

# Lekce 13

# Počítačový experiment

## a jeho místo ve fyzice a chemii

### Osnova

1. Počítačový experiment
2. Srovnání s reálným experimentem
3. Výhody počítačového experimentu
4. Nevýhody počítačového experimentu
5. Místo počítačového experimentu  
v přírodních vědách

# Počítačový experiment

## Vymezení pojmu

Získávání kvantitativních dat o modelových systémech pomocí výpočetních prostředků.

Dnes univerzální prostředek ve všech přírodních (ale i společenských a ekonomických) vědách, metody MD a MC tvoří jen malou část „říše“ počítačových experimentů.

## Původ názvu

experiment - „měříme“, ale nevysvětlujeme

počítačový - „proměřované“ procesy probíhají v paměti, procesoru a na disku počítače

## Synonyma

- numerický experiment
- numerický pseudoexperiment
- počítačová simulace
- experiment „in silico“ (jako kontrast k „in vivo“ a „in vitro“)

# Srovnání s reálným experimentem

experiment	počítačový experiment
reálný objekt	matematický model
měřicí aparatura	počítač
experimentální metodika	počítačový program
experimentální podmínky	nastavitelné parametry modelu, počáteční stav
výstupy ve formě řady čísel vyžadujících další interpretaci	taktéž

# Výhody počítačového experimentu

- téměř dokonalá kontrola „experimentálních“ podmínek,
- možno „zapínat“ a „vypínat“ různé vlivy, a tak systematicky studovat jejich význam,
- možno „měřit“ i to, co v reálném experimentu měřit nelze (téměř neomezená volnost ve volbě měřených veličin),
- možno studovat i modely, které nemají v realitě protějšek (např. modely velmi zjednodušené),
- v porovnání s reálným experimentem relativně levné „měřicí přístroje“,
- téměř univerzální HW základna, jednotlivé počítačové experimenty vyžadují jen odlišný SW.

# Nevýhody počítačového experimentu

- jen modelové systémy,
- omezení dostupným výpočetním výkonem (malé počty částic, krátké časy),
- u realistických modelů obrovské výpočetní nároky, zvládnutelné modely často silně zjednodušené,
- numerické chyby (chyby přibližných numerických metod, zaokrouhlovací chyby).

# Místo počítačového experimentu v přírodních vědách

- testování teorií na zjednodušených (a tedy např. analyticky řešitelných) modelech, které nemají reálné protějšky,
- testování realistických matematických modelů (srovnání numerických dat s daty experimentálními),
- získávání dat, která nelze změřit v reálném experimentu,
- testování významu zanedbávaných efektů,
- často (výrazně) levnější alternativa k reálnému experimentu.