

# Počítačové simulace fyzikálních jevů

J. Smolka, M. Rost, V. Hubata-Vacek, E. Dluhoš, J. Chaloupka  
ČVUT Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Břehová 7, 115 19  
Praha 1

maurel@gmail.com, m.rost@seznam.cz, v.hubata@seznam.cz,  
dluhoseduard@seznam.cz, jakub.chaloupka@smail.cz

## Abstrakt:

Práce se zabývá úlohou počítačové simulace ve fyzice, popisuje postup práce, seznamuje nás se softwarovými a hardwarovými prostředky, používanými při tvorbě simulace.

## 1 Úvod

Pojem simulace (z lat. *Simulare*) má dva základní významy: napodobovat, předstírat. Princip počítačové simulace spočívá v popsání, tvorbě a pozorování modelu, sestaveného pro daný jev, aplikované nebo teoretické fyziky. Poč. simulace nachází velice blízké paralely i v jiných oborech (ekonomie, chemie).

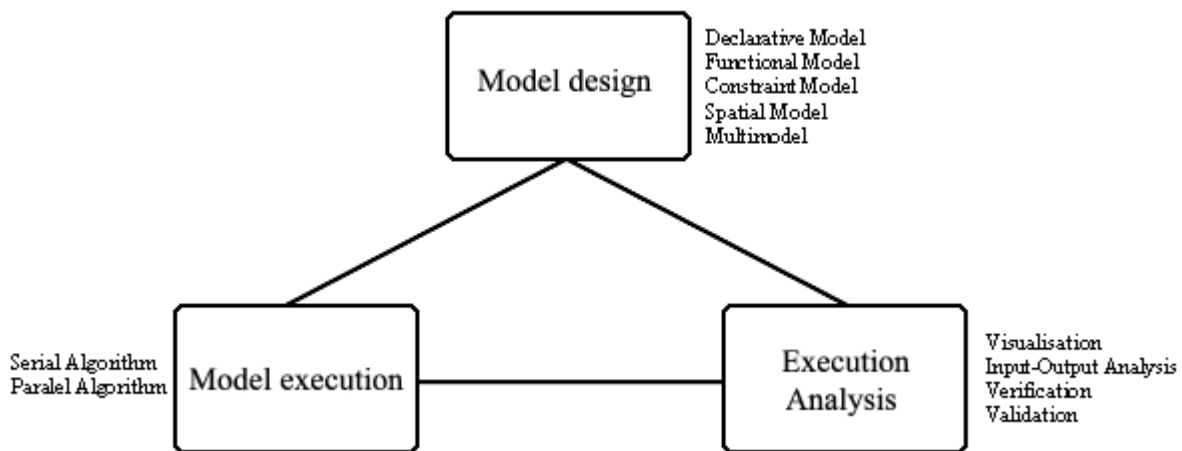
Využití simulace spočívá v metodě “learning by doing” (učení se děláním), které používají malé děti k poznávání svého okolí.

## 2 Tvorba simulace

Proces tvorby počítačové simulace můžeme rozčlenit do 3 základních částí, návrh matematického modelu, provedení simulace, analýza získaných dat.

- **Návrh matematického modelu**
  - Na základě vstupních údajů sestavíme matematický model, vhodný pro daný fyzikální jev
  - Vstupními údaji mohou být: vztahy (fyzikální zákony), údaje (proměnné vystupující ve vztazích), omezení (omezení platící pro daný systém)
  - Každý model je založen na redukci skutečnosti
- **Provedení simulace**
  - Formalizace matematického modelu (popis pomocí algoritmů)
  - Použití (popř. tvorba) vhodného programu pro realizaci simulace
- **Analýza získaných dat**
  - Vizualizace problému pro usnadnění interpretace experimentálních dat a pro ladění komplikovanějšího simulačního software
  - Pozorování problému (sledujeme změnu hodnot určitých proměnných v čase)

- Pokud je zaznamenána nezanedbatelná neshoda mezi modelem a skutečností, je nutno zdokonalit použitý model



Obrázek1: Tvorba simulace

### 3 Softwarové prostředky

Před realizací simulace se musíme rozhodnout, co bude tvořit skrytou vrstvu, která bude realizovat samotné výpočty a vizualizovat výsledek. Jednou z možností je zvolit si libovolný programovací jazyk a celý simulační program v něm napsat od začátku až do konce. Ta druhá představuje použití některého z počítačových algebraických systémů či jiné specializované aplikace.

Pokud člověk zvolí možnost naprogramovat celou simulaci od základu, měl by zvážit časovou i technickou náročnost takového úkolu. Výhodou je naprostá volnost v provedení a možnost optimalizace přímo na konkrétní úkol. Vážným úskalím této cesty je omezená přesnost a velikost běžných datových typů programovacích jazyků.

Při volbě programovacího jazyka nastává vždy dilema, zda zvolit pohodlnější cestu a použít jeden z několika interpretovaných jazyků (Java, Python, ActionScript, ...) nebo si vybrat cestu většího výkonu, přísnějších pravidel a mnoha bezesných nocí a zvolit kompilované jazyky. Interpretované jazyky zaostávají za kompilovanými především v efektivitě vytvořených programů, ale na druhé straně nabízejí programátorovi již připravené knihovny / objekty (Java applets, Flash objects), pomocí kterých může jednoduše danou simulaci vizualizovat a kontrolovat. Příkladem může být síť internet, která nabízí velké množství fyzikálních Java appletů. Naopak jazyky překládané do binárního kódu jsou nasazovány tam, kde je požadován velký výkon, malá náročnost, či složitá vizualizace. Nevýhodou použití těchto jazyků jsou větší nároky na zkušenosti a čas programátora.

Výhodou použití specializovaných programů (Maple, Mathematica, Famulusu, ...) je jejich podpora pro práci s velkými čísly, velká přesnost, spousta předpřipravených knihoven a funkcí. Ani zde se však člověk nevyhne nutnosti alespoň základní schopnosti programovat. Většina z těchto programů má vlastní skriptovací jazyk, který umožňuje pohodlné zadání řešených problémů.

## 4 Hardwarové prostředky

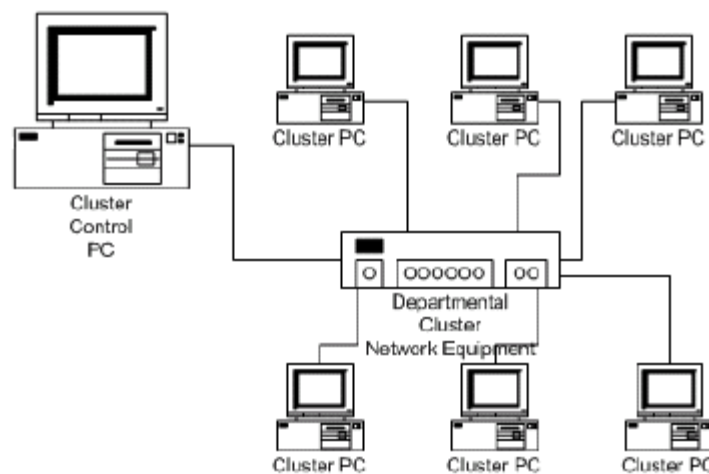
K výpočtu časově náročných operací se používají tzv. Klastry. Klastr je skupina vzájemně propojených počítačů, schopna rozdělit vykonávanou instrukci mezi jednotlivé počítače a provádět jednotlivé části výpočtu paralelně. Následkem je výrazné omezení času potřebného k vykonání instrukce.

- **Profesionální klastr**

- špičkový výkon na úrovni superpočítačů (jedno zařízení obsahující více procesorů, 16, 32..)
- rychlý vývoj, 1990 (několik miliard operací za sekundu)...1996 (Sandia Laboratory bilion informací za sekundu) ..např: *Ab initio* studie molekulárně-dynamických systémů nebyly před deseti lety proveditelné pro více než 100 atomů, ale nyní je možno simulovat i systémy s desítkami tisíců atomů, takže lze přesně modelovat reálné struktury
- v ČR profesionální klastr například v AV ČR (16 procesorů)
- cenová nedostupnost => sdílení klastrů v síti internet, dálkové zpracování výpočtů

- **Klastr pracovních stanic**

- klastr sestaven z osobních počítačů
- je škálovatelný, můžeme připojovat další stanice, čímž jeho výkon lineárně roste
- budoucnost v propojování osobních počítačů na vědeckých pracovištích a sdílení nevyužitého výpočetního výkonu



Obrázek2: Klastr pracovních stanic

Efektivnost klastru závisí na větším počtu proměnných ukazatelů, s větším počtem stanic například efektivnost celého systému klesá (potřeba řešit problém optimálního rozdělení instrukce na velký počet pod-instrukcí, což není možné vždy provést). Velký vliv na fektivitu klastru má použitý software, který musí být většinou psán přímo se specifickým zřetelem na konkrétní architekturu a konfiguraci klastru.

## 5 Shrnutí

Počítačová simulace fyzikálních jevů mají dnes široké uplatnění, jsou využívány k tvorbě názorných, vzdělávacích programů (applety...) i k vědeckým účelům (simulace toku podzemní vody...).

## Reference:

- [1] HWANG F. *Virtual Physics Laboratory* <http://www.phy.ntnu.edu.tw/ntnujava/>
- [2] FISHWICK P. *Computer Simulation: The Art and Science of Digital World Construction* <http://www.cis.ufl.edu/~fishwick/introsim/paper.html>
- [3] BERTA L. *Počítačová simulace* <http://www.infolab.cz/rgb/clanky/simulace.htm>
- [4] NADRCHAL J. *Počítačová fyzika* <http://www.fzu.cz/oddeleni/savt/texty/CCP2000.php3>