

计算物理

(9922、0022 试用讲义)

丁泽军 编著

中国科技大学
天文与应用物理系

目录	i
前言	v
计算物理的形成历史	vi
计算物理的前沿研究领域	vii
计算技术的发展	viii
走向科学计算和战略计算	ix
本课程的学习方法	x
第一章 Monte Carlo 方法	1
§1.1 随机数产生器	1
1.1.1 均匀随机数产生器	1
1.1.1.1 伪随机数的要求	1
1.1.1.2 Lehmer 线性同余法	2
1.1.1.3 16807 产生器	3
1.1.1.4 种子值	3
1.1.1.5 Tausworthe 位移计数器法	4
1.1.1.6 Fibonacci 延迟产生器	4
1.1.2 伪随机数的统计检验	5
1.1.2.1 独立性与相关系数	5
1.1.2.2 均匀性检验—频率检验	6
1.1.2.3 独立性检验—多维频率检验	7
§1.2 由已知分布的随机抽样	8
1.2.1 直接抽样法	8
1.2.1.1 离散型变量分布	8
1.2.1.2 连续型变量分布	8
1.2.2 变换抽样法	9
1.2.2.1 一般方法	9
1.2.2.2 Box-Muller 法	10
1.2.3 舍选抽样法	11
1.2.3.1 一般形式	11
1.2.3.2 简单分布	12
1.2.3.3 乘分布	13
§1.3 定积分的计算	14
1.3.1 掷石法	14
1.3.2 平均值法	14
1.3.3 中心极限定理与误差	15
1.3.4 多重定积分	15
1.3.5 提取法	16
1.3.6 重要抽样法	16

1.3.7 奇异积分	17
§1.4 Monte Carlo 模拟基础	18
1.4.1 Markov 过程	18
1.4.1.1 条件概率	18
1.4.1.2 主方程	18
1.4.1.3 Markov 过程的物理应用	19
1.4.2 Metropolis 方法	20
1.4.2.1 抽样规则	20
1.4.2.2 证明	21
§1.5 随机行走与生长问题	23
1.5.1 Brown 运动	23
1.5.2 随机行走	24
1.5.2.1 一维 RW 模型	24
1.5.2.2 标度指数	25
1.5.2.3 扩散的物理	26
1.5.2.4 熵	27
1.5.2.5 RW 模型的变形	28
1.5.3 自规避随机行走	29
1.5.3.1 SAW 模型	29
1.5.3.2 指数的计算	30
1.5.4 高分子结构	31
1.5.4.1 高分子链	31
1.5.4.2 径向分布函数	33
1.5.4.3 Flory-Fisher 平均场理论	34
1.5.4.4 边缘维数	35
1.5.4.5 有机玻璃	35
1.5.4.6 高分子链的动力学	36
1.5.5 非平衡生长	37
1.5.5.1 生长模型的概念	37
1.5.5.2 Eden 模型	38
1.5.5.3 弹道聚集模型	39
1.5.5.4 扩散受限聚集模型	41
1.5.5.5 Laplace 生长	44
1.5.5.6 其它生长模型	45
1.5.5.7 介电击穿模型	48
§1.6 逾渗问题	50
1.6.1 逾渗模型	50
1.6.1.1 何谓逾渗	50

1.6.1.2	逾渗的类型	51
1.6.1.3	逾渗阈值	52
1.6.2	逾渗与相变	55
1.6.2.1	逾渗集团的物理描述	55
1.6.2.2	集团的标识	56
1.6.2.3	相变和临界行为	57
1.6.2.4	有限尺度标度法	58
1.6.2.5	临界指数的普适性	59
1.6.2.6	标度律	60
1.6.2.7	边缘维数	61
1.6.2.8	逾渗模型的应用	62
1.6.3	数值重整化	63
1.6.3.1	重整化群概念	63
1.6.3.2	标度变换方法	64
1.6.3.3	临界指数的计算	66
1.6.3.4	Monte Carlo 重整化群方法	67
1.6.3.5	座—键逾渗的重整化群	69
1.6.3.6	不动点	70
§1.7	统计力学模型	73
1.7.1	Ising 模型	73
1.7.1.1	自旋与磁性	73
1.7.1.2	统计力学分布	75
1.7.1.3	一维 Ising 解	76
1.7.1.4	Weiss 平均场理论	77
1.7.1.5	二维 Onsager 解	80
1.7.1.6	一维模拟：热平衡	81
1.7.1.7	二维模拟：二级相变	82
1.7.1.8	二维模拟：一级相变	86
1.7.2	相关模型与模拟方法	89
1.7.2.1	XY 模型	89
1.7.2.2	Heisenberg 模型	90
1.7.2.3	q 态 Potts 模型	91
1.7.2.4	时钟模型	91
1.7.2.5	Ising 自旋玻璃	92
1.7.2.6	模拟退火法	94
1.7.2.7	临界慢化	95
1.7.2.8	Swendsen-Wang 加速重要抽样法	95
1.7.3	蛋白质折叠问题	96

1.7.3.1	蛋白质结构	96
1.7.3.2	构象的能量	98
1.7.3.3	模拟步骤	99
1.7.3.4	趋于热平衡	100
§1.8	量子 Monte Carlo 方法	103
1.8.1	路径积分	103
1.8.1.1	量子力学回顾	103
1.8.1.2	传播子	104
1.8.1.3	路径积分	106
1.8.1.4	Monte Carlo 路径积分	108
1.8.1.4	一维谐振子	109
1.8.2	变分法	112
1.8.2.1	变分原理	112
1.8.2.2	单粒子的模拟步骤	113
1.8.2.3	单粒子：一维和二维	114
1.8.2.4	H ₂ 分子	116
§1.9	粒子输运问题	?
1.9.1	电子和光子	?
1.9.2	原子和离子	?
第二章	有限差分法	117
§2.1	线性微分方程	117
2.1.1	微分方程的分类	117
2.1.1.1	偏微分方程的类型	117
2.1.1.2	初始值和边界值	117
2.1.2	初始值问题	118
2.1.2.1	有限差分	118
2.1.2.2	Euler 方法	119
2.1.2.3	量子力学的差分方程	120
2.1.2.4	Crank-Nicholson 方法	122
2.1.2.5	波包的运动	123
2.1.3	边界值问题	125
2.1.3.1	打靶法	125
2.1.3.2	本征值与本征态	126
2.1.3.3	特殊的量子阱	127
2.1.3.4	匹配法	128
2.1.3.5	双量子阱和多量子阱	129
第三章	分子动力学方法	1
第四章	非传统方法	1