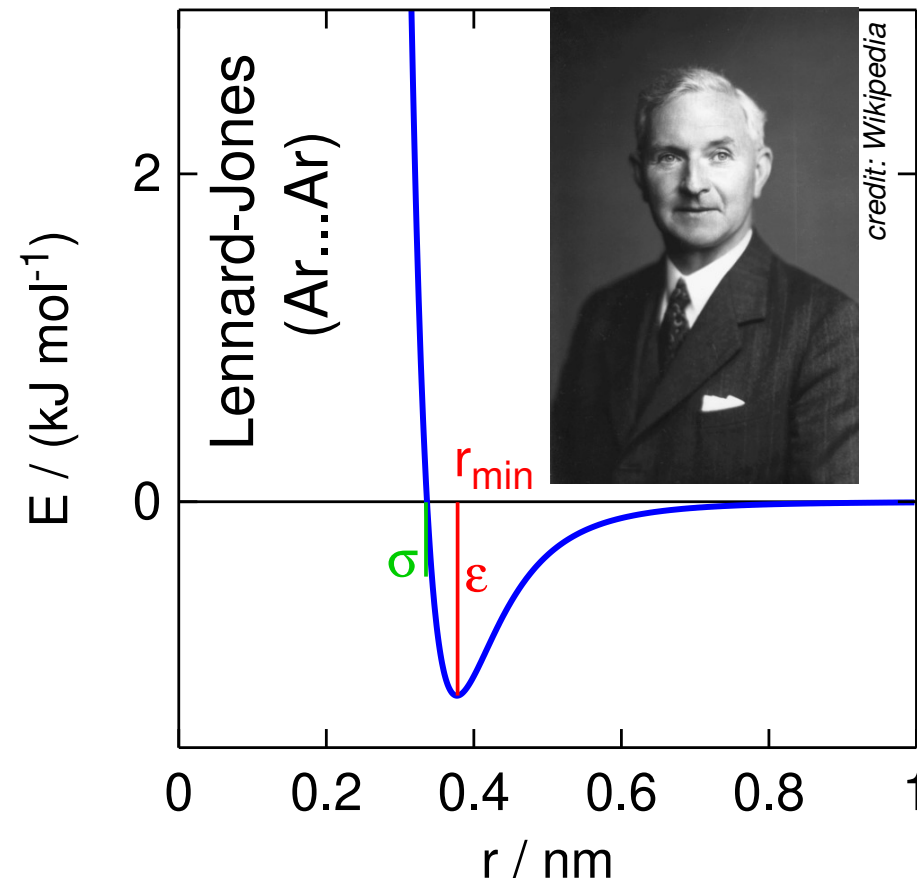
● σ = velikost atomu

Tuhá koule + pravoúhlá jáma

hard sphere + square well

$$u(r) = \begin{cases} \infty & \text{pro } r < \sigma \\ -\varepsilon & \text{pro } \sigma < r < \lambda\sigma \\ 0 & \text{pro } r > \lambda\sigma \end{cases}$$

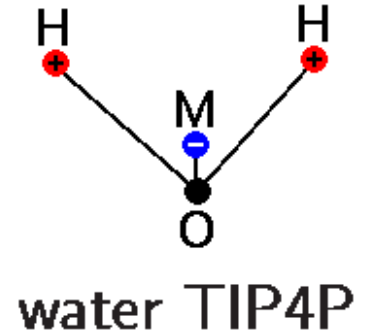
kde $\lambda > 1$



Elektrostatické síly

- ionty (a parciální náboje): $u(r) \propto r^{-1}$
- náboj–dipól: $u(r) \propto r^{-2}$ (závisí na úhlu)
- dipól–dipól: $u(r) \propto r^{-3}$ (závisí na úhlu)
- dipól–indukovaný dipól: $u(r) \propto r^{-6}$
- Londonovy (disperzní): $u(r) \propto r^{-6}$
- rotující dipóly: $u(r) \propto r^{-6}$

$$f = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2}$$
$$u = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r}$$



Síly s potenciálem ubývajícím jako $-C/r^6$ se v chemii zpravidla nazývají van der Waalsovy.

Intramolekulární síly

- vibrace vazeb a úhlů, torze, ...

Když všechno vyjádříme vzorcem a sečteme, dostaneme **silové pole** (*force field*)

Molekulový model či silové pole (force field) je matematický zápis energie molekuly nebo souboru molekul jako funkce souřadnic atomů, $\vec{r}_i, i = 1, \dots, N$.

malé: tuhá tělesa – rotace
(voda 25 °C: vibruje 0.05 % molekul)

velké: mnoho členů

● vazebné síly:

● vibrace vazeb (1–2): $U = K(r - r_0)^2$
Ize nahradit pevnou vazbou

● vibrace úhlů

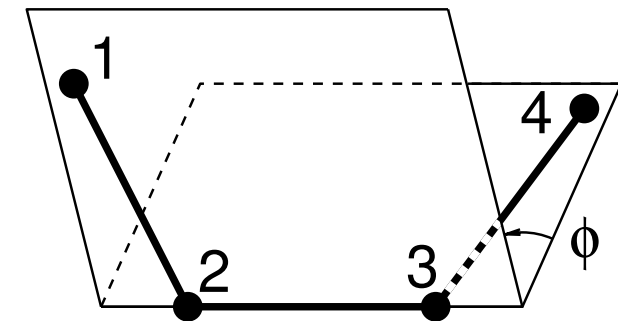
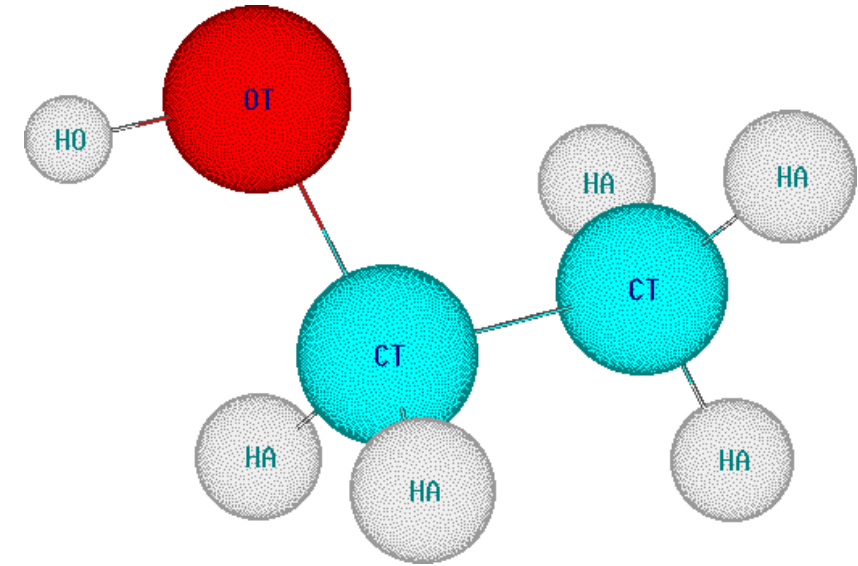
● torze (1–4) a torzní potenciál: $\sum_n K_n \cos(n\phi)$

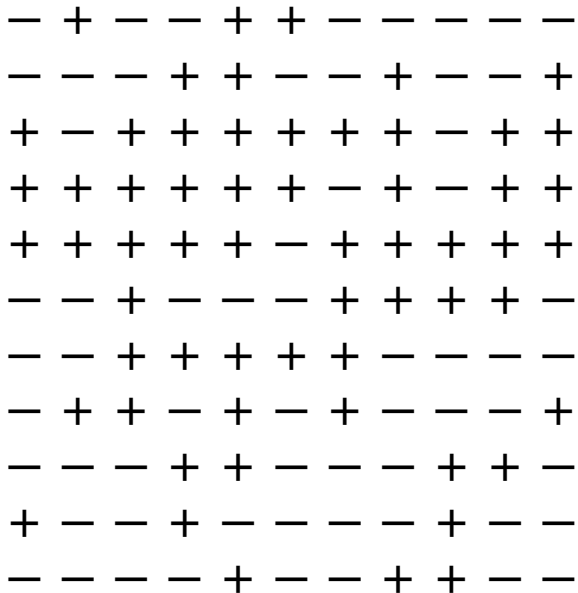
● “improper torsion” (drží $>C=O$ v rovině)

● nevazebné síly (částečně 1–4, 1–dále):
Lennard-Jones, náboje

A všechny příspěvky sečteme = aproximace **párové aditivity**

Noo, ideálně přesná není, řekněme na 90 %





Jako model **feromagnetu**:

$$U = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i$$

$$s_i \in \{-1, +1\} = \{\downarrow, \uparrow\}$$

J = interakční konstanta:

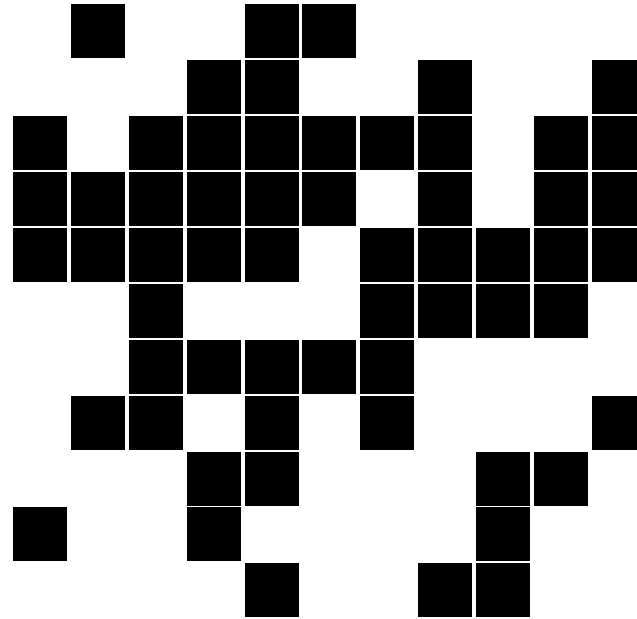
$J > 0$: feromagnet,

$J < 0$: antiferomagnet

h = intenzita magn. pole

Kritický (Curieův) bod: $h_c = 0$;

2D: $k_B T_C = 2J / \ln(1 + \sqrt{2})$



Jako **mřížkový plyn**:

$$U = -\epsilon \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + \mu \sum_i n_i$$

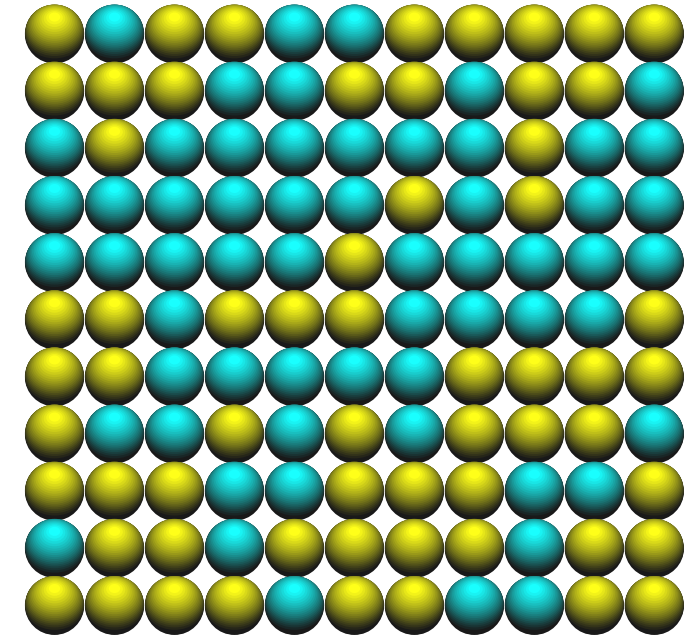
$$n_i \in \{0, 1\} = \{ \text{white square}, \text{black square} \}$$

ϵ = velikost přitažlivých sil

μ = chemický potenciál

Ekvivalence:

$$n_i = (1 + s_i)/2$$



Jako model **binární slitiny**:

$$U = - \sum_{\langle i,j \rangle} \epsilon_{k_i k_j} + \sum_i \mu_{k_i}$$

$$k_i \in \{\text{blue sphere}, \text{yellow sphere}\}$$

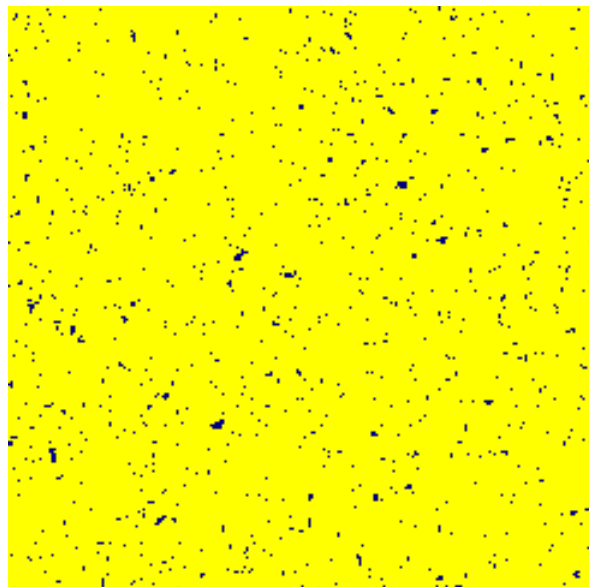
$$\epsilon_{\text{blue,blue}}, \epsilon_{\text{blue,yellow}}, \epsilon_{\text{yellow,yellow}}$$

= interakce sousedních atomů

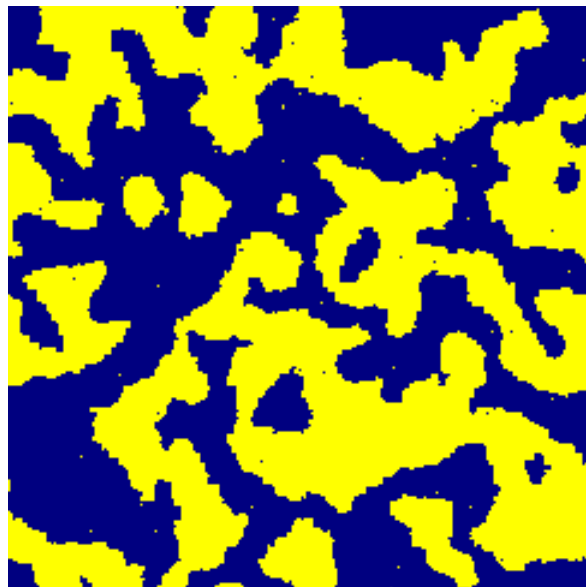
$$\mu_{\text{blue}}, \mu_{\text{yellow}} = \text{chem. pot. atomů}$$

$$\text{Ekviv.: } n_i = 0 \sim k_i = \text{blue sphere}$$

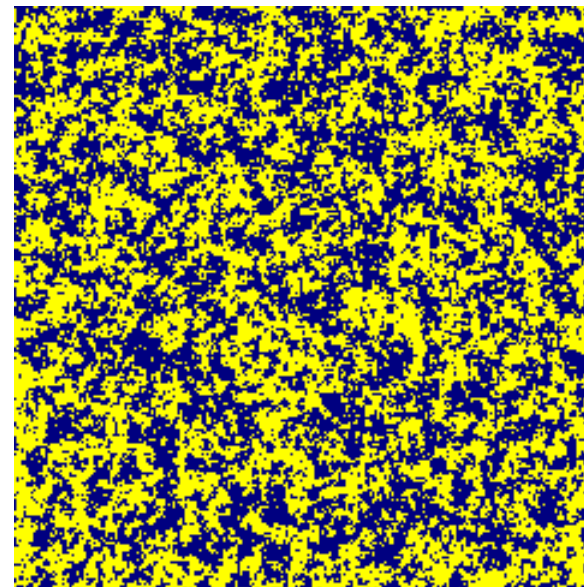
$$n_i = 1 \sim k_i = \text{yellow sphere}$$



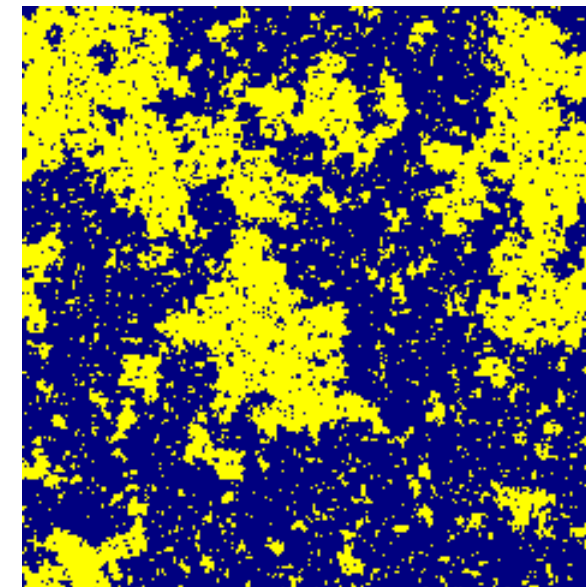
nízká teplota
 $0.8T_c$
ferromagnet



rychle ochlazený systém
 $5T_c \rightarrow 0.5T_c$
spinodální dekompozice




vysoká teplota
 $1.25T_c$
paramagnet



kritický bod
 T_c

● všechny kritické body (ve stejné dimenzi) se chovají stejně

- tuhé koule ap. – nárazy
 - „klasická“ MD – integrace pohybových rovnic
 - Brownovská (stochastická) dynamika – MD + náhodné síly
- 

Teorie, kterou teprve uslyšíte:

Síla = – gradient (rychlost změny) potenciální energie:

$$\vec{f}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}^N)}{\partial \vec{r}_i} \quad i = 1, \dots, N$$

Newtonovy pohybové rovnice:

$$\frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \frac{\vec{f}_i}{m_i}, \quad i = 1, \dots, N$$

... nepropadejte panice, zkusíme to ještě jednodušeji

Metoda leap-frog

rychlost = dráha (změna polohy) za jednotku času (h)

$$\vec{v}(t + h/2) = \frac{\vec{r}(t + h) - \vec{r}(t)}{h}$$

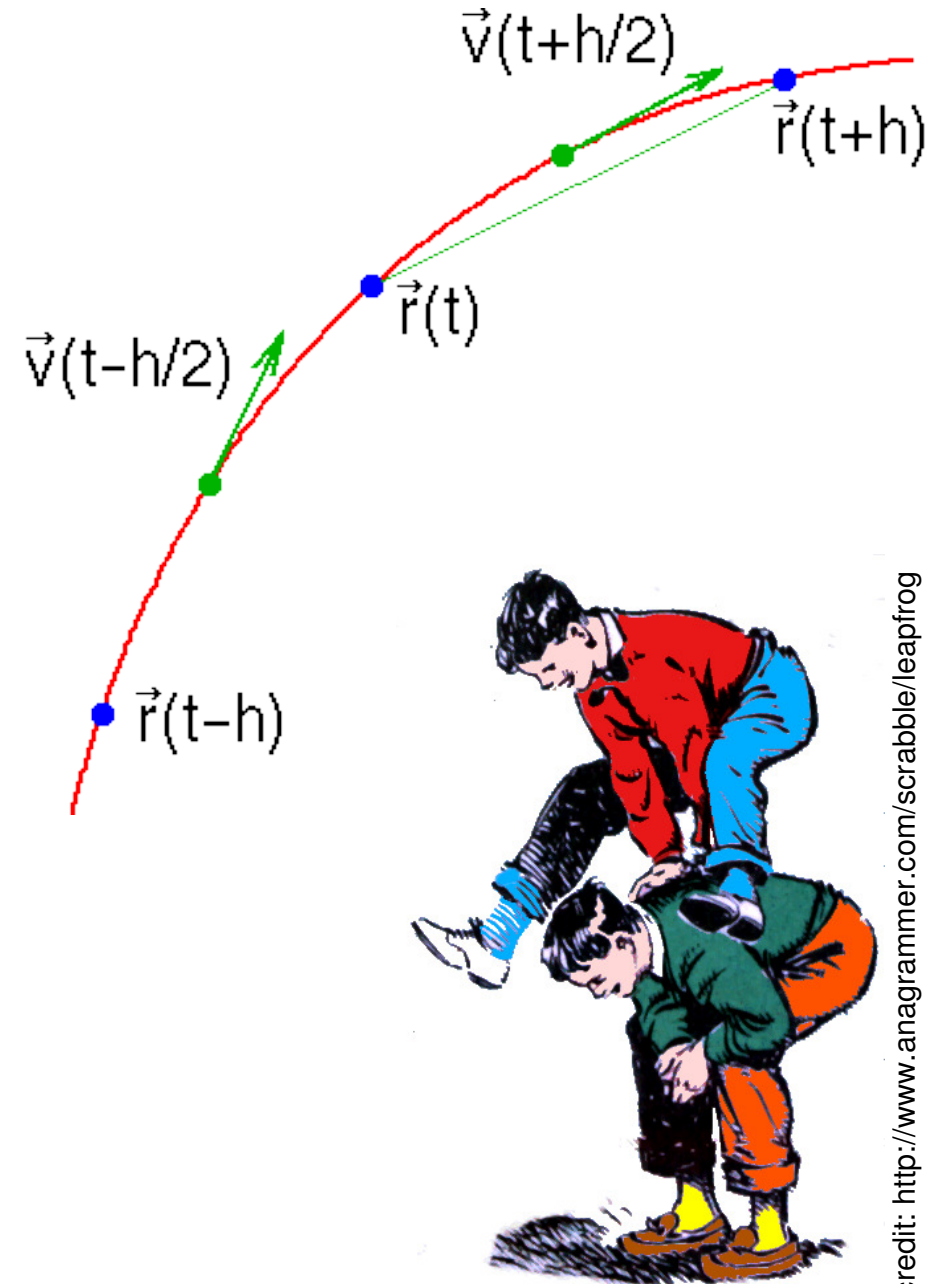
zrychlení = změna rychlosti za jednotku času

$$\vec{a}(t) = \frac{\vec{v}(t + h/2) - \vec{v}(t - h/2)}{h} = \frac{\vec{f}}{m}$$

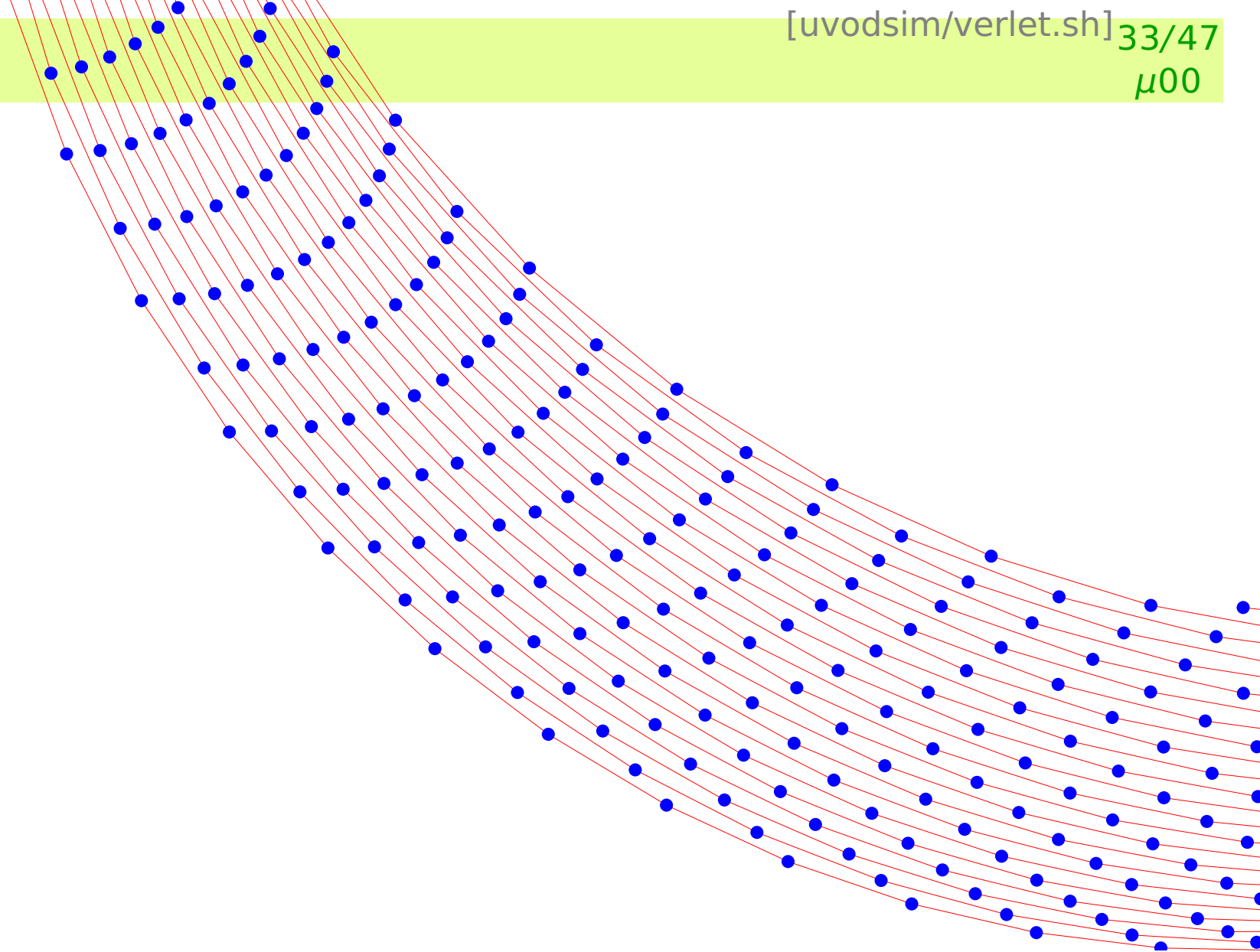
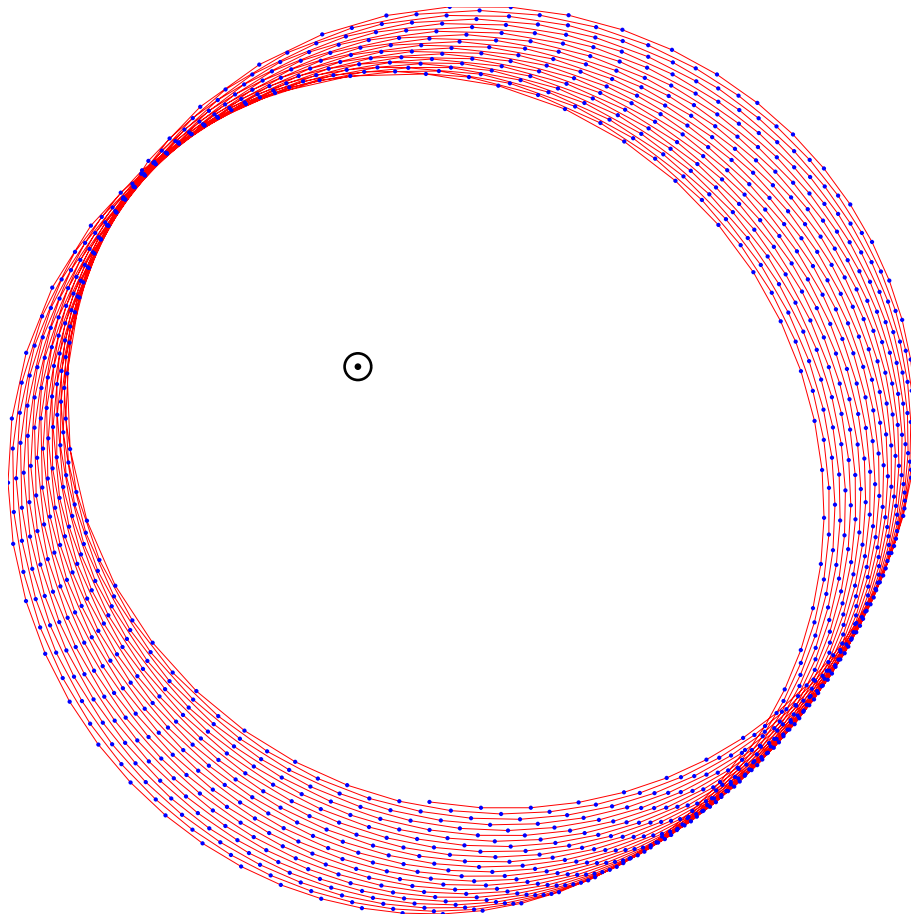
⇒

$$\left. \begin{aligned} \vec{v}(t + h/2) &= \vec{v}(t - h/2) + \vec{a}(t)h \\ \vec{r}(t + h) &= \vec{r}(t) + \vec{v}(t + h/2)h \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{opakujeme} \\ \text{s } t := t + h \end{array}$$

Tahle metoda se skutečně používá!



Příklad: dráha planety



V mechanickém systému se zachovává $U + E_{\text{kin}}$. **Ale kde je teplota?**

Teorie, kterou teprve uslyšíte: **Ekvipartiční teorém**

Každý stupeň volnosti odpovídající kvadratické funkci ve výrazu pro celkovou energii (pot.+kin.) přispívá $\frac{1}{2}k_{\text{B}}T$ k průměrné hodnotě.

($k_{\text{B}} = R/N_{\text{A}} = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ = Boltzmannova konstanta.)

Např. plynný argon má $U_{\text{m}} = N_{\text{A}} \frac{3}{2} k_{\text{B}} T = \frac{3}{2} RT$, protože každá složka rychlosti je kvadratická funkce a celkem jich je v molu $3N_{\text{A}}$

Ve MD simulaci proto teplotu **měříme**:

$$T = \left\langle \frac{E_{\text{kin}}}{\frac{1}{2}k_{\text{B}}f} \right\rangle = \langle T_{\text{kin}} \rangle$$

$$f = 3N - f_{\text{zachování}} \approx 3N$$

Ale užitečnější je mít **konstantní teplotu** (tj. termostat):

● přeškálování rychlostí: $\dot{r}_{i,\text{new}} = \dot{r}_i (T/T_{\text{kin}})^q$, $q < 1/2$

● náhodné šťouchance

● a další...

Monte Carlo integrace (naivní Monte Carlo)

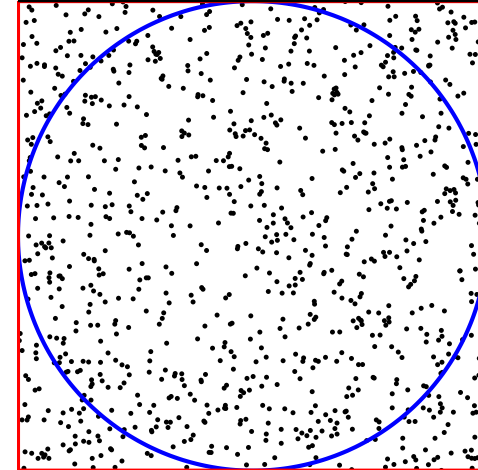
Příklad: Výpočet čísla π

```
INTEGER n celkový počet bodů
INTEGER i
INTEGER nu počet bodů v kruhu
REAL x,y souřadnice bodu ve čtverci
REAL rnd(-1,1) funkce vracející náhodné číslo v intervalu (-1, 1)

nu := 0
FOR i := 1 TO n DO
  x := rnd(-1,1)
  y := rnd(-1,1)
  IF x*x+y*y < 1 THEN nu := nu + 1

PRINT "pi=", 4*nu/n plocha čtverce = 4

PRINT "chyba=", 4*sqrt((1-nu/n)*(nu/n)/(n-1))
```



Teorie, kterou teprve uslyšíte: **Boltzmannova pravděpodobnost**

Pravděpodobnost stavu s energií E je úměrná

$$e^{-E/k_B T}$$

Příklady:

- Barometrická rovnice pro tlak ve výšce h : Potenciální energie molekuly je $E = hmg$, a proto pro tlak (který je úměrný hustotě)

$$p = p_0 e^{-hmg/k_B T} = p_0 e^{-hMg/RT}$$

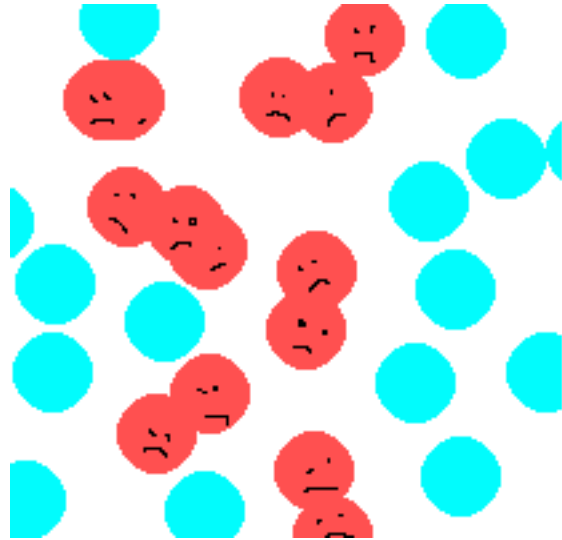
protože $R = N_A k_B$ a $M = N_A m$.

- Rychlost reakce r (často) závisí na teplotě podle vztahu

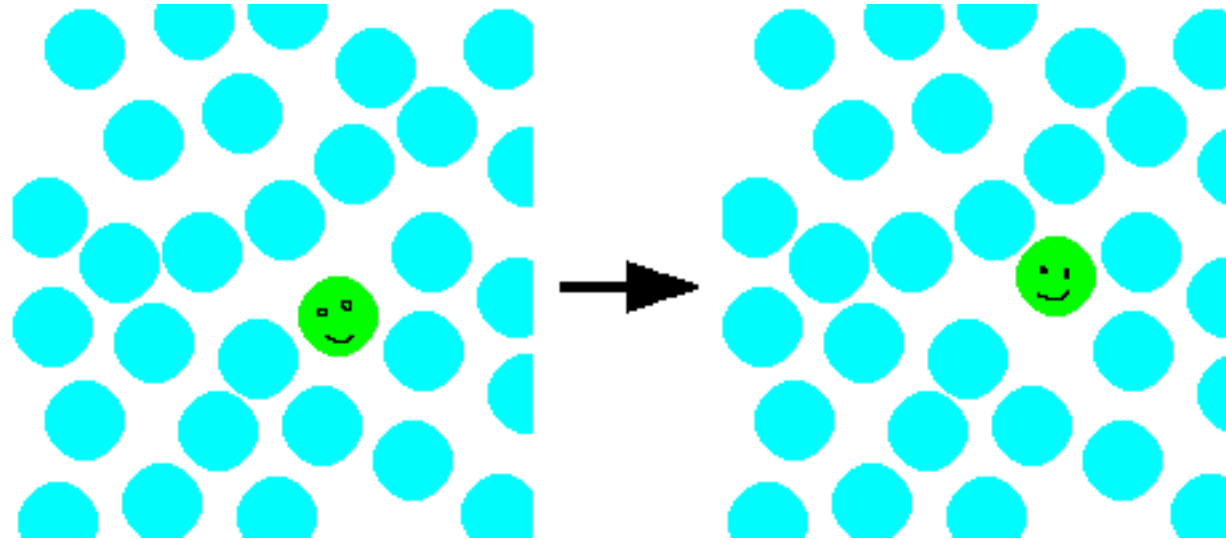
$$r = r_0 e^{-E_A/RT}$$

kde E_A je molární aktivační energie – potřebná pro to, aby reakce mohla začít probíhat.

Monte Carlo – Metropolisova metoda



naivní MC



importance sampling

ukázat:
 MC $\pm d, T$
 MD Bussi
 MD stoch.

- Zvolíme částici i , kterou se bude hýbat (nejlépe náhodně)

- \vec{r}_i^{zkus} = náhodná poloha vybrané částice (symetricky)

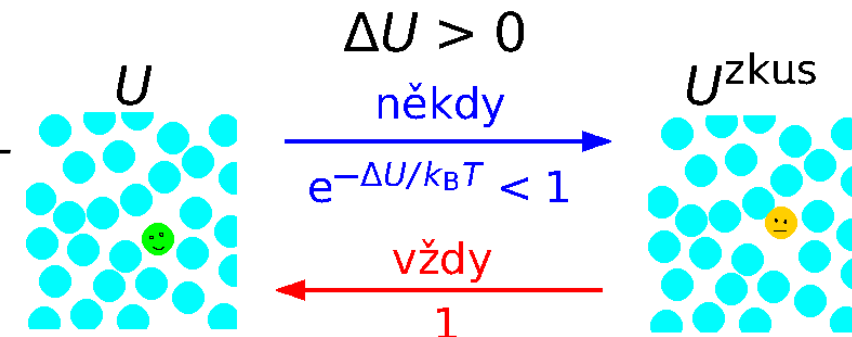
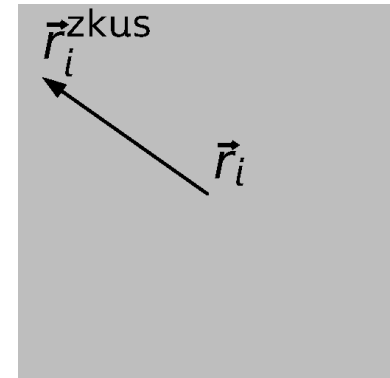
- $\Delta U = U(\vec{r}_i^{\text{zkus}}) - U(\vec{r}_i)$

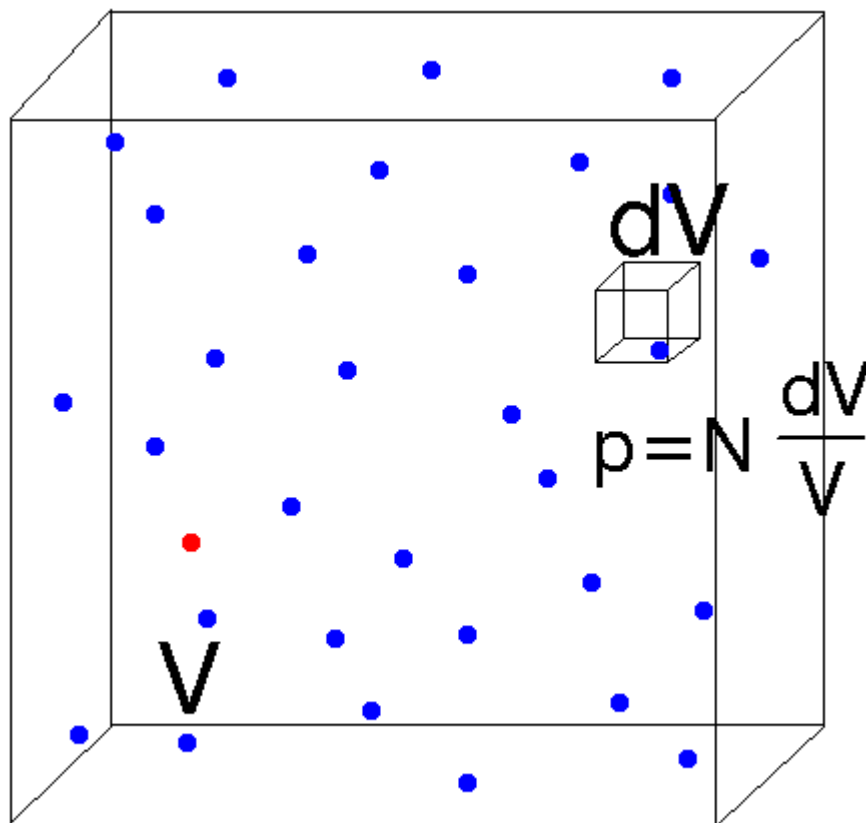
- je-li $\Delta U \leq 0$, pohyb přijmeme vždy

- je-li $\Delta U > 0$, pohyb přijmeme s pravděpodobností $e^{-\Delta U/k_B T}$

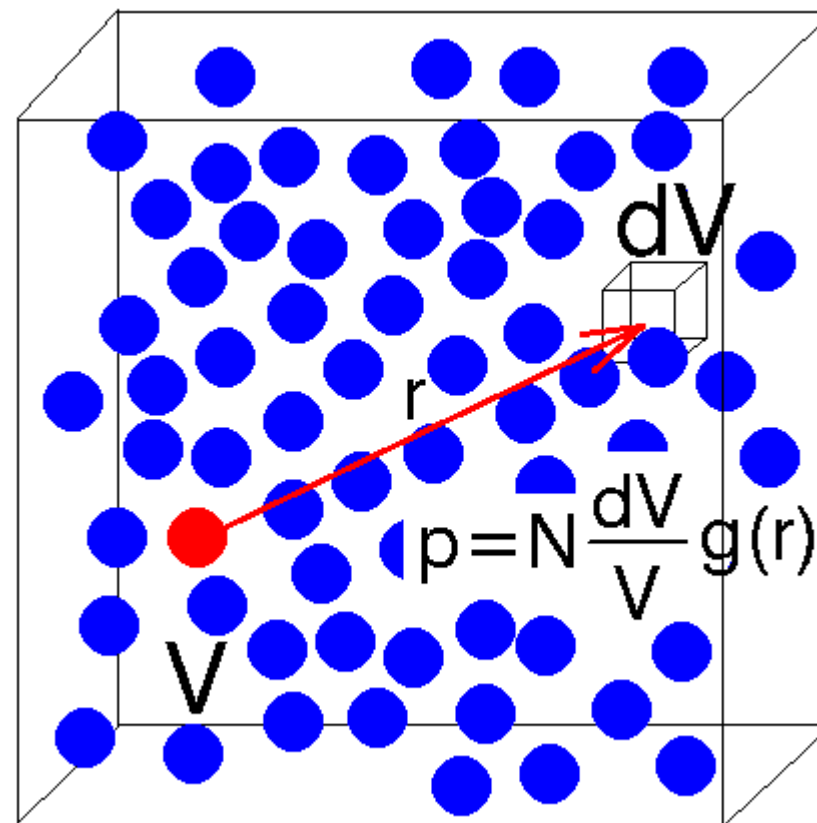
- odmítneme s pravděpodobností $1 - e^{-\Delta U/k_B T}$

- Opakujeme ...



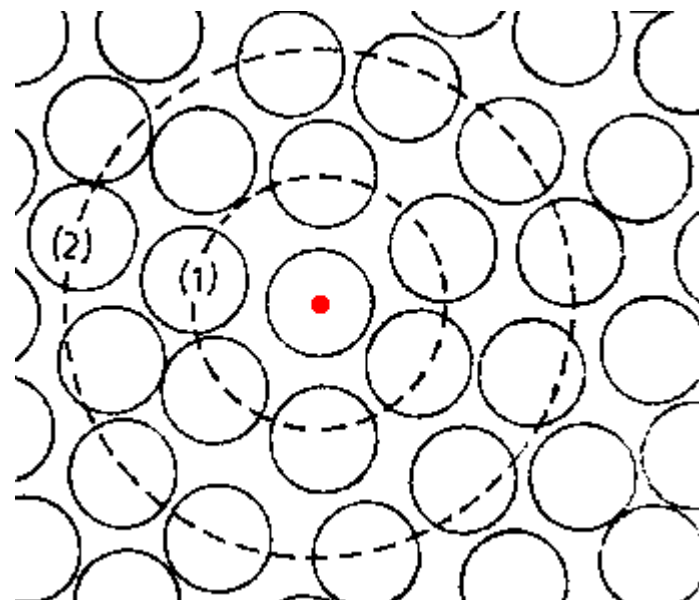
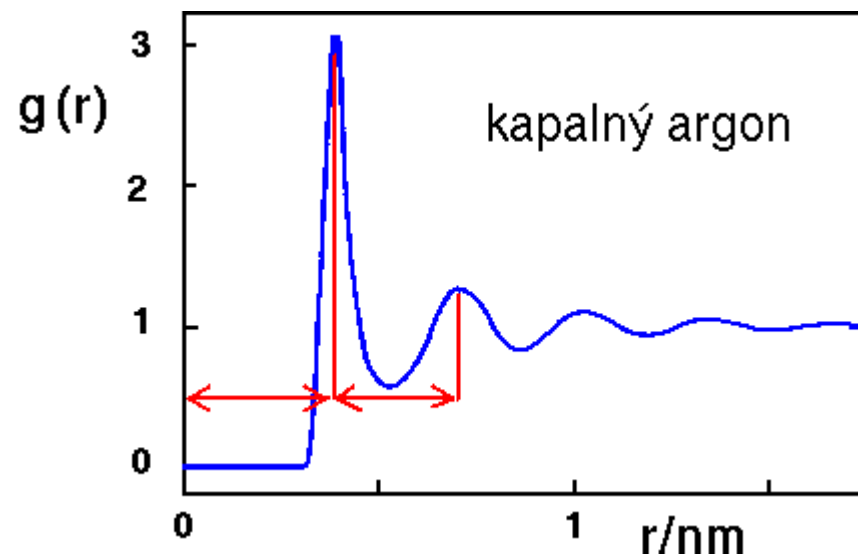
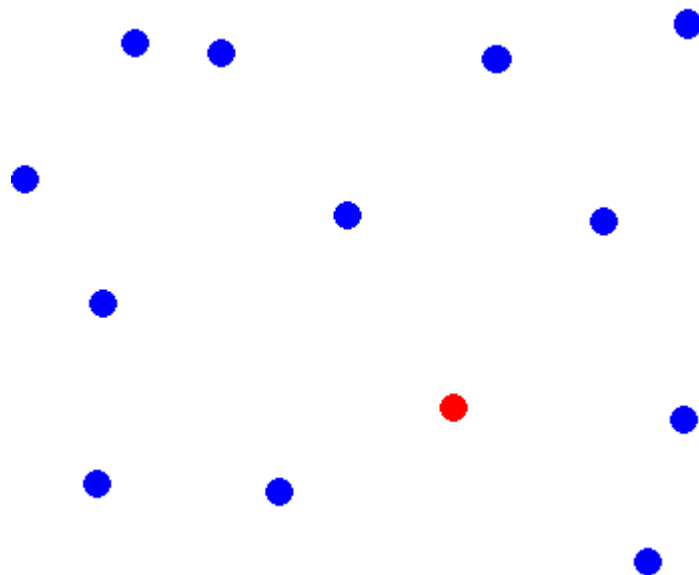
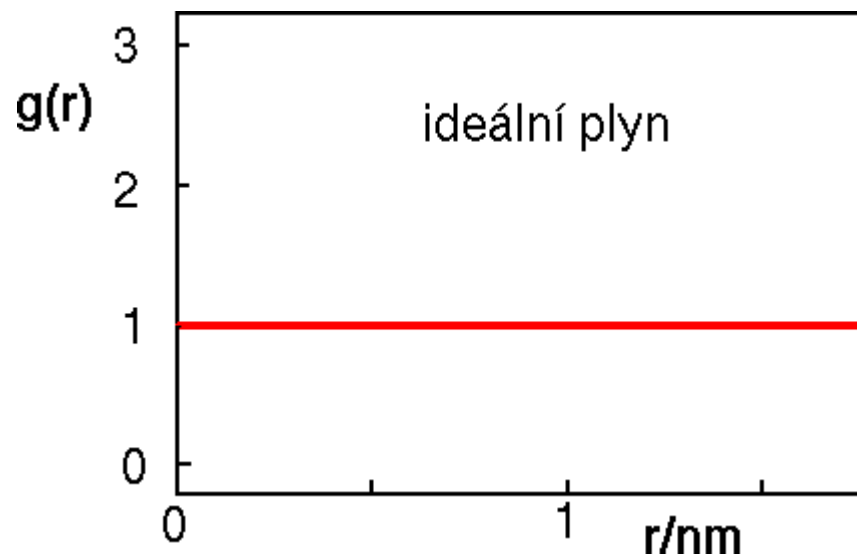


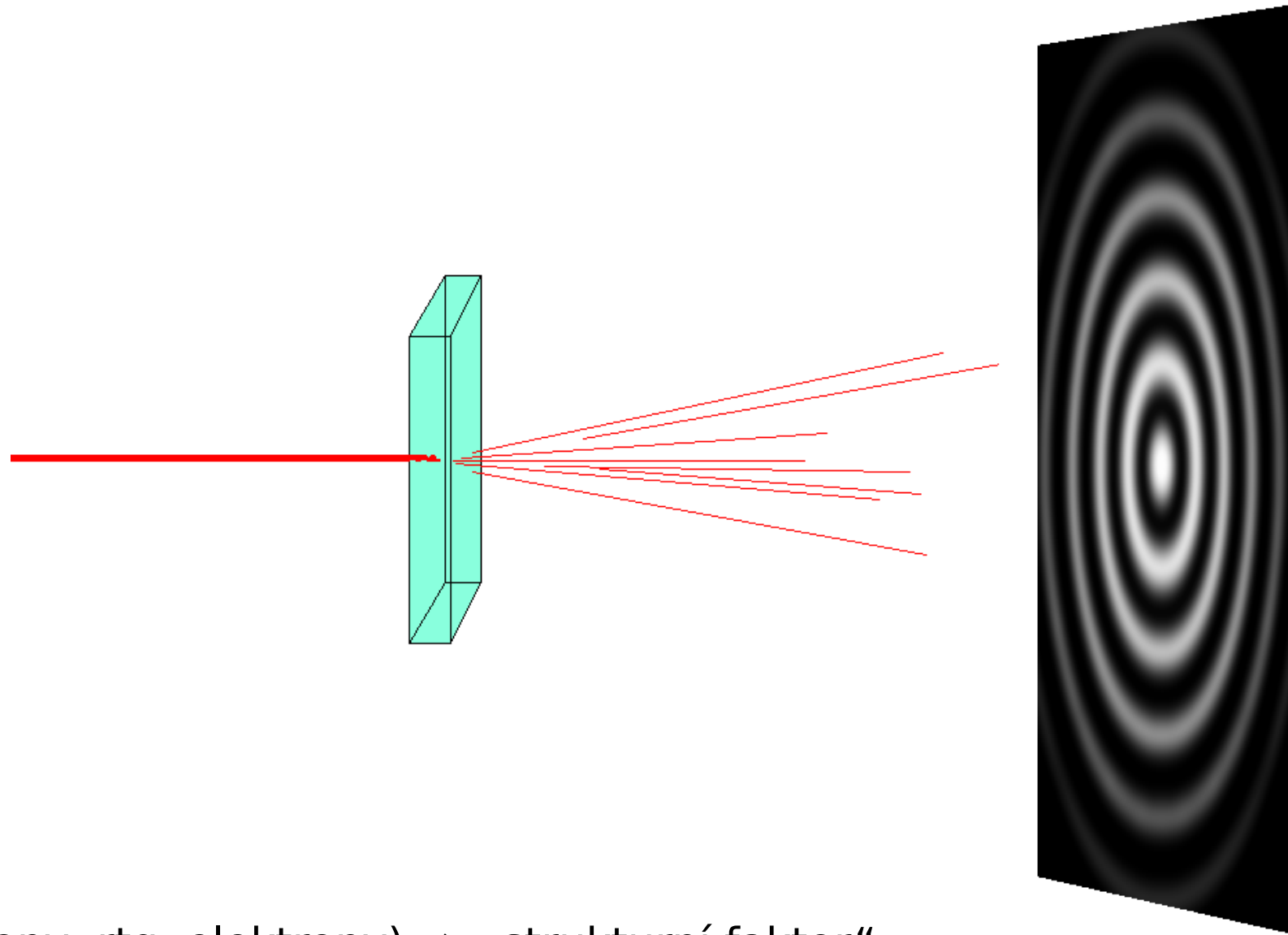
náhodně rozmístěné molekuly
(ideální plyn)



kapalina

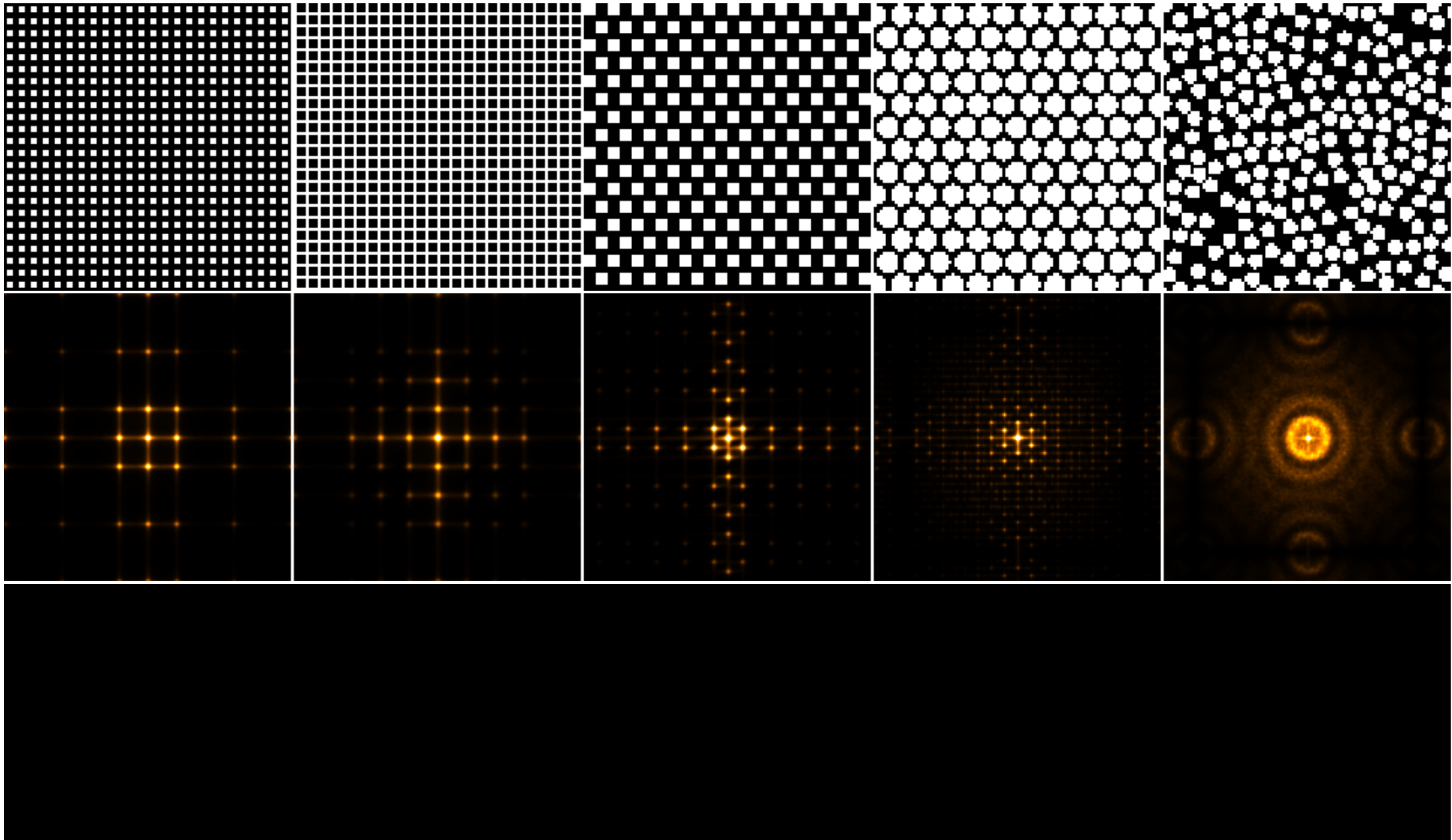
$g(r)$ = párová korelační funkce = radiální distribuční funkce
 = hustota pravděpodobnosti nalezení částice ve vzdálenosti r od jiné částice normovaná tak, že pro náhodně rozmístěné molekuly vyjde 1

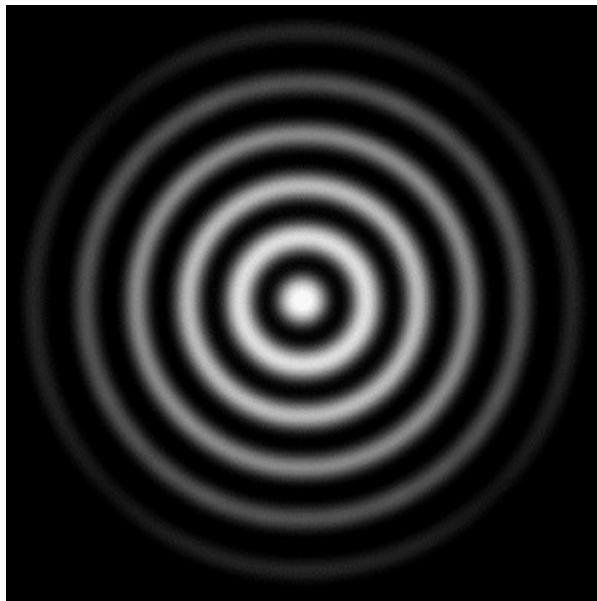




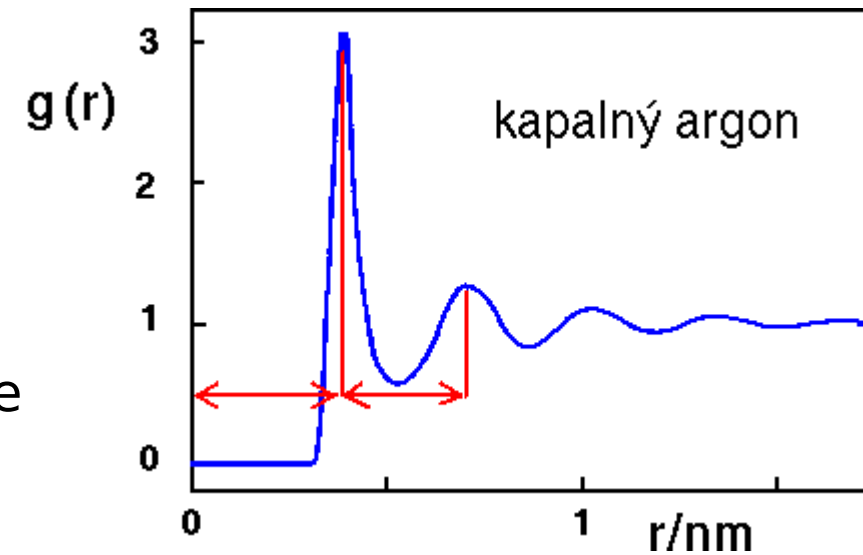
- Difrakce (neutrony, rtg, elektrony) \Rightarrow „strukturní faktor“

Jak získám strukturu?





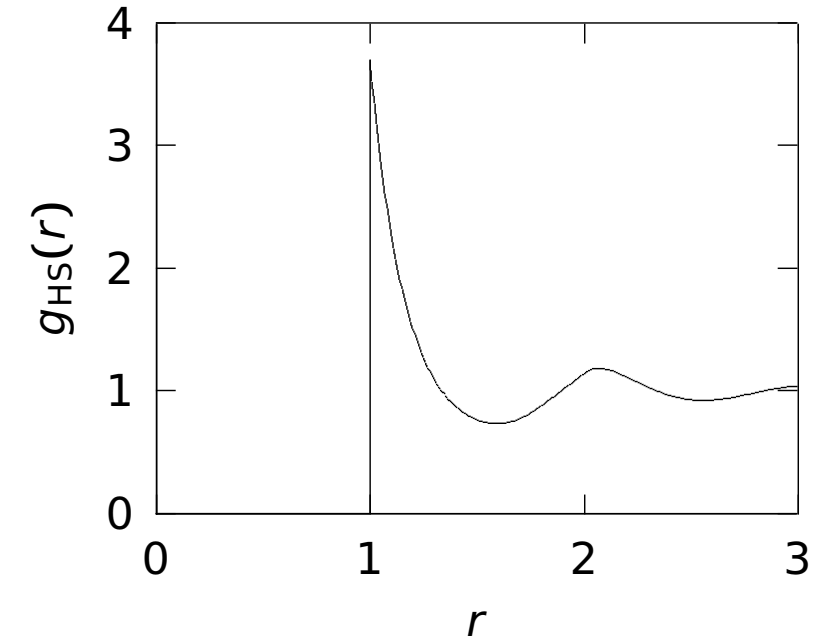
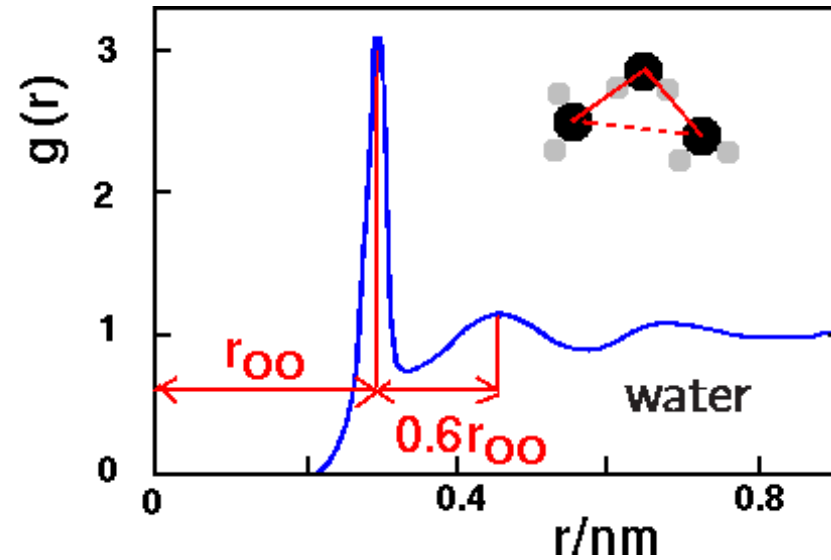
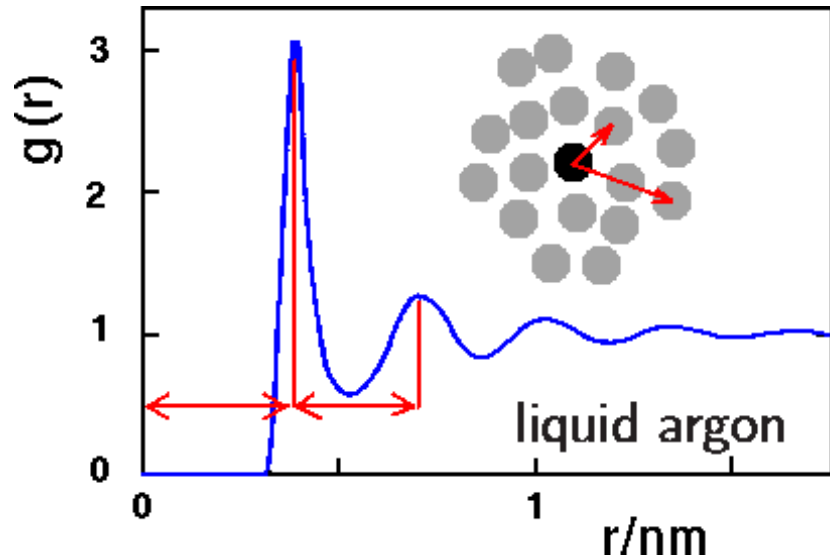
inverzní
Fourierova
transformace



Teorie, kterou teprve uslyšíte: **Fourierova transformace**

V podstatě to dělá vaše ucho, když rozeznává tóny

Argon, tuhé koule, voda



- Struktura jednoduché tekutiny (kapalný argon) je organizovaná po slupkách
- Struktura vody je dána tetraedrickou geometrií vodíkových vazeb
- Ve vzdálenosti několika molekulových průměrů jsou již molekuly nekorelované – pohybují se nezávisle

Vyzkoušejte si sami: N=209 (dobře krystalizuje), measurement block=100 (posuvník doprava)

Menu: Method → Molecular dynamics NPT (Berendsen)

Menu: Boundary conditions → Periodic ... a pomalu snižovat teplotu

těž „pseudoexperiment“

REÁLNÝ EXPERIMENT	POČÍTAČOVÝ EXPERIMENT
Vedení laboratorního deníku	Vedení laboratorního deníku
Zvol metodu (přístroj, protokol)	Zvol metody (MD, MC, ...)
Stavba aparatury (z částí)	Stáhni/kup/napiš počítačový program, slož bloky kódu
Nakup chemikálie, syntetizuj, co není ke koupi	Stáhni silové pole, nafituj parametry, které nejsou dostupné
Příprav experiment	Příprav počáteční konfiguraci ap.
Proved' experiment, pozorně sleduj, co se děje	Spust' program, sleduj časovou závislost veličin vč. kontrolních
Analyzuj a počítej	Stanov střední hodnoty (s odhady chyb)
Uklid' laboratoř	Zapiš zálohy, vymaž nepotřebné soubory

MC a MD se často dají použít na podobné systémy

MD

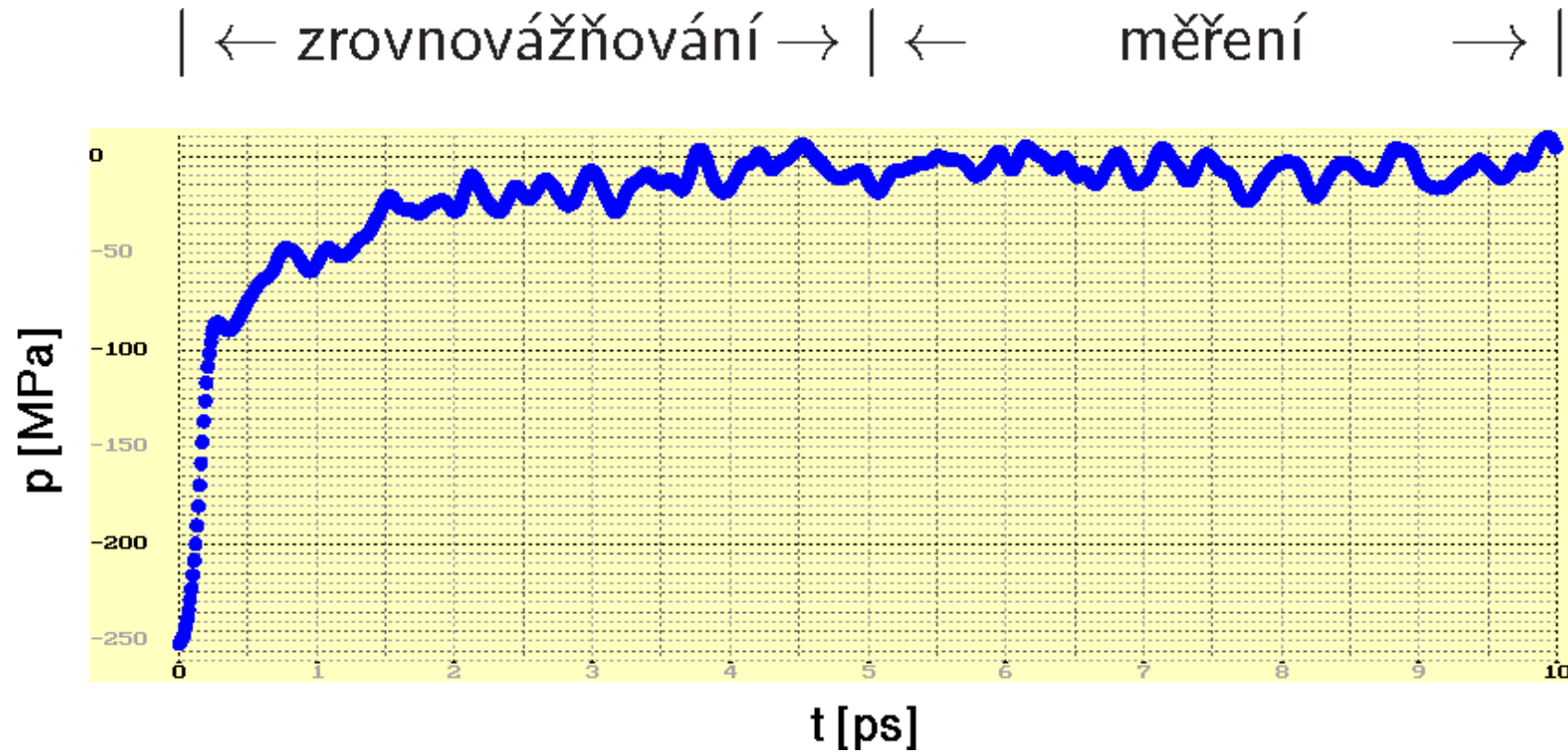
- realistické modely, složité molekuly (vazby, úhly...)
- kondenzovaná fáze obecně (tekutiny, roztoky; biochemie)
- kinetické veličiny (difuzivita, viskozita...)
- snazší paralelizace, existuje mnoho balíků

MC

- jednoduché kvalitativní modely (mřížkové, tuhé koule apod.)
- zředěné systémy
- kritické jevy
- fázové rovnováhy
- překonávání bariér, výměna molekul aj. triky jsou v MC snazší
- horší paralelizace, existuje málo balíků

Realizace pseudoexperimentu

- Start: krystal, náhodná konfigurace, známá konfigurace
- Zrovnovážení
- Měření vč. odhadu chyby: průměrná hodnota veličiny v čase



The End

