

* تعریف شبیه سازی: عددی کردن مدل های تئوریک یا نظری را شبیه سازی می گویند.

علت و معلول (تعیینی) ← Deterministic

حل معادلات حساب دیفرانسیل

تصادفی ← Stochastic

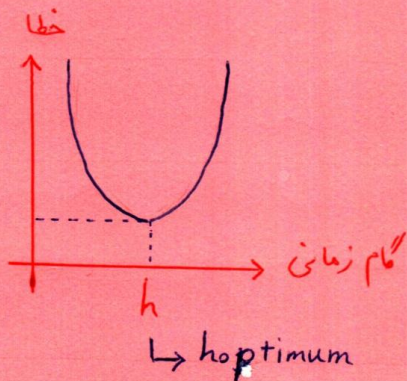
نکته ای که در مورد شبیه سازی های تصادفی باید مد

نظر باشد این است که اساس کاری این شبیه سازی ها یک سری اعداد و در سری ها شبیه تصادفی اند که با ضریب اطمینان بالای تصادفی فرض می شوند.

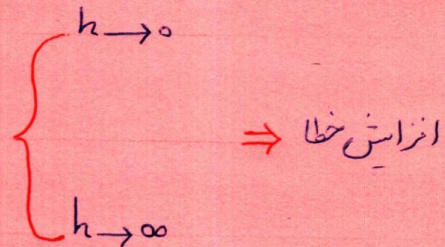
* ویژگی های شبیه سازی های دینامیک مونکولی:

(۱) جواب دقیق (کامل) ندارند: یعنی در هر صورت خطا (تکراس) دارند.

(۲) برای شبیه سازی باید زمان را گسسته کنیم ← تولید گام زمانی و انجام محاسبات در هر گام از این گام های زمانی.



* نمودار نسبت خطا و گام زمانی:



* قدم های اجرایی یک شبیه سازی دینامیک مولکولی:

(۱) نیروهای مولکولی را مشخص می کنیم. (نیروی وزن هم نیست)

(۲) تعیین شرایط اولیه سیستم

(۳) حل عددی معادلات نیوتن $\left. \begin{matrix} v^{(+)} \\ x^{(+)} \end{matrix} \right\} \Leftarrow$ و همه توابع وابسته به آن

* دلانه درشت سازی: ساده سازی مدل شبیه سازی شده و حذف جزئیات آن را دلانه درشت سازی گویند.

* مزایای دلانه درشت سازی:

(۱) حذف جزئیات و بار محاسباتی که در نتیجه شبیه سازی بی اثر اند و موجب اتلاف وقت می شوند.

(۲) به دلیل ضعف سیستم های رایانه در پردازش، دلانه درشت سازی موجب سرعت در انجام شبیه سازی یا اجرا شبیه سازی در گام های زمانی بیشتر در مدت کوتاه تری می شود.

← نکته ای که در دلانه درشت سازی مهم است، مرتبه ی دلانه درشت سازی به طوری که اصل مدل عوض نشود. در حقیقت دلانه درشت سازی باید با توجه به نوع و جزئیات شبیه سازی شود.

* به عنوان مثال یک مولکول DNA را تصور کنید.

مرتبه دلانه درشت سازی (۱)



مثلا: مناسب برای شبیه سازی است که قرار است اثرگذاری پیش های مولکول را دلانش شیمیایی آن بررسی کند.

مرتب دانه درشت سازی
(۲)



مثلاً: مناسب است برای شبیه سازی پیوندهای
بین رشته های اصلی از دیدگاه توان تحمل فشار.

مرتب دانه درشت سازی
(۳)



مثلاً: مناسب است برای شبیه سازی تحمل
مولکول در برابر فشارهای جانبی.

* مثال های بالا فقط برای فهم مفهوم دانه درشت سازی اند و دقیق نیستند.

* چه چیزهای خوبی های شبیه سازی اند:

(۱) پایداری فاز (کریستال، بی شکل، مایع)

(۲) خواص سطح

(۳) حسندگی نانو اتصالات

(۴) خواص مکانیکی

(۵) خواص الکتریکی و مغناطیسی (غیر قابل انجام با دینامیک مولکولی ← زیرا الکترون در این نوع شبیه سازی

فراموش شده اند.)

* انواع خطاها (چالش ها) در شبیه سازی: ۱) خطاهای رستگاری ۲) خطاهای محاسباتی و آماری

* انواع روش های شبیه سازی (دیدگاه اساسی و تخصصی)

۱) روش های مبتنی بر محاسبات فزیک کوانتوم (DF \ddagger - HF - QMC)

← مشخصه: دقت

← نوع خواص شبیه سازی شده: مغناطیسی و الکتریکی

← حوزه کاری: شیمیدانان محاسباتی - فیزیکدانان محاسباتی

۲) روش های محاسباتی نیمه کلاسیک (مبتنی بر مکانیک مولکولی) (MC - MD)

← مشخصه: سرعت - تعدد اتم درخواه

← نوع خواص شبیه سازی شده: گرمایی و مکانیکی

← حوزه کاری: زیست شناسان محاسباتی - فیزیکدانان محاسباتی