

# Úvod do algoritmů pro molekulové simulace

Martin Kramář

Fakulta elektrotechniky a informatiky, VŠB – TU Ostrava

Algoritmy pro modelování molekulárních systémů mohou najít uplatnění v řadě aplikací. Ať už jde o úlohy v medicíně, kde můžeme například modelovat kontakt léčiv s okolím a jeho reakce, nebo aplikace v průmyslu, kde můžeme například modelovat stavbu slitin a zkoumat její vlastnosti nebo se zabývat šířením trhlin v různých materiálech. V prezentaci ukážeme jednoduchý algoritmus částicové modelu, simulaci kolize dvou těles a jednoduché analytické modely kvantové statiky.