

Оглавление

Предисловие к первому изданию	11
Предисловие ко второму изданию	15
О программном обеспечении	16
ГЛАВА 1. Введение	17
1.1. Исторические предпосылки	17
1.2. Компьютерное моделирование	18
1.3. Молекулярная динамика	20
1.4. Структура книги	26
1.5. Литература для дальнейшего изучения	28
ГЛАВА 2. Основы молекулярной динамики	29
2.1. Введение	29
2.2. Жидкость с мягкими дисками	29
2.3. Методология	37
2.4. Программирование	39
2.5. Результаты	55
2.6. Дополнительные задания	66
ГЛАВА 3. Моделирование простых систем	67
3.1. Введение	67
3.2. Уравнения движения	67
3.3. Потенциальные функции	70
3.4. Расчет взаимодействий	72
3.5. Методы интегрирования	85
3.6. Начальное состояние	93
3.7. Оценка производительности	101
3.8. Чувствительность траекторий	105
3.9. Дополнительные задания	109

ГЛАВА 4. Равновесные свойства простых жидкостей	111
4.1. Введение	111
4.2. Термодинамические измерения	112
4.3. Структура	118
4.4. Исследования упаковки	126
4.5. Кластерный анализ	145
4.6. Дополнительные задания	151
ГЛАВА 5. Динамические свойства простых жидкостей	152
5.1. Введение	152
5.2. Коэффициенты переноса	152
5.3. Измерение коэффициентов переноса	157
5.4. Пространственно-временные корреляционные функции	168
5.5. Измерения	181
5.6. Дополнительные задания	188
ГЛАВА 6. Альтернативные ансамбли	190
6.1. Введение	190
6.2. Методы с обратной связью	191
6.3. Методы с ограничениями	203
6.4. Дополнительные задания	213
ГЛАВА 7. Неравновесная динамика	215
7.1. Введение	215
7.2. Однородные и неоднородные системы	215
7.3. Прямые измерения	216
7.4. Модифицированная динамика	228
7.5. Дополнительные задания	239
ГЛАВА 8. Жесткие молекулы	241
8.1. Введение	241
8.2. Динамика	242
8.3. Конструирование молекул	259
8.4. Измерения	266
8.5. Представление посредством матриц поворота	277
8.6. Дополнительные задания	290
ГЛАВА 9. Гибкие молекулы	291
9.1. Введение	291
9.2. Описание молекулы	291

9.3. Подробности реализации	293
9.4. Свойства	298
9.5. Моделирование формирования структуры	302
9.6. Модели поверхностно-активных веществ	305
9.7. Поведение ПАВ	310
9.8. Дополнительные задания	314
ГЛАВА 10. Молекулы с геометрическими ограничениями	315
10.1. Введение	315
10.2. Геометрические ограничения	315
10.3. Решение задачи ограничений	318
10.4. Внутренние силы	327
10.5. Подробности реализации	336
10.6. Измерения	342
10.7. Дополнительные задания	345
ГЛАВА 11. Внутренние координаты	347
11.1. Введение	347
11.2. Координаты цепи	347
11.3. Кинематические и динамические соотношения	349
11.4. Рекурсивное описание динамики	350
11.5. Решение рекурсивных уравнений	360
11.6. Подробности реализации	369
11.7. Измерения	375
11.8. Дополнительные задания	378
ГЛАВА 12. Взаимодействие многих тел	379
12.1. Введение	379
12.2. Силы в системе трех тел	379
12.3. Подход погруженного атома	386
12.4. Дополнительные задания	397
ГЛАВА 13. Дальнодействующие взаимодействия	399
13.1. Введение	399
13.2. Метод Эвальда	400
13.3. Подход древовидного кода	416
13.4. Быстрый метод мультиполей	422
13.5. Реализация быстрого метода мультиполей	432
13.6. Результаты	445
13.7. Дополнительные задания	448

ГЛАВА 14. Ступенчатые потенциалы	451
14.1. Введение	451
14.2. Вычислительный подход	452
14.3. Управление событиями	465
14.4. Свойства	473
14.5. Обобщения	477
14.6. Дополнительные задания	480
ГЛАВА 15. Зависящие от времени явления	481
15.1. Введение	481
15.2. Открытые системы	481
15.3. Тепловая конвекция	483
15.4. Затрудненный поток	494
15.5. Дополнительные задания	498
ГЛАВА 16. Динамика сыпучих сред	500
16.1. Введение	500
16.2. Модели сыпучих сред	500
16.3. Вибрирующий сыпучий слой	503
16.4. Волновые структуры	508
16.5. Дополнительные задания	509
ГЛАВА 17. Алгоритмы для суперкомпьютеров	511
17.1. Введение	511
17.2. В поисках производительности	512
17.3. Методы параллельных вычислений	513
17.4. Распределенные вычисления	515
17.5. Параллельные вычисления с совместно используемой памятью	535
17.6. Методы векторной обработки данных	540
17.7. Дополнительные задания	549
ГЛАВА 18. Подробнее о программном обеспечении	550
18.1. Введение	550
18.2. Структуры и макроопределения	550
18.3. Присвоение памяти массивам	557
18.4. Служебные функции	558
18.5. Организация входных данных	565
18.6. Файлы моментальной конфигурации	568

18.7. Выполнение широкомасштабных вычислений	571
18.8. Файлы заголовков	575
ГЛАВА 19. Будущее	576
19.1. Роль моделирования	576
19.2. Пределы развития	577
19.3. Визуализация и интерактивность	578
19.4. Заключение	579
Приложение	580
Литература	591
Список функций	606
Предметный указатель	610
Колофон	631