

مفاهیم‌های بر روش‌های محاسباتی در فیزیک، شیمی و زیست‌شناسی

مترجم:

دکتر رضا رجائی - راسانی

کلیه حقوق مادی و معنوی این کتاب برای انتشارات پژوهشی نوآوران شریف محفوظ است و هیچ شخص حقیقی یا حقوقی حق چاپ و نشر تمام یا بخشی از این اثر را بدون موافقت کتبی ناشر به هر صورت اعم از فتوکپی، پلی‌کپی، جزوه و ... ندارد و متخلفین به موجب بند ۵ ماده ۲ قانون حمایت از ناشرین مصوب مجلس محترم شورای اسلامی تحت پیگرد قانونی قرار می‌گیرند.

(نشر پژوهشی نوآوران شریف)

سرشناسه: هریسون، پل، ۱۹۶۷ - م.

P. (Paul)(Harrison

عنوان و نام پدیدآوردگان: مقدمه‌ای بر روش‌های محاسباتی در فیزیک، شیمی و زیست‌شناسی / پل هریسون؛

مترجم: رضا رجائی خراسانی.

مشخصات نشر: تهران: پژوهشی نوآوران شریف، ۱۳۹۶.

مشخصات ظاهری: ۲۳۴ص.: مصور، جدول.

شابک: 978-600-5953-83-1

وضعیت فهرست نویسی: فیپا

یادداشت عنوان اصلی: Computational methods in physics, chemistry, and biology : an

Introduction.

موضوع: آنالیز عددی --- فیزیک ریاضی

موضوع: Mathematical physics --- Numerical analysis

شناسه افزوده: رجائی خراسانی، رضا، ۱۳۵۰ - مترجم

رده‌بندی کنگره: ۵۱۹/۴ - QC۲۰۷

رده‌بندی دیویی: ۵۱۹/۴

شماره کتابشناسی ملی: ۴۷۹۹۱۱۹

تهران - انقلاب - خیابان امام‌الراسته خراسانی - پلاک ۲۱ - بن بست مهربان - خیابان چنگیزی - خیابان زرین قدم -



نشر پژوهشی
نوآوران شریف

تلفن: ۰۲۱۶۶۹۱۶۷۹۶ - ۰۲۱۶۶۹۱۶۷۳۴ - ۰۹۱۲۳۰۱۷۶۱ - ۰۹۱۰۹۱۹۲۵۷۳

عنوان کتاب: مقدمه‌ای بر روش‌های محاسباتی در فیزیک، شیمی و زیست‌شناسی

مترجمین: دکتر رضا رجائی خراسانی

ناشر: پژوهشی نوآوران شریف

نوبت چاپ: اول ۱۳۹۶

تیراژ: ۵۰۰ نسخه

صفحه‌آرایی: سحر ابراهیمی

قیمت: ۲۸۰۰۰۰ ریال

Email: khf_sharif94@yahoo.com

۹	مقدمه مترجم
۱۰	پیش گفتار
۱۱	مقدمه

فصل ۱ حل عددی معادله شرودینگر

۱۳	۱-۱ ذرات و مکانیک کلاسیکی
۱۹	۲-۱ امواج و مکانیک کوانتومی
۲۴	۳-۱ حل تحلیلی معادله شرودینگر
۲۹	۴-۱ روش برتاب
۳۳	۵-۱ شرایط رلیه
۳۵	۶-۱ پیاده سازی رایانه ای
۳۷	۷-۱ کاربرد در پتانسیل های سه بعدی
۴۱	۸-۱ مقادیر ویژه انرژی بهبود یافته
۴۵	۹-۱ آزمون های همگرایی: افزایش دقت با تعداد مکان
۴۷	۱۰-۱ محاسبه توابع موج
۵۰	۱۱-۱ پتانسیل های سه بعدی
۵۲	۱۲-۱ کاربرد در اتم هیدروژن

فصل ۲ روشهای تقریبی

۶۳	۱-۲ تغییرات اندک
۶۴	۲-۲ نظریه اختلال ناهمتراز
۶۶	۳-۲ محاسبه تصحیح مرتبه اول
۷۱	۴-۲ محاسبه تصحیح مرتبه دوم
۷۵	۵-۲ پتانسیل های اختلال دو بعدی
۷۸	۶-۲ روش تغییر پارامتر
۸۰	۷-۲ کاربرد در اتم هیدروژن
۸۵	۸-۲ کاربرد در چاه کوانتومی نامتقارن

فصل ۳ روشهای ماتریسی

- ۱-۳- توابع پایه ۹۱
- ۲-۳- بسط بر حسب توابع پایه ۹۴
- ۳-۳- تشکیل معادله ماتریسی ۹۶
- ۴-۳- حل معادله ماتریسی ۹۷
- ۵-۳- پیاده سازی رایانه‌ای برای چاه کوانتومی ۹۹
- ۶-۳- آزمون‌های همگرایی: کاربرد در پتانسیل‌های سهمی گون ۱۰۳
- ۷-۳- حل معادله شرودینگر در چند بعد ۱۰۵
- ۸-۳- نظر، اختلال همتراز ۱۰۷

فصل ۴ شبیه‌سازی قطعی

- ۱-۴- سیستم‌های پیچیده به زمان ۱۱۱
- ۲-۴- مکانیک کلاسیک حرکت موشک ۱۱۲
- ۳-۴- شبیه‌سازی مسیر حرکت موشک ۱۱۷
- ۴-۴- تائید پارامترهای معادلات ۱۱۹
- ۵-۴- بازی با شبیه‌سازی ۱۲۱
- ۶-۴- مقدمه‌ای بر پخش ۱۲۲
- ۷-۴- فرمول بندی نظری ۱۲۵
- ۸-۴- شرایط مرزی ۱۲۶
- ۹-۴- پیاده سازی عددی ۱۲۷
- ۱۰-۴- آزمون‌های همگرایی ۱۲۹
- ۱۱-۴- ضریب پخش ثابت و عمومی بودن جواب ۱۳۰
- ۱۲-۴- پخش غیر خطی ۱۳۱

فصل ۵ شبیه‌سازی تصادفی

- ۱-۵- شبیه‌سازی تصادفی یا مونت کارلو ۱۳۷
- ۲-۵- اعداد تصادفی ۱۳۷
- ۳-۵- اعداد تصادفی چقدر تصادفی اند؟ ۱۳۹
- ۴-۵- شبیه‌سازی پراکندگی الکترون به روش مونت کارلو ۱۴۰
- ۵-۵- آزمون‌ها و محدودیت‌ها ۱۴۳
- ۶-۵- شبیه‌سازی سیستم‌های سه حالتی ۱۴۶
- ۷-۵- احتمال‌های متغیر و اصل پائولی ۱۴۹

فصل ۶ نظریه تراوش

- ۱-۶- سیستم‌های چند جسمی برهمکنش کننده ۱۵۵
- ۲-۶- انتشار بیماری ۱۵۶
- ۳-۶- پیاده سازی رایانه‌ای ۱۵۷
- ۴-۶- بستگی گسترش بیماری به ایمن سازی ۱۶۲
- ۵-۶- حد جمعیت‌های زیاد و چگالی بحرانی ۱۶۴
- ۶-۶- فازهای مغناطیسی آمیخته ۱۶۶

فصل ۷ روشهای تکاملی

- ۱-۷- الگوریتم‌های وراثتی ۱۷۳
- ۲-۷- تابع شایستگی ۱۷۴
- ۳-۷- تولید دوباره (روش مونت کارلو) ۱۷۴
- ۴-۷- تولید مثل انتخابی ۱۸۰
- ۵-۷- پیاده سازی الگوریتم راسی ۱۸۵
- ۶-۷- جهش و جمع بندی ۱۹۱

فصل ۸ دینامیک مولکولی

- ۱-۸- مدل سازی مولکول‌ها و بلورها ۱۹۳
- ۲-۸- برهمکنش‌های بین اتمی و پتانسیل برهمکنش ۱۹۴
- ۳-۸- شبیه‌سازی مجموعه‌ای از اتم‌ها ۱۹۷
- ۴-۸- پیاده سازی رایانه‌ای ۲۰۰
- ۵-۸- شبیه‌سازی‌های اولیه و آزمون‌های همگرایی ۲۰۳
- ۶-۸- مجموعه‌های بزرگ‌تر و باز تولید طبیعت ۲۰۵
- ۷-۸- پتانسیل‌های برهمکنش غیر کروی ۲۰۷
- ۸-۸- مولکول‌های آبی ۲۰۸
- پیوست ۱: پیاده سازی روش پرنابی به زبان فورترن ۲۱۳
- پیوست ۲: ∇^2 در مختصات کروی ۲۱۵
- پیوست ۳: خلاصه‌ای از زبان C ۲۱۷
- مراجع ۲۳۴

مقدمه مترجم

هُوَ الْفَتَّاحُ الْعَلِيمُ

امروزه اهمیت محاسبات عددی در فیزیک و شیمی نظری بر کسی پوشیده نیست. بخش اعظمی از تحقیقات در فیزیک و شیمی - فیزیک (از فیزیک حالت جامد گرفته تا دینامیک مولکولی کوانتومی) شامل بکارگیری روشهای عددی و یا حتی پیش بردن روشهای محاسباتی می باشد. از آن رو وجود کتابی ساده و مختص مسائل فیزیک و شیمی می تواند برای دانشجویان و علاقمندان ورود به عرصه روشهای محاسباتی بسیار سودمند باشد.

کتاب حاضر مقدمه ای است بر روشهای محاسبات عددی با کاربرد در مسائل فیزیک و شیمی (بخشی از آن بر ریشه های ریاضیاتی هم می تواند کاربرد داشته باشد). نویسنده، آقای پال هریسون با حداقل پیچیدگی نظری و توضیحاتی به شرح روشهای عددی و حل مسائلی از فیزیک می پردازد. از جمله معادله شرودینگر بدیده بخش، دینامیک مولکولی و... مورد مطالعه قرار می گیرد. این کتاب در عین سادگی به روشهایی می پردازد که در کتابهای متعارف و مقدماتی محاسبات عددی از قلم دور مانده اند، همچنین روشهای مونت کارلو و الگوریتم های وراثتی. امروزه این روشها در فیزیک و شیمی کاربردهای فراوانی دارند.

این کتاب برای دانشجویان کارشناسی فیزیک و دانشجو کارشناسی و بالاتر شیمی، بویژه علاقمندان به شیمی نظری، که آشنایی قبلی با محاسبات عددی ندارند بسیار مناسب است. استاد هریسون برای روشهای عددی ارائه شده الگوریتم هایی ساده و برنامه هایی به زبان C نیز نوشته اند که نه تنها دانشجو را با برنامه نویسی آشنا می کند بلکه در تغییر روشهای عددی و نحوه پیاده سازی رایانه ای آنها بسیار مفید می باشد. برای آن دسته از دانشجویان که آشنایی قبلی با C ندارند پیوستی شامل مقدمه ای بر زبان C افزوده شده است (توسط مترجم) که مواردی از زبان C که در برنامه های این کتاب کاربرد دارد و یا می تواند در حل تمرینها مفید باشد، را به اجمال شرح می دهد.

رضا رجائی خراسانی

پیش گفتار

از روزهای نخست اندیشه فلسفی، همواره دو راه برای پیش برد علم وجود داشته است. راه اول رفتن به جهان خارج و انجام مشاهدات و اندازه گیری می باشد، به عنوان مثال انداختن گوی آهنین از بالای برج پیزا یا مطالعه حرکت تصادفی اجسام. راه دوم تفکر روی نتایج راه اول است، مثلاً در ظاهر وزن را رایش پیدا می کند وقتی توسط اسانسور بالا می رویم. تا اواسط قرن بیستم تمامی پیشرفت های علم به این شیوه انجام می شدند و نتایج واقعاً شگفت انگیز بوده است.

در اواسط قرن بیستم ماشینهای محاسباتی اختراع شدند که می توانستند تعداد بسیار زیادی عملیات محاسباتی را در مدت بسیار کوتاه انجام دهند. با اشتهای سیری ناپذیر آدمی برای بررسی جهان پیرامون خود و کسب دانش، افراد به دنبال راه های استفاده از این رایانه های جدید در مسیر کسب علم حرکت کردند. و لذا راه سوم برای پیش بردن علم پدیدار شد- محاسبات.

هدف کتاب حاضر معرفی این دارایی را می باشد به جوانان صاحب فکر، و شاید الهام بخشیدن به آنها در بکار گیری آن و پیش بردن مرزهای دانش در قرن بیست و یکم می باشد.

پال هریسون

دانشگاه لیدز

آوریل ۲۰۰۱

اگرچه موضوع اصلی این کتاب روشهای محاسباتی است، اما در تلاشی برای جامع بودن، در ابتداء کتاب به مرور مفاهیم اساسی مکانیک کلاسیک و نظیر مکانیک کوانتومی آنها، به زبانی ساده پرداخته شده است. هدف از این رویکرد مروری برای دانشجوی و آماده سازی وی است، بطوریکه قبل از ارائه روشهای عددی بتوان اساس فیزیکی آنها را دانسته فرض کرد. این کتاب برای درس یک ترمی فیزیک محاسباتی در دوره کارشناسی نوشته شده است، هر چند امیدواریم برای دانشجویان شیمی که مایلند در خصوص دینامیک مولکولی بیشتر بدانند نیز جالب توجه باشد یا برای دانشجویان ریاضی و یا زیست شناسی که دینامیک جمعیتی مطالعه می کنند. همچنین کتاب حاوی توافقی تواند برای دانشجویان کارشناسی ارشدی که قصد ورود به علوم محاسباتی را دارند، مرور خوبی باشد.