

统计物理学中的 蒙特卡罗模拟方法

〔德〕宾德 赫尔曼 著
秦克诚 译

北 京 大 学 出 版 社

新登字(京)159号

图书在版编目(CIP)数据

统计物理学中的蒙特卡罗模拟方法/(德)宾德(Binder,K.),
(德)赫尔曼(Heermann,D.W.)著;秦克诚译
北京:北京大学出版社,1993.8
ISBN 7-301-02226-3

I.统…

Ⅱ.①宾… ②赫… ③秦…

Ⅲ.统计物理学—数学模拟

Ⅳ.O414.2

出版者地址:北京大学校内

邮政编码:100871

排印者:北京大学印刷厂

发行者:北京大学出版社

经销者:新华书店

850×1168毫米 32开本 5.375印张 134千字

1994年2月第一版 1994年2月第一次印刷

定价:9.50元

中文版序

现在，人们已开始把“计算机模拟”看成自然科学在“实验”和“解析理论”以外的第三个分支；使用计算机作为科学研究的工具，使科学家和学生能够以一种同传统方法稍微不同的方式提出问题。计算机在这方面提供的广泛的可能性是如此诱人，使得在这个领域工作的科学界人士急剧增加，迄今一直是在以指数形式无限增长！

虽然有些科学问题需要在世界最快的超级计算机上进行极大规模的计算才能解决，但是统计物理学中遇到的大多数问题远远不需要这样强有力的计算机，用适中规模的计算机资源（例如工作站和个人计算机）就可以解决了。事实上，在本书两个作者的研究组中，现在正在工作站上开展着非常先进的研究。这种性能档次的计算机，看来很快就会在全世界用合理的价格买到。因此，目前普遍需要学习如何使用这个新工具，本书就是用来填补这个空缺的，我们希望它将对中华人民共和国的科学作出贡献。我们相信，即使用很简单的或中等的计算机资源，已足以成功地从头到尾学完本书并做完书中的作业，从而为架设通向现代科学发展的桥梁迈出重要的一步。

这个中译本全靠秦克诚教授的不懈努力才得以完成，他还指出了本书英文版中迄今未发现的一些错误。我们在此非常高兴地感谢他为完成这一任务所作的巨大努力。

K. Binder

D. W. Heermann

译者前言

计算机在物理学中起着越来越重要的作用。它不仅是传统的理论物理学和实验物理学的强有力工具，而且使物理学产生了一个新分支——计算物理学。掌握一些在计算机上通过数值计算解决物理问题的能力，已成为每个物理系学生必须具备的素养。在这种背景下，许多院校的物理系都开设了计算物理基础或计算机模拟方法之类的课程。这些课程的教材建设，除自己动手编写外，引进国外的一些优秀教材也是一条重要途径。

计算物理教材有两种类型。一种以计算方法为纲，介绍各种常用的计算方法，每种方法之后举一两个应用这种方法解决的典型物理问题，作为例题或作业。另一种是单科性的，介绍物理学某一分支学科中所用的计算方法。本书属于后一种。它在不大的篇幅内，详细介绍了统计物理中蒙特卡罗模拟方法的基本理论和技巧，及一些重要应用例子（自回避随机行走、逾渗、Ising模型）的算法。本书的两位作者都是这方面的权威，Binder教授现在在Mainz大学工作，Heermann教授在Heidelberg大学工作。

本书的翻译原来是根据原书初版(1988)进行的。翻译过程中发现了几处错误，译者在征得作者同意后作了更正和改写。在中译本即将付印之际，译者收到了原书出版者寄来的订正再版书(1992)，其主要变动是改正了这些错误及增加了补充文献目录。译者根据再版进行了校订，所据的版本也就改成订正再版本了。

计算物理教材应当包含足够的作业。读者必须动手编写程序，积极参与，完成作业，才能掌握所学的方法，培养解决实际问题的能力，把消极知识变成积极知识。作者在本书序言和正文中多次强调了这一点。本书第三章有不少作业。为了帮助使用本书的教师备课，译者为这些作业题编了FORTRAN程序（一张软盘）需要的教师可同北京大学出版社软件部联系。

序

在学习很正规的教材时，人们会到达这样一个阶段：他自以为已经懂得教材的内容了。但在面对实际问题时，有时就会令人痛苦地表明这种“懂得”只是消极的。为了解决这些实际问题，手头需要有现成的主意和方法，必须熟练掌握这些主意和方法（成为积极的知识），才能成功地加以应用。从这一想法出发，本书的目的是尽可能填补这二者之间的差距。

怎样才能做到这一点呢？本书的材料出自1987年在葡萄牙的 Figueira da Foz 举办的暑期学校上的一系列讲座。这一系列讲座分为同时并进的两部分。其中一部分是“正规教材。”由于参加者的背景很不一样，正规教材的叙述尽可能符合教学法原则。

在这一正规部分里讨论了蒙特卡罗方法的一般观念。蒙特卡罗方法现在已在许多学科（如物理学、化学和生物学）中得到广泛的应用。因此，必须对讲座的内容范围加以限制。我们不可能给出一个全面的说明，而只限于讨论蒙特卡罗方法在相变物理学上的应用。这里特别着重讨论了有限尺寸效应。

讲座的“非正规”部分将注意力集中在实际方面。它引导参加听讲的人一步一步从“容易”的应用过渡到更高级的算法。在这一部分里，我们试图使正规部分里介绍的种种主意和概念成为活生生的东西。我们希望，本书体现了这次暑期学校做法的精神。在这次暑期学校里，上述差距缩小了，因为许多人都积极参与了两部分的学习和工作。

从上述可知，本书中介绍蒙特卡罗方法的材料对许多科学工作者都有用。它可以用作一门高年级大学生或研究生课程的教材。事实上，本书的一份初稿就曾用于在 Mainz 大学开设的一门

课程。我们不仅深入地讲述了各个算法，而且通过设置许多练习题让读者去解决，来鼓励读者积极参与。

对使用蒙特卡罗方法的研究工作者和科学家，本书也含有可能对他们的研究工作很重要的材料。例如，我们讨论了一个量的蒙特卡罗估值的统计误差的问题。也考虑了自平均问题。

我们首先要向 K. Kremer 和 D. P. Landau 表示谢意。没有他们不断的合作和建设性的批评，这本书不会是现在这个样子。我们也感谢 Mainz 大学凝聚体理论组的同学们，他们积极参加了这门课程并且带批评性地读了本书手稿。特别感谢 M. DeMeo，他运行了某些程序。

Kurt Binder

Dieter W. Heermann

1988年5月于Mainz

K. Binder D. W. Heermann

Monte Carlo Simulation in Statistical Physics

An Introduction

Second Corrected Edition

**Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York
London Paris Tokyo**

目 录

1	引言：本书的目的和范围及一些一般性的评述.....	(1)
2	蒙特卡罗方法的理论基础及其在统计物理学中的应用	(6)
2.1	简单抽样对重要性抽样	(6)
2.1.1	各种模型	(6)
2.1.2	简单抽样	(8)
2.1.3	随机行走和自回避行走	(10)
2.1.4	由简单抽样方法得出热平均	(15)
2.1.5	简单抽样的优点和局限性	(17)
2.1.6	重要性抽样	(21)
2.1.7	再谈模型和算法	(24)
2.2	蒙特卡罗程序的组织和蒙特卡罗抽样的动力学解释.....	(28)
2.2.1	对Ising模型的模拟的初步讨论.....	(28)
2.2.2	边界条件	(32)
2.2.3	重要性抽样蒙特卡罗方法的动力学解释	(36)
2.2.4	统计误差和时移弛豫函数	(41)
2.3	有限尺寸效应.....	(44)
2.3.1	逾渗转变问题的有限尺寸效应	(44)
2.3.2	逾渗问题的有限尺寸标度	(49)
2.3.3	破缺对称性和热相变问题上的有限尺寸效应	(51)
2.3.4	序参量的概率分布及用它论证有限尺寸标度和唯象重正化	(55)
2.3.5	弛豫时间的有限尺寸行为	(67)
2.3.6	没有“超标度关系”的有限尺寸标度	(70)
2.3.7	一级相变的有限尺寸标度	(71)
2.3.8	统计误差的有限尺寸行为和自平均问题	(77)
2.4	关于本章(理论章)的内容范围.....	(82)
3	蒙特卡罗方法实际工作指南	(84)
3.1	本指南的目标.....	(87)

3.2 简单抽样	(91)
3.2.1 随机行走	(91)
3.2.2 不退行随机行走	(99)
3.2.3 自回避随机行走	(102)
3.2.4 逾渗	(107)
3.3 偏倚抽样	(116)
3.3.1 自回避随机行走	(116)
3.4 重要性抽样	(119)
3.4.1 Ising 模型	(120)
3.4.2 自回避随机行走	(137)
附录	(139)
A1 随机行走问题的算法	(139)
A2 用来证认集团的算法	(141)
参考文献	(146)
补充文献	(155)
索引	(159)