شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای

(دینامیک مولکولی و مونت کارلو)

www.ketab.ir

ویرایش دوم

دکتر سیف‌اله جلیلی

شماره ۲۷۳

سرشناسه: جلیلی، سیف‌الله، ۱۳۵۰ -
عنوان و نام پدیدآور: شبیه سازی‌های رایانه‌ای (دینامیک مولکولی و مونت کارلو)/ سیف‌اله جلیلی.
وضعیت ویراست: ویراست ۲.
مشخصات نشر: تهران: تهران: دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، انتشارات، ۱۳۸۹
مشخصات هجده، ۵۲۸ ص.:مصور، جدول، نمودار.
شابک: 978-964-8703-87-0
وضعیت فهرست نویسی: فیپا
موضوع: دینامیک مولکولی -- شبیه‌سازی کامپیوتری
موضوع: شیمی فیزیک -- شبیه‌سازی کامپیوتری
موضوع: روش‌مونت‌کارلو -- داده‌پردازی
رده بندی کنگره: ۱۳۸۹ ۲ش۸ج/QD۴۵۵/۱۶۸۷
رده بندی دیویی: ۵۳۲/۰۵
شماره کتابشناسی ملی: ۹۳۴۶۱۲۲

ناشر: دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی www.press.kntu.ac.ir

عنوان: شبیه سازی‌های رایانه‌ای (دینامیک مولکولی و مونت کارلو)
مؤلف: دکتر سیف‌اله جلیلی
ویرایش: دوم
نوبت چاپ : دوم
تاریخ انتشار: اسفند ۱۳۹۹، تهران
شمارگان: ۱۰۰۰ نسخه
قیمت: ۹۱۰۰۰ تومان
چاپ: پدیدرنگ
صحافی: گرنامی

(تمام حقوق برای ناشر محفوظ است)

خیابان میرداماد غربی- پلاک ۴۷۰- انتشارات دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی - تلفن: ۸۸۸۸۱۰۵۲
میدان ونک - خیابان ولی‌عصر(عج) - بالاتر از چهارراه میرداماد - پلاک ۲۶۲۶- مرکز پخش و فروش انتشارات
تلفن: ۸۸۷۷۲۲۷۷ رایانامه: press@kntu.ac.ir - تارنما (فروش آنلاین): www.press.kntu.ac.ir

www.ketab.ir

مقدمه ویرایش دوم

بعد از انتشار موفقیت‌آمیز ویرایش اول کتاب شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای به لطف خداوند ویرایش دوم این کتاب با تغییرات گسترده آماده و در اختیار علاقمندان قرار می‌گیرد. در ویرایش دوم ترتیب برخی فصلها و بخشها تغییر کرده است. فصل اول به مکانیک آماری و فصل دوم به میدانهای نیرو اختصاص یافته است. همچنین، مبحث سطح انرژی پتانسیل به فصل سوم منتقل شده و مطالب آن به‌طور کامل تغییر کرده است. در انتهای کتاب نیز شش ضمیمه در موضوعات مختلف برای کامل شدن مباحث کتاب اضافه شده است. علاوه بر آن، تلاش شده است تا با افزودن مراجع در متن کتاب، راهنمای مفیدی برای علاقمندان به مباحث تکمیلی فراهم شود.

مطالب جدید در ویرایش دوم:

- تابع توزیع فضایی (بخش ۶.۱ ح)
- روش RESP برای محاسبه بارهای اتمی (بخش ۵.۲ ت)
- قطبش در میدانهای نیرو و روشهای بررسی آن (بخش ۵.۲ ث)
- اثرات چندجسمی در انرژی پتانسیل (بخش ۷.۲)
- مدلهای درشت‌دانه (بخش ۱۰.۲)
- روش کمترین مربعات برای پارامتری کردن میدانهای نیرو (بخش ۱۳.۲)
- محدودیتهای مکانیک مولکولی (بخش ۱۴.۲)
- تصحیحات برد بلند برای قطع پتانسیل (بخش ۳.۴ پ)
- پتانسیل نیرو- منتقل‌شده (بخش ۳.۴ ح)
- روش چندقطبی سریع (بخش ۴.۴ پ)
- دینامیک لاگرانژی (بخش ۱.۵ ب)
- پایستگی اندازه‌حرکت (بخش ۱.۵ ت)
- روش گام زمانی چندگانه (بخش ۲.۵ ث)
- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مولکولهای صلب (بخش ۴.۵)
- الگوریتم‌های دینامیک مقید RATTLE، SETTLE و LINCS (بخش ۵.۵ پ)
- ترموستات‌های ایوانز و لانژوین (بخش ۶.۵ الف)
- روش پارینلو-رحمان برای ثابت نگه داشتن فشار (بخش ۶.۵ ب)
- محاسبه پتانسیل شیمیایی (بخش ۸.۶)
- شبیه‌سازی مونت کارلو پلیمرها (بخش ۹.۶ ب)

www.ketab.ir

برخی از بخشها که در ویرایش جدید تغییرات کلی داشته‌اند:

- تابع توزیع شعاعی (۶.۱ چ)
- جملات ترکیبی در میدانهای نیرو (۴.۲ ث)
- میدانهای نیرو برای شبیه‌سازی آب مایع (۱۰.۲)
- روش جمع اوالد (۴.۴ الف)
- انتگرالگیری از معادلات حرکت نیوتن (۲.۵)
- دینامیک مقید (۵.۵)
- دینامیک مولکولی در دما و فشار ثابت (۶.۵)
- خواص وابسته به زمان (۷.۵)
- شبیه‌سازی مونت کارلو برای سیستم‌های مولکولی (۹.۶)
- نمونه‌برداری ترجیحی (۱۰.۶)
- مقایسه شبیه‌سازی‌های مونت کارلو و دینامیک مولکولی (۱۱.۶)

در آدرس اینترنتی www.chem.kntu.ac.ir/~sjalili اطلاعات مفیدی وجود دارد که خواننده می‌تواند با مراجعه به آن از این اطلاعات استفاده کند.

در پایان از خانم دکتر مژده اخوان برای همکاری در بازخوانی و انجام امور رایانه‌ای کتاب صمیمانه تشکر می‌شود.

دکتر سیف‌اله جلیلی

استاد شیمی‌فیزیک

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

تهران، زمستان ۱۳۸۹

www.ketab.ir