

# 目 录

第一章 引例 .....	1
1.1 逾渗 .....	1
1.2 一个单粒子问题 .....	5
习题 .....	7
第二章 计算机模拟方法概论 .....	10
习题 .....	15
第三章 确定性方法 .....	16
3.1 分子动力学 .....	16
积分格式 .....	20
计算热力学量 .....	26
计算机模拟的组织 .....	31
3.1.1 微正则系综分子动力学 .....	32
3.1.2 正则系综分子动力学 .....	42
3.1.3 等温等压系综分子动力学 .....	49
习题 .....	57
第四章 随机方法 .....	59
4.1 预备知识 .....	59
4.2 布朗动力学 .....	63
4.3 蒙特卡罗方法 .....	70
4.3.1 微正则系综蒙特卡罗方法 .....	82
4.3.2 正则系综蒙特卡罗方法 .....	88
4.3.3 等温等压系综蒙特卡罗方法 .....	105
4.3.4 巨系综蒙特卡罗方法 .....	107
习题 .....	112

---

附录 .....	117
A1 随机数发生器 .....	117
A2 程序清单 .....	129
参考文献 .....	158
索引 .....	171