

Stanisław Romanowski
Dorota Światła-Wójcik

SYMULACJE KOMPUTEROWE W FIZYCE I CHEMII

WYBRANE ZAGADNIENIA

Autorzy dziękują
dr Andrzejowi Romanowskiemu
z Politechniki Łódzkiej
za współautorstwo rozdziału III.

Dziękujemy również
śp. prof. dr hab. Witoldowi Bartczakowi
z Politechniki Łódzkiej
za udostępnienie wyników badań własnych,
na podstawie których zostały sporządzone
rysunki V.5–V.10 w rozdziale V
oraz rysunki VII.2–VII.6 w rozdziale VII.

Szczególne podziękowania Autorzy kierują
do mgr Filipa Piękniewskiego
z Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu
za udzielenie zgody na wykorzystanie
rysunków z opracowania internetowego
zawartego na stronie www.mat.umk.pl/~philip/,
zamieszczonych w rozdziale VI.

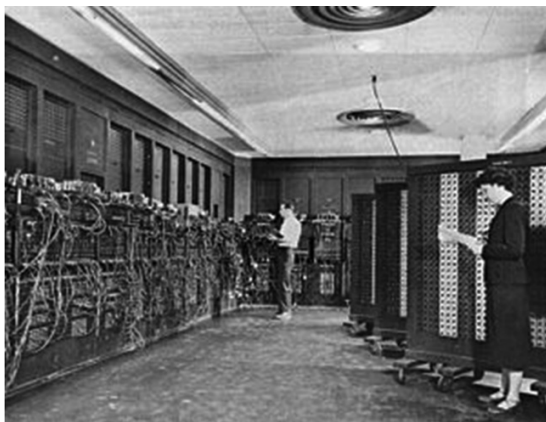
Spis treści

Wstęp	7
ROZDZIAŁ I	
Symulacje deterministyczne i stochastyczne. Narzędzia i obszary symulacji	11
ROZDZIAŁ II	
Generatory liczb losowych. Test χ^2 dla generatorów	23
ROZDZIAŁ III	
Metoda Monte Carlo (MC) i algorytm Metropolis oraz metoda Monte Carlo Łańcuchów Markowa (MCMC). Całkowanie metodą MC. Liczba π obliczana metodą MC jako test generatorów pseudolosowych	43
ROZDZIAŁ IV	
Symulacje własności gazów doskonałych – stała Boltzmanna; eksperyment komputerowy Buffona; symulacja optymalnych warunków w ruchu drogowym i w systemach obsługi klientów	67
ROZDZIAŁ V	
Podstawy Dynamiki Molekularnej (MD) i jej zastosowanie do symulacji własności fizykochemicznych ciała stałego	80
ROZDZIAŁ VI	
Symulacja struktur fraktalnych. Fraktale w matematyce i fizyce. Podstawy teorii chaosu	94
ROZDZIAŁ VII	
Zastosowanie symulacji do modelowania molekularnego	111
ROZDZIAŁ VIII	
Podstawowe metody numeryczne w fizyce i chemii	124
Bibliografia	149
Spis rysunków i tabel	155

Wstęp

Celem nauki jest zrozumienie i opis zjawisk zachodzących w otaczającym nas świecie. Rzeczywistość jest jednak zbyt skomplikowana, aby opisać ją dokładnie. Rozwój komputerów i metod obliczeniowych dał współczesnym naukowcom potężne narzędzie badawcze, jakim jest symulacja komputerowa. **Symulacja komputerowa** jest to program komputerowy opracowany w celu modelowania zachowań rzeczywistego układu. Definicję symulacji można też ująć inaczej. Powiemy, że symulacja komputerowa jest metodą wnioskowania o zachowaniu obiektów rzeczywistych na podstawie interpretacji wyników programów komputerowych „naśladujących” rzeczywistość.

Modelowanie rzeczywistości stało się możliwe dzięki wielkiemu postępowi w dziedzinie komputerów i technik obliczeniowych, jaki dokonał się w przeciągu ostatniego półwiecza. W 1945 r. matematyk węgierski John von Neumann, inspirowany pracami Alana Turinga, opublikował pełne teoretyczne podstawy współczesnego komputera. Pierwszy superkomputer o nazwie ENIAC (skrót od ang. *Electronic Numeric Integrator and Computer*) zajmował powierzchnię 72 m², ważył 30 ton i pobierał 140 kW mocy. Podzespoły ENIAC-a złożone były z 18.800 lamp elektronowych, a system wentylacyjny superkomputera miał wbudowane dwa silniki Chyrlslera o łącznej mocy 24 KM. Komputer był głównie używany do obliczeń związanych z balistyką, wytwarzaniem broni jądrowej, prognozowaniem pogody oraz z projektowaniem tuneli aerodynamicznych.



Rys. 1. Pierwszy superkomputer ENIAC

ENIAC, w odróżnieniu od współczesnych komputerów, liczył w systemie dziesiętnym, wykonując 5000 dodawań na sekundę. Współczesny superkomputer nowej generacji o nazwie Roadrunner dysponuje mocą obliczeniową blisko 10^{15} FLOPS (skrót od ang. ***F**loating point **O**perations **P**er **S**econd*), czyli 10^{15} operacji zmiennoprzecinkowych na sekundę. Łączna liczba rdzeni procesorów w Roadrunnerze wynosi 116.640. Maszyna zajmuje powierzchnię 1100 m^2 i pobiera 3 MW.



Rys. 2. Superkomputer Roadrunner zajmujący pierwsze miejsce na liście rankingowej superkomputerów TOP 500 z roku 2008

Zastosowanie symulacji komputerowych w nauce i technice jest obecnie powszechne. Naszym celem jest zapoznanie czytelnika z podstawami technik symulacyjnych w fizyce i chemii. Przedstawiony w książce materiał obejmuje elementy symulacji stochastycznych i deterministycznych, symulacje fraktalne, elementy modelowania molekularnego, powszechnie stosowanego przy projektowaniu leków, a także charakterystykę podstawowych metod numerycznych fizyki i chemii obliczeniowej. Omawiane metody symulacyjne i obliczeniowe są ilustrowane rozwiązaniami konkretnych problemów fizykochemicznych.

Książka jest głównie przeznaczona dla studentów kursów magisterskich i inżynierskich prowadzonych w AHE na kierunku informatyka. Może być również pomocą dydaktyczną dla studentów, wykładowców i pracowników naukowych wydziałów informatyki, chemii, biologii, fizyki i farmacji. We współczesnych koncernach farmaceutycznych rośnie zapotrzebowanie na programistów do projektowania leków. Jest rzeczą oczywistą, że modelowanie struktury leku staje się dużo łatwiejsze, jeśli programista posiada choćby podstawową wiedzę w tej dziedzinie.

Książka składa się z ośmiu rozdziałów. Wprowadzeniem do omawianych zagadnień jest rozdział I. Przedstawiono w nim ogólną charakterystykę symulacji deterministycznych i stochastycznych, obszarów zastosowań w nauce i technice oraz narzędzi wykorzystywanych w symulacjach komputerowych. Podstawowym narzędziem symulacji stochastycznych są generatory liczb losowych, omówione w rozdziale II. Przedstawiono w nim najważniejsze generatory liczb pseudolosowych wraz z przykładami programów komputerowych oraz statystyczne metody testowania generatorów. Zastosowanie liczb losowych do obliczeń numerycznych i symulacji stochastycznych metodą Monte Carlo omówiono w rozdziałach III i IV. W rozdziale III znajdziemy m.in. całkowanie metodą Monte Carlo, obliczanie liczby π oraz opisy symulacji struktur chemicznych i błędzenia przypadkowego w dwuwymiarowej sieci krystalicznej. Rozdział IV przedstawia zastosowania symulacji Monte Carlo w kinetycznej teorii gazu doskonałego, w eksperymencie Buffona, w sterowaniu ruchem pojazdów na drogach oraz w organizacji kolejek w masowej obsłudze klientów. Symulacjom deterministycznym został poświęcony rozdział V, przedstawiający pod-

stawy symulacji metodą dynamiki molekularnej i jej zastosowanie w fizyce ciała stałego.

Rozdział VI dotyczy zagadnienia symulacji struktur fraktalnych. Struktury o budowie fraktalnej są powszechnie spotykane w przyrodzie, np. płatki śniegu, systemy naczyń krwionośnych, systemy wodne rzek czy błyskawice. W rozdziale tym przedstawiono zastosowanie fraktali w matematyce i fizyce oraz algorytmy tworzenia prostych struktur fraktalnych.

Szczególną odmianą symulacji prowadzącą do optymalizacji ważnych struktur chemicznych jest modelowanie molekularne. Zastosowanie symulacji do modelowania molekularnego, ilustrowane wynikami prac własnych zawiera rozdział VII.

Opracowaniu modeli symulacyjnych powinna towarzyszyć podstawowa wiedza z zakresu budowy maszyny cyfrowej. Pamięć komputera ma skończoną pojemność, a liczba operacji wykonywanych w jednostce czasu jest ograniczona, więc symulowane układy są z konieczności reprezentowane przez dyskretne, skończone modele matematyczne. Ogólne zasady obliczeń numerycznych, reprezentacja liczb w komputerze, dokładność w obliczeniach numerycznych to zagadnienia poruszane w rozdziale VIII. Znajduje się w nim również charakterystyka podstawowych metod numerycznych stosowanych w fizyce i chemii obliczeniowej wraz z przykładami ich implementacji komputerowej. Kody źródłowe przykładowych implementacji zostały napisane w Fortranie. Obok języka C, Fortran jest podstawowym językiem programowania naukowego i inżynierskiego.