```
Monte Carlo 方法: 采用隨机数于各种物理计算和模拟实验,以类似于赌博中投骰子的方式来随机决定其中某个单 第 i 步,第 j 条轨迹:\mu = \langle X_i \rangle = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_{i,j} \to 0 \quad \langle X \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_{i,j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_{i,j} = 0
独事件的结果。
Lehmer 线性同余法: I_n = (aI_n + b) \mod m, x_n = I_n/m(b = 0 乘同余法 b \neq 0混合同余法)
Schrage 方法: m=aq+r, q=[m/a],r=m mod a。如 2147483647=16807*127773+2836. (q=127773,r=2836)
az \ mod \ m=\{z/q^*(aq+r)-rz/q\} \ mod \ m=\{[z/q](aq+r)+(z \ mod \ q)/q^*(aq+r)-r[z/q]-r(z \ mod \ q)/q\} \\ mod \ m=\{a(z \ mod \ q)-r[z/q]\} \\ mod \ \frac{3K\tilde{R}\cdot \delta A(t)}{\delta A(t)} =A(t)-(A) \\ (A(t))=A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-(A(t)-
m = a(z \mod q) - r[z/q](if \ge 0); a(z \mod q) - r[z/q] + m
也可以当4字节整数超过2个31-1时只保留后32位。如果是负数就加231-1再加1
Tausworthe 位移计数器: I_n = I_{n-p} 与或I_{n-q}。 R250: p=250, q=103
避开随机数列缺陷的方法:对各个物理量不要连续地使用连续的随机数列,各自采用分别的随机数列并有各自的 液体分子速度的自相关函数:C(t) = \langle v_x(t) v_x(0) \rangle
种子值,还应使循环的周期错开,或者淘汰序列中任意个随机数
Fibonacci 延迟产生器: I_n = I_{n-n} 操作符 I_{n-a} \mod m。 优点: 周期长
带载减法产生器 I_n=I_{n-22}-I_{n-43}-C C 的 取值: C=0 if I_n\geq 0; C=1 I_n=I_n+(2^{32}-5) if I_-n<0
带载减法 Weyl 产生器 J_n=J_{n-22}-J_{n-43}-C C的取值: C=0 if J_n\geq 0; C=1 J_n=J_n+(2^{32}-5) if J_n<0
K_n = (K_{n-1} - 362436069) \mod 2^{32} I_n = (J_n - K_n) \mod 2^{32}
Marsaglia 产生器: 组合产生器,用两个不同的随机数产生器序列生成另外一个随机数序列
        \int x_{n-97} - x_{n-33} \quad if \ge 0
                                                                            a-b if > 0
x_n = \begin{cases} x_{n-97} - x_{n-33} & ij \le 0 \\ x_{n-97} - x_{n-33} + 1 & if < 0 \end{cases} \quad a \circ b = \begin{cases} a - b & ij > 0 \\ a - b + 16777213/16777216 & if I \ n < 0 \end{cases}
y_n = y_{n-1} \circ (7654321/16777216) \ z_n = x_n \circ y_n
独立性检验: 自相关函数(线性关系)C(l) = \frac{\langle x_n x_{n+l} \rangle - \langle x_n \rangle^{-1}}{\langle x_n^2 \rangle - \langle x_n \rangle^{-2}}
均匀性检验: [0,1]分为 K 个子区间,每个区间内的n_k应趋于m_k = N/K。令统计量X^2 = \sum_k \frac{(n_k - m_k)^2}{m_k}
X^2很大:表示远远偏离理想值,X^2趋于 0:有可能 N 已经进入循环。通常使得求和中每一项大小约为 1,此时X^2 = p(v) = \sqrt{\frac{mv}{2\pi KT}} \exp\left\{-\frac{mv^2}{2kT}\right\}
K。X^2的极限分布是卡方分布,自由度v = K - 1。这是因为\sum_k m_k = N。
多维频率检验:设每 S 个随机数作为 S 空间中的一个点的坐标值,于是可以构成一个点序列。
位立方分割成 K 个子立方体。K_0 = K^{-\frac{1}{3}}是方体边长。理论频数m_k = N/K。
直接抽样法: Poisson 分布抽样: \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\lambda^i}{i!} < e^{\lambda \xi} \le \sum_{i=0}^{n} \frac{\lambda^i}{i!} 指数分布: p(x) = \lambda^{-1} e^{-x/\lambda}; 抽样: x = -\lambda \ln(1 - \xi) =
-\lambda \ln \xi 散射方位角余弦分布: p(x) = \pi^{-1}(1-x^2)^{-0.5} \to \xi = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^{x} \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} = \frac{1}{\pi} \arcsin x + \frac{1}{2} \to x = \sin 2\pi \xi \to x = \cos 2\pi \xi \frac{k \pi \xi h \xi}{2\pi (\pi \lambda)} : \frac{\langle r^2(N) \rangle}{2\pi (\pi \lambda)} > = \frac{aN^{2\nu}(1+bN^{-\Delta}+\cdots)}{2\pi (\pi \lambda)}
变换抽样法: p(x) = \frac{dy}{dx}g(y) p(x,y) = |\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}|g(u,v)。 设g(u,v)为[0,1]×[0,1]上的均匀分布。寻找x = \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}
x(u,v),y=y(u,v),使得p(x,y)=|\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,v)}|,对(u,v)进行均匀抽样,代入变换式得x和y的抽样
Box-Muller 法: (u,v) \in [0,1], x = \sqrt{-2\ln u}\cos 2\pi v, y = \sqrt{-2\ln u}\sin 2\pi v x 和 y 为正态分和[\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}] =\frac{1}{2\pi}e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}
球面上的均匀分布: (u,v) \in [0,1] r^2 = u^2 + v^2 \le 1,大于1 则重新抽样。x = \frac{u}{\cdot}, y = \frac{v}{\cdot}. 将该方法用到上面的 gauss 几率与之前的一步有关,同向: a,反向: 1-a
中代替三角函数运算: x = \frac{u}{\sqrt{-2 \ln r^2}}, y = \frac{v}{\sqrt{-2 \ln r^2}}
 三维球面 Marsaglia 方法: (u,v) \in [0,1], r^2 = u^2 + v^2 \le 1, 大于 1 则重新抽样。x = 2u\sqrt{1-r^2}, y = u^2 + v^2 \le 1
2v\sqrt{1-r^2}, z=1-2r^2
四维超球面 Marsaglia 方法: (y_1, y_2) \in [0,1]; (y_3, y_4) \in [0,1] r_1^2 = y_1^2 + y_2^2 \le 1, 大于 1 则重新抽样。r_2^2 = y_3^2 + y_4^2 \le 1
y_4^2 \le 1, 大于 1 则重新抽样。x_1 = y_1, x_2 = y_2, x_3 = \left(\frac{y_3}{r_1}\right)\sqrt{1 - r_1^2}, x_4 = \left(\frac{y_4}{r_1}\right)\sqrt{1 - r_1^2}
舍选抽样法: 设p(x) = \frac{\int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y)dy}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y)dy}。 1. 由g(x,y)产生一对抽样值(\xi_x, \xi_y): (\xi_1, \xi_2) \in [0,1] \xi_1 =
\int_{-\infty}^{\xi_x} dx \int_{-\infty}^{+\infty} g(x,y) dy, \xi_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{\xi_y} g(x,y) dy。 2. 判断\xi_y < h(\xi_x)是否成立,成立则取\xi_x为抽样。
简单分布: 假设函数在有限区域[a,b]上有上界 M,取 h(x)=p(x),取 g(x,y)=1/[M(b-a)]。1.对 g 抽样,(\xi_1,\xi_2)\in[0,1] 非晶态固体: r 较小时有小峰,r 很大时趋于抛物线
\xi_1 = \frac{\xi_x - a}{k_{x-a}} \xi_2 = \frac{\xi_y}{M} 2.判断M \xi_2 \le p(a + (b - a)\xi_1) 3.成立,x = a + (b - a)\xi_1, y=epsilon*M。判断 y<p(x)是否成立。
比较函数: 设 F(x)形状和 p 类似但处处比 p 大,则先抽取出满足 F(x)分布的\xi,满足\xi_1 = \int_0^{x_1} F(x) dx,取 设 N 个链段以恒定的密度\sim N/R^d分布在半径为 R 的球体内。总排斥能: U = U_0 N^2/R^d。配分函数: Z(R) = U_0 N^2/R^d。配分函数: Z(R) = U_0 N^2/R^d。配分函数: Z(R) = U_0 N^2/R^d
\xi_v = \xi_2 F(\xi_x)。如果\xi_v < p(\xi_x),则选取\xi_x。
定积分: \int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{v} \sum_i f(x_i)
方差var\{x\} = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 协方差cov\{x,y\} = \langle (x - \langle x \rangle)(y - \langle y \rangle) \rangle = \langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle
相关系数cor\{x,y\} = \frac{(xy)-(x)(y)}{\sqrt{(x^2)-(x)^2}\sqrt{(y^2)-(y)^2}} = \frac{cov(x,y)}{\sqrt{var\{x\}var\{y\}}} var\{x+y\} = var\{x\} + var\{y\} + 2cov\{x,y\}
若x和y无关联: cov\{x,y\} = 0 \rightarrow var\{x+y\} = var\{x\} + var\{y\} var\{\sum_{i=1}^{N} X_i\} = \sum_{i=1}^{N} var\{X_i\}
var\{\langle X \rangle\} = var\{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}X_i\} = \sum_{i=1}^{N}var\{X_i\}/N^2 \sigma_{\langle X \rangle} = \sqrt{var\{\langle X \rangle\}} = \sigma_X/\sqrt{N}
中心极限定理: P\left\{\left|\frac{(f)-\mu}{\sigma_f/N}\right| < \beta\right\} \to \Phi(\beta) = \int_{-\infty}^{\beta} \exp{-x^2/2} dx \ \langle X \rangle \sim N(\mu, \sigma^2/N) \sum_{i=1}^{N} X_i \sim N(N\mu, N\sigma^2)
大数定理: \lim_{N} \frac{1}{N} \sum_{i} f_{i} = \mu
提取法: g(x)与f(x)形状相似且积分值已知\int fdx = \int (f-g)dx + \int g dx \cdot (f-g)较为平坦
重要抽样法:g(x)与f(x)形状相似。x按照几率分布g(x)选取。\int fdx = \int (f/g)gdx = \langle f/g \rangle = 1/N \sum_i f(x_i)/g(x_i) 粒子,把它重新放回原点。改进:让起始圆比聚集集团约为大一些即可,省略去从远处走进这个圆周之前所需化的
<mark>权重 MC 积分</mark>: 设dy = g(x)dx, 使得[a,b] \rightarrow [0,c]c = \int_a^b g(x)dx, \int_a^b f(x)dx = \int_a^b (f/g) gdx = \int_a^b (f/g) gdx 时间。屏蔽效应: 越是尖端处生长得越快,从而形成枝蔓向外延伸,越是平坦处生长得越慢,从而出现沟槽中的空
Brown 运动: 阻力: -αν涨落力: F
Brown 运动方程: m\ddot{x}=F_x-\alpha\dot{x}+x\ddot{x}=\frac{1}{2}\frac{d^2}{dt^2}x^2-\dot{x}^2得到 Virial 定理(对颗粒总数做平均): \frac{1}{2}\frac{d^2}{dt^2}(mx^2)-\langle m\dot{x}^2\rangle=
\langle x^2(t) \rangle = 2Dt 扩散系数D = k_B T/\alpha \langle \Delta x^2 \rangle = 2Dt
                                                                                                                                                              \langle \phi_0 \rangle = \frac{1}{N} \sum \{ \Phi(s_n) - h^2 / 4 \sum q_k \}
  一维 RW: 几率 p 向左,几率 q 向右,一步长l。\langle x(N) \rangle = (q-p)Nl; \langle x^2(N) \rangle = 4pqNl^2 + N^2l^2(q-p)^2
                                                                                                                                                              levy 随机行走或飞行,步长 s 按幂次律分布。p(s) = s^{-a}, if s \ge 1; 1 if s < 1。行走: 粘在路径中所遇见的聚集集
Smoluchowski 理论:如果粒子向右移动比向左移动多 m 次x(t) = ml。n 次移动中右移多于左移 m 次的几率
                                                                                                                                                              团的第一个粒子上。飞行: 只粘在在航程终点处
p_n(m) = \frac{1}{2^n} \frac{n!}{\binom{n+m}{2}!} \rightarrow \langle m \rangle = 0, \langle m^2 \rangle = n 令x = ml, t = n\tau 得到\langle x(t) \rangle = \langle m \rangle l = 0, \langle x^2(t) \rangle = \langle m^2 \rangle l^2 = ml^2 =  偏压效应: 粘接几率正比于位置径向距离的指数律中
\frac{l^2t}{\tau} = 2Dt(D = l^2/(2\tau))
                                                                                                                                                              点扩散的速率为v_{i,j} = n \big| (\phi_0 - \phi_{i,j} \big|^\eta。环绕已占据格点周界上的一个空格子被占据的几率是p_{i,j} = v_{i,j} / \sum v_{i,j}
Einstein 理论: Brown 粒子在特征时刻τ内在x方向位移Δ的几率密度: P(\Delta) = P(-\Delta)
                                                                                                                                                              逾渗模型: 二级相变
```

设单位体积内的粒子数密度f(x,t),则 $t+\tau$ 时刻在 $x\sim x+dx$ 内的粒子数为 $f(x,t+\tau)dx=dx$   $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x+t)dt$ 

 $\langle x^2(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 f(x,t) dx = 2Dt = \sigma^2$  Einstein 关系: $D = \frac{kt}{6\pi na} (\eta 粘滯系数, a球径)$ 

由方差的推导:有 N 步, 共有 n 条轨迹总距离

 $\Delta, t) P(\Delta) d\Delta$  按时间和空间分别进行展开得  $\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial t^2} \left(D = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2\tau} P(\Delta) d\Delta = \frac{t^2}{2\tau} \right)$ 解得  $f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi n D t}} \exp{-\frac{t^2}{2\tau}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial t} d\Delta = \frac{t^2}{2\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial t} d\Delta$ 

```
单独一步对所有轨迹的平均:\sigma^2 = var\{X_i\} = \langle X_i^2 \rangle - \langle X_i \rangle^2 = \langle X_i^2 \rangle = \frac{1}{2}(+l)^2 + \frac{1}{2}(-l)^2 = l^2
   走 N 步后对所有轨迹的平均:var\{\sum_{i=1}^{N} X_i\} = \sum_{i=1}^{N} var\{X_i\} = Nl^2
   自相关函数:C(t) = cov\{A(t), A(0)\} = \langle \delta A(t)\delta A(0) \rangle = C(-t) C(0) = \langle \left(\delta A(0)\right)^2 \rangle = \langle (\delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2同时间下
整 的相关函数为有限大小。 \lim C(t) = \lim \langle \delta A(t) \delta A(0) \rangle = \langle \delta A(t) \rangle \langle \delta A(0) \rangle = 0
   自发涨落回归: \langle A(t)\rangle\langle A(0)\rangle = \langle A^2\rangle(t=0); \langle A\rangle^2(t\to\infty)
                                                           \langle v_r^2 \rangle = v_r(0)^2 \exp(-t/\tau) (t \to \infty)
   第一涨落耗散定理(Green-Kuno 公式):D = \frac{1}{3} \int_0^\infty \langle v(t) \cdot v(0) \rangle dt = \int_0^\infty C(t) dt
  Langevin 理论, Brownian 动力学:粘滯阻力:-υ/B(B是迁移率), 快速涨落力:F(t)(系统特征时间τ >>碰撞事件)
  Langevin 方程(随机微分方程):m\frac{dv}{dt} = -\frac{1}{R}v + F(t) \rightarrow \frac{dv}{dt} = -\frac{1}{\tau}v + A(t)(\tau = mB)
   长时间平均:\overline{A(t)} = 0 B是宏观唯象系数:\frac{1}{a} = 6\pi\eta a 系综平均:\langle A(t) \rangle = 0 \langle A(t) \cdot A(0) \rangle = 6D'\delta(t)
   \mathbb{R} \boxplus v(t) \to C(t) = \frac{1}{2} \langle v^2(0) \rangle \exp(-t/\tau) = C(0) \exp(-t/\tau) \to D = \int_0^\infty C(t) dt = \frac{1}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{kT}{m} \tau = kTB = \frac{kT}{(m)} \tau
  Einstein 关系: D = kTB = \frac{kI}{6\pi na}
   \langle v(t) \rangle = \langle v(0) \rangle \exp(-t/\tau) \langle v^2(t) \rangle = \langle v^2(0) \rangle \exp(-2t/\tau) + 3D'\tau(1 - \exp(-2t/\tau)) \lim_{t \to \infty} \langle v^2(t) \rangle = 3D'\tau = \frac{3kT}{2}
  p(v,t|v_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2\xi}} \exp\left\{-\frac{(v-v_0\eta)^2}{2\sigma^2\xi}\right\}与初始速度无关(\sigma^2 = D'\tau, \eta = \exp(-t/\tau), \xi = 1-\eta^2)趋于 Maxwell 速度分布
   第二涨落耗散定理: 阻力摩擦力等与涨落有关。摩擦越小,涨落力越大。
  计算得到\langle r^2 \rangle = \frac{6kT}{m} \tau^2 \left\{ \frac{t}{\tau} - \left[ 1 - \exp\left( -\frac{t}{\tau} \right) \right] \right\} \approx \begin{cases} \frac{3kT}{m} t^2 = \langle v^2 \rangle t^2 (t \ll \tau) \\ \frac{6kT}{m} \tau t = 6Dt(t \gg \tau) \end{cases}
  \frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}。p(x,t) dx是粒子在t时刻存在于x至x + dx之间的概率。两边乘x与x^2积分,\langle x(t) \rangle =
  0, \langle x^2(t) \rangle = 2Dt扩散方程的解是高斯正态分布p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp(-(x-\langle x \rangle)^2/2\sigma^2), \ \sigma = \sqrt{2Dt}
  熵: S = -\sum_{i} p_{i} \ln p_{i}(平面上划分网格, p_{i}为第i格子里面的粒子数除以总数)
   雨滴模型: p±~1±E。反射壁模型: x = ±a无穷大势垒,到达a时,下一步反射到a − 1。持续性 RW: 某一步行进 正则系综: F(N,V,T),恒温热浴; 微正则系综: S(N,V,E),N个粒子放入体积为 V 的盒子内,固定总能量 E, 无能量
   自规避随机行走(SAW)的标度指数计算
  比值法: \nu(N) = \frac{1}{2} \frac{\ln[\langle r^2(N+i) \rangle / \langle r^2(N-i) \rangle]}{\ln[\langle N+i \rangle / \langle N-i \rangle]}
   权重法: 1、起始一步权重为 w(1)=1; 2、自相交时 w(N)=0, 重新开始另外一条行走; 3、如果可以选择 3 个方向:
   w(N)=w(N-1):4、如果可以选择的方向数1 < m < 3, w(N)=(m/3)*w(N-1):5、最后对行走数i以权重加和求方均根值
  \langle r^2(N)\rangle=\frac{\sum_i w_i(N) r_i^2(N)}{-}
   标度律\langle r^2 \rangle^{0.5} = r_{rms} = l N^{0.5}对各种维数都成立,可以假设三维随机行走时概率密度函数为p(r) = A \exp{-Br^2}, A = r_{rms}
   (2\pi/3)^{-1.5}r_{rms}^{-3}, B = (1.5)r_{rms}^{-2} 径向分布函数RDF(r) = 4\pi r^2 p(r) 峰值: \sqrt{2/3}r_{rms}
   完全无序的气体: RDF 为抛物线型
  非晶态固体,r 较小时有小蜂,r 很不时起于视响起
Flory-Fisher 平均场理论: 将链段的空间看做是按照光滑的 Gauss 型概率分布在质心周围,然后利用配分函数求得最-T\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}\right)_{NV} = \frac{1}{kT^2}[(E^2)_{NVT} - \langle E\rangle_{NVT}^2]
  Eden 生长模型: 1、在任何一种网格上随机选取一点, 2、在已形成的占据集团的周界上任取一点
   癌细胞模型:占据点表示癌细胞,未被占据点代表正常细胞。在三角网格上。1.将网格中心点设成是占据点即癌细主方程(相当于几率守恒方程、即对所有时间都有\int p(x,t)dx = 1)^{rac{\partial p(x,t)}{\partial x}} = \int dx' [-W(x'	o x)p(x,t) + W(x	o x')
  再随机选取它的一个最近邻格点 B。如果 A 和 B 点有不同的标识(即有一个是癌细胞)的话,则将 B 的标识改为 \frac{p(x)}{p(x)} = \frac{w(x \to x)}{p(x)}有 2M 个方程,但是矩阵元有M^2,所以细致平衡下的主方程式不能唯一地确定跃迁矩阵 A 的标识。 k 因子可以看成是癌细胞分裂率与正常细胞分裂率之比, k 大于 0.5 时就可以生长,当 k →∞ 极限时即 \frac{p(x)}{p(x)} = \frac{w(x \to x)}{w(x \to x)}有 2M 个方程,但是矩阵元有M^2,所以细致平衡下的主方程式不能唯一地确定跃迁矩阵
   <u>弹道聚集模型</u>: 粒子是从各处按随机选择的方向以直线飞行轨迹撞在聚集的集团上,粒子粘结在与集团第一次接 能将刘维尔方程改写为主方程。
   触的位置上。这个模型生长出的图形是有支叉形结构的。
   扩散受限聚集模(DLA): 1.取一个 2 维的方形点阵,在点阵中央原点处放置一个粒子作为生长的种子 2.从距原点足 满足的几率分布 p 而定。转移概率表示式为:
   够远的圆周界处释放一个粒子, 让它作 Brown 运动或随机行走 3.该粒子走到种子的最近邻位置与种子相碰, 这时
   让粒子粘结到种子上不再运动:粒子走到大于起始圆的更远处(如2-3倍的半径处)或干脆走到点阵边界,取消该
   Laplace 生长: \nabla^2 \phi = 0 边界条件: 在足够远处的外边界, 势为常数。中央电极处的势为 0。
  RW 求解 Poisson 方程: \nabla^2 \phi(x, y) = q(x, y) \rightarrow \phi_{ij} = (\phi_{i-1} + \phi_{ij-1} + \phi_{ij-1} + \phi_{ij+1} - h^2 q_{ij})/4
```

键逾渗: 阀门在管子中间 座逾渗: 阀门在接头处 座逾渗的值比键逾渗大

 $d=1, p_c=1, n_s=(1-p)^2 p^s$ 得到 $S=\frac{p_c+p}{p_c-p} \to \frac{2p_c}{p_c-p} \propto (p_c-p)^{-1} \to \gamma=1$ 

 $\underline{x}^2$ 集团大小分布:  $n_s(p)$  = 大小为s的集团数/格点总数。随机选取一个格点属于大小为 s 的集团的概率 $w_s(p)$  =  $^{4Dt}sn_s/\sum_s sn_s$ (排除无限大)集团平均大小S =  $\sum_s sw_s$ 

 $\int \exp(-\beta H) \Omega'(E) dE = \int \exp(-\beta H) Z_{NVE} dE$ 形状而定:  $W_{ij} = \begin{cases} T_{ij}, if \ p_j T_{ji} > p_i T_{ij} \\ T_{ji} \left(\frac{p_j}{p_i}\right), if \ p_j T_{ji} < p_i T_{ij} \end{cases}$ 

跨越长度₹: 集团的跨越直径或跨越长度,跨越长度: 集团中的两个座(对键逾渗则为两条键的中心)的最大间距₹ =  $(\max\{|{m r}_i-{m r}_j|\}_{(i,j)\in cluster})$ 。 或者从集团重心计算出的平均距离或方均根距离。回转半径平方 $\xi^2=\frac{\sum_S s^2 n_s R_s^2}{\sum_C s^2 n_s}, R_s$ 为是 从质心开始测量的集团半径的方均根距离。 $R_s^2 = \frac{1}{c} \sum_{i=1}^s (r_i - \bar{r})^2$ , $\bar{r} = \frac{1}{c} \sum_{i=1}^s r_i$ 

当占据概率为p时,点阵上任意一点属于无限大集团的概率定义为逾渗概率(序参量) $P_{\infty}(p)=\lim P_{s}(p)$ 

 $P_{\infty}(p) + \sum_{s=1} s n_s = p; d = 1, p_c = 1, n_s = (1-p)^2 p^s$  得到 $p < p_c$ 时, $P_{\infty}(p) + \sum_{s=1} s n_s = p - (1-p)^2 \sum_{s=1} s p^s \to (1-p)^2 \sum_{s=$  $P_{\infty} \propto (p_c - p)^{\beta} \rightarrow \beta = 0$ 

对关联函数:g(r) 是离占据位点距离为 r 处的格点属于同一有限集团的概率。 $S = \sum_r g(r)$ 

 $d = 1, p_c = 1 \to g(r) = p^r = \exp(r \ln p) = \exp(-r/\xi) \ \xi = -\frac{1}{\ln p} \approx (p_c - p)^{-1} \to \xi \propto (p_c - p)^{-\nu}, \nu = 1$ 

集团的标识: 用二维数组 A(Li)来标识格点所处的 i 行和 i 列取值是集团序号。从左下角(1.1)处开始向右填充,如 果随机数选取使得某一个格点为占据点时,则对应数组元素取值为1。对于后续占据的格子,如果它下方和左方均无 占据格子的话标识+1。如果下方有占据格子,则等同于下方。如果下方无左方有,则等同于左方。取一标识集团所 属的数组 B,数组下标 k就是上面标出来的集团序号,数组元素取值则为按上述规则该集团所应取的正确标识值. **適滲概率** $P_{\infty}(p) \sim (p - p_c)^{\beta}$ ,  $\beta < 1$ ; 电导率 $\sigma(p) = (p - p_c)^t$ , t > 1跨越长度集团 $\xi(p) = |p - p_c|^{-\nu}$ ; 集团平均大小  $S(p) = |p - p_c|^{-\gamma}$ 。跨越长度集团和集团平均大小均考虑 $p < p_c$ 。

对于有限尺度的体系,我们可以这样子考虑,对于 $\xi \ll L$ 时, $P_{\infty}(p) \sim (p-p_c)^{\beta}$ 是成立; 当 $\xi \sim L$ 时, $\xi(p) =$  $|p-p_c|^{-\nu} \sim L \sim |p-p_c|^{-\nu}$ 。 反解:  $|p-p_c| \sim L^{-1/\nu}$  得到 $P_{\infty}(p=p_c) \sim L^{-\beta/\nu}(L \to \infty)$ , 再根据标度律求指数。 不同的点阵和逾渗类型 $p_c$ 不一样,但是标度指数一样,只与维数有关。

齐次函数就是幂指数函数 标度律:  $2\beta + \gamma = vd$  適滲边缘维数: 6

重整化: p' = R(p),  $p^* = R(p^*)$ ,  $v = \frac{\ln b}{\ln(dp'/dp)}(p = p^*)$ 

Monte Carlo 重整化方法: 一般来说集团上下连接的概率可以表示成 $R(p|N=b^2) = \sum_{n=1}^N C_N^n p^n (1-p)^{N-n} K(n)$ K(n)是由 n 个随机占据格子形成的上下端连接的几率。

设在空点阵上随机地添加上一个粒子使某格点成为占据态,如果不存在上下端连接路径,则在剩余的空格子中随 机选择地再添加上一个粒子,产生一个新的构型。当有 m 个粒子添加并出现上下端连接路径之时起,对于 $n \ge m$ 的粒子,每添加一个粒子时计数一次,K(n) = K(n) + 1,直至构型数目足够多甚至穷尽所有可能的构型,然后以 总的构型数目将K(n)进行归一化。为了提高效率,可以在添加粒子的总数达到 $m\sim p^*N$ 之后才开始检查是否出现上

座-键逾渗的重整化群: 既有阀门在通道处, 也有阀门在接口处。

刘维尔定理:  $\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + [\rho, H] = 0$ , 平衡态时,  $\frac{\partial\rho}{\partial t} = 0$ ,  $[\rho, H] = 0$ 

满足 $[\rho,H]=0$ 的一种可能是 $\rho=C$ ,即系综体系在任意时候都是均匀分布的,系综成员等几率地分布在所有微观态

中,对应微正则系综 $(A) = \frac{1}{\alpha} \int Ad\Omega$ ; 另外一种可能是 $\rho = \rho(H)$ ,对应正则系综 $\rho \sim \exp(-H/kT)$ 

与粒子交换; 巨正则系综:  $J(\mu,V,T)$ , 有粒子源的恒温热浴; 等温等压系综: G(N,P,T); 正则系综:  $\rho_{NVT} = Z_{NVT}^{-1} \exp(-\beta H)$   $\langle A \rangle = Z_{NVT}^{-1} \int A(q, p) \exp(-\beta H(q, p)) d\Omega$   $Z_{NVT} = \int \exp(-\beta H d\Omega) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \exp(-\beta H(q, p)) d\Omega$ 

 $Z_{NVE}$  随能量剧烈增加, 但玻尔兹曼分布急剧减小,所以两函数的乘积会在某个 E 值附近有尖锐的分布。所以正则 系综和能量严格为(E)的体系几乎等价,正则系综中能量的涨落不会很大。当粒子数和体积趋于无穷的时候,两系

正则系综的特征函数是 Helmholtz 自由能 F(到达平衡态时 F 取极小值 $F(N,V,T) = -kT lnZ_{NVT}, F = E - TS; S =$  $-\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N,V}$ ,  $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{N,T}$ ,  $\mu = -\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{V,T}$ 

总能量  $E = F + TS = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{N,V} = -T^2\left[\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{T}{F}\right)\right]_{N,V} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \left(\frac{F}{T}\right)}{\partial \left(\frac{L}{T}\right)} \end{bmatrix}$   $\langle E \rangle_{NVT} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{N,V} = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}{\partial F} C_V = -\frac{\partial \ln Z_{NVT}}$ 

我们称一个序列是 Markov 的,如果某一时刻 x 取值的条件几率是独立于上一时刻之前的所有 x 值的话。

设状态数目为 M,转移概率构成 $M \times M$ 的矩阵,  $P(N) = \lim p(1)W^{N-1}$ , Markov 的极限和初态无关。平衡态:

任务就是寻找合适的转移概率矩阵 M, 使其极限分布为 P。

胞,周围有6个最近邻格点,2.从周界上已占据的格点或周边的未被占据的格点中以几率比k:1随机选取一点 A, x')p(x',t)]。平稳分布, 细致平衡解, 可逆 markov 链(即由某步到达 x 并在下一步到x'的概率和反向的概率相等):

Markov 过程不能应用于完全决定论过程,但是更多情况下我们只关心体系的粗粒平均,在不同的时间尺度下有可

Metropolis 方法: 设 $W_{ij} = T_{ij}A_{ij}$ ,  $T_{ij}$  是由 $x_i$ 选择步进到 $x_i$ 的概率,T矩阵对称。A代表接受的概率非对称,根据待

時 被 
$$W_{ij} = \begin{cases} T_{ij}, if p_j > p_i \\ T_{ij} \left( \frac{p_i}{p_i} \right), if p_j < p_i \end{cases}$$
 和 j 相同:  $W_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} W_{ij}$ 

Barker 抽样规则: T矩阵对称。A代表接受的概率非对称, $W_{ij} = T_{ij} \frac{\nu_j}{p_j + p_j}$ 

Metropolis-Hasting 抽样规则: 更一般地,建议分布和接受几率都是非对称的,接受几率根据待满足的几率分布 p

设p(x)为所考虑的几率密度分布(正则系综: $p(x) = \exp(-\beta H)$ ),并且已经产生了 $x_1, x_2, ..., x_n$ 个抽样点,产生下一个 抽样点 $x_{n+1}$ 。可以在上一个点附近构造一个试探解, $x_t = x_n + \delta$ , $\delta$ 是试探步长(可正可负,例如可取 $\delta$  =  $(\xi - 0.5)\Delta x$ ,  $\Delta x$ 是固定步长,  $\xi \in (0.1)$ 是均匀分布的随机数), 该点是否被选取决定于比值 $r = p(x_t)/p(x_n)$ : 1、如果r > 1则选取,即 $x_{n+1} = x_r \cdot 2$ 、否则,产生[0,1]区间内均匀分布的随机数 $\xi$ ,如果 $\xi < r$ 则选取,否则,

<mark>介电击穿模型</mark>: 假设已占据格点上 $\phi_{ij} = \phi_0$ ,远处为 0。数值求解 $\phi_{ij} = (\phi_{i-1j} + \phi_{ij-1} + \phi_{ij+1})/4$ 。假设格 热化处理试探步长 $\delta$  或  $\Delta$ x的选取对抽样效率和结果分布也很重要,通常 $\delta$ 的选取是使得接受的效率为一半左右 正则系综: 将玻尔兹曼分布直接代入 Metropolis 抽样即可。

 $\underline{\text{Ising}}$ 模型: 采用格点模型,自旋设为 $\pm 1$ ,自旋有相互作用,系统的  $\underline{\text{Hamilton}}$  量为 $\underline{E} = -\sum_{i=1}^{N} J_{i,i} \sigma_{i} \sigma_{i}$  —  $\mu_B H \sum_i^N \sigma_i$ ,  $\langle i,j \rangle$ 代表邻近的自旋对, J是交换积分常数。如果一对自旋方向相同,能量为-J, 方向相反,能量为 J。因此 J 大于 0 有利于使得所有自旋方向排成一致使得能量最低。这就是铁磁性,如果 J 大于 0,那么自旋对取向 相反的时候才可能使得能量最低,宏观不表现磁性。但是加上外磁场之后逼迫自旋取向相同,产生磁化,这就是 反铁磁性。温度升高时, 热激发使得某些自旋随机反转,这就是顺磁性。

自由能  $F = -k_B T \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \ln Z$ ,藏化强度 $M = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial H}$ ,总能 $U = -\frac{\partial}{\partial \left(\frac{1}{\partial D T}\right)} \ln Z$ ,比热 $C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$ ,藏化率 $\chi = \lim_{H \to 0} \frac{\partial M}{\partial H}$  $U = \langle E \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}, M = N \mu_{B} \langle \sigma \rangle = \mu_{B} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, M^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \left( \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i} \right)_{\alpha}^{2} \langle E^{2} \rangle = \sum_$  $(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$   $(\Delta M)^2 = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$   $C = \frac{(\Delta E)^2}{k_B T^2}, \chi = \frac{(\Delta M)^2}{k_B T}$ 一维 Ising 解:  $K = \frac{J}{k_B T}$   $I = \frac{\mu_B H}{k_B T}$ 。零磁场下,配分函数 $Z = 2(2 \cosh K)^{N-1}$ 。每个自旋的自由能为F =

 $-k_BT \ln(2\cosh K)$ ,是温度的解析函数,没有相变点。有外磁场时,若采用周期性边界条件,配分函数 $Z=\lambda^N+$  $\lambda_-^N$ ;  $\lambda_+ = e^K \cosh I \pm \sqrt{e^{2K} \sinh 2I + e^{-2K}}$ 。 $H \neq 0$ , $F \approx \ln(e^K \cosh I + \sqrt{e^{2K} \sinh 2I + e^{-2K}})$ ,是温度的解析函 数,没有相变。去掉外磁场, $\frac{M}{M}=0$ ,除了T=0点无自发磁化,没有有序相变。

二维 Onsager 解: 比热 $C = \frac{4}{\pi} k_B K^2 \coth^2 2K \left\{ K(\kappa) - E(\kappa) - \operatorname{sech}^2(2K) \left[ \frac{\pi}{2} + (2 \tanh(2K) - 1) K(\kappa) \right] \right\}$ 第一类椭圆积分 $K(\kappa) = \int_0^{\pi/2} (1 - \kappa^2 \sin^2 \theta)^{-0.5} d\theta$ 第二类椭圆积分 $E(\kappa) = \int_0^{\pi/2} (1 - \kappa^2 \sin^2 \theta)^{0.5} d\theta$  $K(\kappa)$ 在 $\kappa = 1$ 处发散,相变点:  $T_c = \frac{2}{\ln 1 + \sqrt{2}} \approx 2.269$ 

 $-J \sum_{(i,j)} \cos(\varphi_i - \varphi_j)$ ,

二维 Ising 模拟:减弱有限边界的影响,可以假设周期性边界条件。指数的确定同样可以使用有限尺度标度法。  $M \sim (T_c - T)^{\beta}$   $\beta = 1/8$ 总能图上 $T_c$ 是拐点。

关联长度 $\xi$ 在相变点处o∞,意味着每一个自旋都对其他自旋态特别敏感,因此涨落特别大,稍加一个外磁场就可 向间距 $d_1,d_2,d_3$ 等值。 $d_m/d_{m-1} o$ α: $\alpha$ 是普适常数。 $\alpha$  = 2.50290787509589282228390287 以极大地改变体系的磁化强度。

在无外磁场时,M的变化是连续的,为二级相变,在有限磁场下是一级相变。只是在磁场转变为正值即沿+z轴方二维迭代 Hénon 方程 $:x_{n+1}=1-ax_n^2+y_n$   $y_{n+1}=bx_n$ 向时,磁化强度突然转向。因此,磁化强度是不连续变化的,为一级相变。注意到在 H≈0时,M 和 -M 两个状 吸引子: 轨迹在充分长时间之后将渐近地收敛到的极限的状态或状态的集合。简单吸引子的维度是整数 吸引子本身 本规则。P: 生成规则(或迭代规则) 态是等几率的,但稍加一点外磁场就可使状态取完全不同的几率。在Tc≈2.269之下,都有这种随磁场的不连续变不可分解,吸引子在相空间的体积为0。 化。但在 Tc 之上,由于自发磁化消失,因此当磁场在零值附近变化时磁化强度没有不连续变化行为。M 由 H < 0 Lorenz 方程:  $\frac{dx}{dt} = \sigma(y - x)$   $\frac{dy}{dt} = rx - xz - y$   $\frac{dz}{dt} = xy - bz$ 的负磁化方向变为 H=0 时的零值,再连续变为 H>0 时的正值方向。Tc 之下的磁化强度的跳跃是自发磁化强度的奇异吸引子具有吸引子的性质,奇异性: 1.对初始条件具有初值敏感性 2.具有无限嵌套的自相似几何结构,即具有 的各字符的图形学解释, 生成图形。作用一次称为一级,一般来说选择的级数不宜太高.通常选 2-8 级.最多 15 级。 两倍,而且在 Tc 处自发磁化强度消失,因此随磁场变化的一级相变与随温度变化的二级相变之间有紧密的关系。 低温下系统有两个相,即±M。在温度轴的Tc点之下,可以通过改变磁场进而不连续地由一个相转变为另一个 相。反映在相图上,有一条一级相变线位于温度轴上,终止于临界点。在临界温度处,没有自发磁化,因此两相的 区别消失。等于和高于 Tc 处,可以跨过温度轴而连续地改变 M。一级相变终止于临界点是一级相变的普遍特征。 XY模型: 系统的自旋具有两个任意的取向。 $E = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \cdot \sigma_i = -J \sum_{(i,j)} \sigma_{ix} \sigma_{ix} + \sigma_{iy} \sigma_{iy} =$ 

T<sub>KT</sub>下将发生 Kosterlitz-Touless 相变,它是一种在无长程有序系统中发现的一种拓扑有序。系统可以存在一种亚稳 重要定量指标,表征了系统在相空间中相邻轨道间收敛或发散的平均指数率是对混沌态的初值敏感性的定量判据 态,自旋的排列形成涡旋。在相变温度以上,涡旋是自由的。在相变温度之下,自旋涡旋是成对出现的,并且对 正的 Lyapunov 指数可作为混沌行为的判据。系统相空间中运动轨道在每个局部都不稳定、混沌现象、混沌吸引 于T < T<sub>KT</sub>的所有温度系统都和T = T<sub>KT</sub> 时一样,因此临界点实际上是临界线。计算模拟时,系统的初始构型先选 子。Lyapunov 指数小于 0 对应于不动点和各个周期的运动状态。轨道在局部是稳定的:对初始条件不敏感。 取对应于高温(T=∞)下的完全无序排列,即格点上的每个自旋方向是随机选取的,φ=2πR。然后急速降温 Lyapunov 指数等于零:对应稳定边界,初始误差不放大也不缩小。指数由负变正:表明周期轨道向混沌的转变 抽样法产生系统的各种构型。由于急速冷却,系统可以形成长寿的亚稳态涡旋结构。相变温度下正涡旋和反涡旋点,也不趋于无穷值时,则相应的Z<sub>0</sub>属于该C值下的Julia集。 是同时出现的。

Hesienberg 模型: 自旋可以取三维空间中的任意方向。注意无论是 X,Y 模型还是 Heisenberg 模型都可以用 在一 维, 二维, 三维格点上。 $E = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \cdot \sigma_j = -J \sum_{(i,j)} \sigma_{ix} \sigma_{jx} + \sigma_{iy} \sigma_{jy} + \sigma_{iz} \sigma_{jz}$ 

在系统最低能量的状态即基态上,所有自旋按照完全有序的平行或反平行排列,在有限的温度下由于热激发出现 能量较高的状态。在 Ising 模型中这样的激发态是自旋的反转,在 Heisenberg 模型中可以出现周期性的自旋波激 3种:一种自旋子格子上的自旋扭转 $\pi$ ,而另一种扭转 $-\pi$ ; 两种子格子的自旋各自扭转 $\pi$ ; 一种子格子上的自旋不 在 M 集以外,否则认为 C 点在 M 集内对每个 C 值,计算该 C 值下 $D_n > D_0$ 所需的迭代次数n, 根据此迭代次数n, 根据此迭代次数n 。 极限图形 M 应是所有迭代 $R_i$ 的吸引子,收缩的仿射变换才能保证迭代收敛到 M 上。 变,而另一种扭转 $2\pi$ 。对于三维 Heisenberg 模型,其中的一个自旋分量在外加磁场下呈现有序,而另外两个分量 出现类似于 Kosterlitz-Touless 相变的束缚拓扑态激发。 随着温度升高, 涡度增加但正负涡旋束缚态开始解离。 **q** 态 potts 模型: σ的取值可为 **q** 个, Hamilton 量= $E = -J \sum_{(i,j)} \delta_{\sigma_i \sigma_i}$  是,其中每个格点上的σ取值为 1, 2, ..., **q** 。

时钟模型: 自旋是个矢量, 它的空间取向限制在二维平面中 q 个离散指定的方向值的话系统的 Hamilton 量是E = $-J \sum_{(i,i)} \sigma_i \cdot \sigma_i$ q>4的情形,是XY模型退化成q重各向异性的极端情形,这时系统有两个Kosterlitz-Touless相变,其计算结果

自旋玻璃: Ising 模型中,交换常数 J 不再是常数,可以从高斯分布中选取,或者赋予正负值不同几率。磁化强度 不再是一个好的序参数,因此用 Edwards-Anderson 参数 $(\sigma_i)^2$ 作为序参数,其中的(...)是指在某单个初始键分布下的 $\ln 20/\ln 3 = 2.777$ 各格点的热平均,  $^{-}$ 则是指对不同初始键分布 $P(I_{ii})$ 的平均。

转移到高温,以脱离亚稳态。

自旋自相关函数: $C(t) = \int dt' [m(t'+t)m(t') - \langle m \rangle^2] \propto \exp(-t/\tau)$   $m = \frac{M}{m} = \langle \sigma \rangle \mu_B$   $\tau$ :特征相关时间(与温度有关) <mark>布朗运动:  $R^2 = Nb^2$ 。 $b^2$ : 位移的方均值 R/b: 无量纲约化总位移 N:图形包含的单元数,</mark> 临界慢化:在临界点附近,由于长程关联和无穷大涨落,采用 Metropolis 算法的单自旋翻转难以实现大集团涨落下相当于图形尺寸放大的倍数。D=ln N/ln(R/b)=2任何维空间中随机行走的分维都是 2。 的集体自旋翻转,尤其是集团中心自旋翻转概率  $\sim \exp(-8/T_c) \approx 3\%$ ,导致达到进入平衡态的计算时间显著延

同,以几率Pada 添加到该自旋块中;3.对新添加的块成员自旋,再检查其近邻自旋以确定是否要添加到块中;4.添 lnN~lns:图后得到斜率为负的直线,这表明存在如下的幂函数关系:N~s^(-D)。这样测定的分维被称为圆规维数。 加块新成员时,以前未成功添加入块的自旋可再被赋予添加新机会;4.全部添加完成后,尝试将该块的自旋集体翻周长.<mark>面积关系求分维(小岛法);</mark>规则图形的周长P与测量单位尺寸ε的一次方成正比,面积A与ε的二次方成正 转(翻转几率取决干能量消耗)。

 $P_{add}$ 依赖于温度: 随温度增加而降低。当选择  $P_{add}=1-\exp(-2\beta J)$ ,两种翻转都可全部接受,满足细致平衡条

RKKY 相互作用势能:  $H = \sum_{i,j} J(R_{ij}) \sigma_i \sigma_j$   $J(r) = J_0 \frac{\cos(2k_F r + \varphi)}{(k_F r)^3}$  长程震荡

 $p_-\delta(J_{ij}+J)$  高温:順磁相 $\langle \sigma_i \rangle = 0, \langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle = 0$  低温:自旋玻璃相 $\langle \sigma_i \rangle \neq 0, \langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle = 0$  $C(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} [\langle \sigma_i(t) \sigma_i(0) \rangle - \langle \sigma_i^2 \rangle]$   $\hat{F} \otimes \Xi : q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle \sigma_i^2 \rangle \neq 0$ 

Sherrington-Kirkpatrick 模型:  $H = -\sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \ (ij = all)$   $\langle J_{ij} \rangle = 0$   $\langle J_{ij}^2 \rangle = J^2 \ P(J_{ij}) = \frac{1}{J(2\pi l^2)} \exp\left\{-\frac{J_{ij}^2}{2I^2}\right\} \exp\left\{J_{ij}\right\} = \frac{1}{m_0 g_1} \exp\left\{J$  $p_+\delta(J_{ij}-J)+p_-\delta(J_{ij}+J)$   $\langle \ln Z_J \rangle = \int dJ_{ij}P(J_{ij})\ln Z_{J_i}$ 

副本 (replica) 方法:  $\langle \ln Z_J \rangle = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \langle Z_J^n \rangle \quad \langle Z_J^n \rangle = Tr_{\sigma_i^{\alpha}} \exp \beta \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\{ij\}} J_{ij} \sigma_i^{\alpha} \sigma_j^{\alpha}$ 

模拟回火法(Simulated Tempering):同时模拟两个一样的系统:其中一个是在高温 $T_1$ 下,不会产生遍历性破缺;型的分形计算的分维值更准确) 另一个在低温 $T_0$ 下,可能处于亚温态的能量势阱中。先用 Mteropolis 单自旋翻转方法模拟两个系统各自的演化,再 以一定速率。

交换温度的接受概率: $\Delta E = E_{v} - E_{v}$ 

 $1.\Delta E < 0$  $\exp\{-(\beta_0 - \beta_1)\Delta E\}, \Delta E \ge 0$  低温系统能量较高

遍历性: 高温系统的态直到温度交换时都可遍历,温度交换后另外一个系统也可遍历,两个系统是对称的,因此 都具有遍历性。

细致平衡条件: 各自系统的 Metropolis 步进显然是满足的, 交换温度时也是满足的。

KAM 定理: 一个充分接近可积 Halmilton 系统的不可积系统,对此系统若把不可积当作可积 Halmilton 函数的扰动 来处理,则在小扰动条件下,系统运动图像与可积系统基本一致,当扰动足够大时,系统图像就发生了性质改 变,成了混沌系统。通俗地说就是,经典力学的相空间轨迹既不是完全规则,也不是完全无规,而是十分敏感地 依赖于对起始条件的选择。微小的涨落可能引起混沌的发展。揭示了决定论和随机论之间、牛顿力学和统计力学 之间没有不可逾越的界限。

点,一定出现混沌现象。

一维迭代 Logistic 方程:  $x_{n+1} = \lambda x_n (1 - x_n) (0 \le x \le 1, 0 \le \lambda \le 4)$ 

Feigenbaum 常数: 前后分岔间距的比值 $(\lambda_m - \lambda_{m-1})/(\lambda_{m+1} - \lambda_m)$ 。 趋向于一个常数 $\delta = 4.669201$ 倍周期分岔中的标度行为按以下的几何级数(幂函数)收敛到 $\lambda_m: \lambda_m - \lambda_m = A\delta^{-m}$ , A是依赖于迭代函数的常

混沌的特征: 内随机性、分维性质、普适性和 Feigenbaum 常数

分数维 3.几何结构完全不随迭代方程的参数的变化而连续地变化,运动轨迹永远不自我重复,即具有非周期性。

Rössler 吸引子:  $\frac{dx}{dt} = -y - z$   $\frac{dy}{dt} = x + ay$   $\frac{dz}{dt} = b + z(x - c)$ 

物理系统中的吸引子: 双摆、蔡氏电路、杜芬振子、Gumowski-Mira model

落叶效应: 当雷诺数达到 1000 时, 树叶下坠形成混沌运动, 并出现了卡尔曼涡街

Lyapunov(李雅普诺夫)指数: 用来表示初值敏感性是否出现以及敏感的程度。经过迭代,原先很接近的状态之间的 其中 $\varphi$ 是自旋矢量和x轴的夹角。正方格子上的两维模型,对于所有 T > 0 的温度,磁化强度 M = 0 ,但在某一温度 $^{2}$  ( $dx_{0}$ ,  $dx_{1}$ ,  $dx_{2}$ , ...)可能变得很大。 $dx_{n} = dx_{0}e^{n\lambda'}$ 。Lyapunov 指数 $\lambda' = \lim_{n \to \infty} \frac{\ln(dx_{n}/dx_{0})}{n}$  衡量系统动力学特性的一个

至T~0,即改变 Boltzmann 分布中的指数值β = 1/k<sub>B</sub>T时步长间距要大,在每个温度值下按照上述的 Metropolis Julia 集: Z<sub>n+1</sub> = Z<sub>n</sub><sup>2</sup> + C(C = 0: 0和∞是吸引子,单位圆周上的点组成 Julia 集)多次迭代后的点 Z<sub>n</sub>不趋于某固定 实际模拟:距离函数:  $D=x^2+y^2$ ; 每次迭代都计算距离 D,如某初始点 $Z_0(x_0,y_0)$ ,经过 $n_0$ 次迭代( $n_0$ 为设置的迭

代上限)后仍有 $D < D_0$  ( $D_0$ )为设定的逃离的边界),表示点未逃离,就可以认为此 $Z_0(x_0, y_0)$ 属于 Julia 集,在平面上 Sierpinski 三角毯:Sierpin (Angle 60; 角度增量是 60° Axiom FXF-FF-FF; 初始图形是一个三角形, X 是替换中的中间 可对每一个 $Z_0$ , 计算逃离  $D > D_0$ 所需迭代的次数, 按逃离所需迭代的次数n的不同, 对起始迭代点 $Z_0$ 进行分类, 分别给 Z。不同的灰度或颜色,就可以得到灰度或彩色图案。

M集的特性: 自相似性、M集概括了所有的J集,是J集的缩微字典

广义 J 集,广义 M 集:  $Z_{n+1} = Z_n^m + C(m = 3,4,...)$ 

拓扑维数: 欧几里得空间的维数与拓扑维数相等

Hausdorff 维数:  $D = \ln N(\varepsilon) / \ln(1/\varepsilon)$  定是测量单元的尺寸,  $N(\varepsilon)$ 是测度得到的规则图形的测量单元数。

Cantor  $\&: D = \ln 2 / \ln 3 = 0.631$ 

Cantor 集性质: 自相似性、无穷操作或迭代过程、精细结构、传统几何陷入危机、长度为 0、简单与复杂的统一 分形维数均大于拓扑维数: Koch 曲线: D = ln 4 / ln 3 = 1.262; Levy 曲线: D = 2; Sierpinski 三角毯: D = ln 3 / ln 2 = 1.585; Sierpinski 正方稜;  $D = \ln 8 / \ln 3 = 1.893$ ; Vicsek 图形;  $D = \ln 5 / \ln 3 = 1.465$ ; Sierpinski-Menger 海绵; =

<mark>分形的特点:</mark> 图形是"支离破碎的",从数学上看它处处是奇点,如处处不连续或处处不可微; 分形具有标度不变 模拟退火法: 同时模拟不同温度下的系统,在模拟步骤中途交换这些系统的温度,因此可以将低温下冻结的状态 性,即改变尺度或标度时,图形是相同的或相似的; 分形的豪斯道夫维数一般是分数(不排斥是整数),并且大于拓

粗糙曲线的圆规维数: 用半径尺寸为1的圆规从上端开始作圆弧和海岸线相交,其交点为下一个圆弧的中心,这

Wolff 算法(自旋块翻转):1.随机选择一个自旋为自旋块生长的种子,检查它的某近邻自旋是否取向相同;2.如相样得到海岸线的总长度为N(用长度为1的尺去丈量,得到N),减小尺寸为s后丈量,得到更大的N(s)。如果作

比。 $P \propto A^{0.5}$ 。二维不规则分形图形。  $\frac{\log(P(\varepsilon)/\varepsilon)}{D} = \log a_0 + \log \frac{A(\varepsilon)^{0.5}}{\varepsilon} (D > 1$ 周长光滑时 D = 1), $a_0$ 和形状有关, $\varepsilon$ 

表面积-体积关系求分维:  $\frac{\log A(\varepsilon)/\varepsilon^2}{D} = \log a_0 + \log \frac{V(\varepsilon)^{1/3}}{\varepsilon}$ 

Edwards-Anderson 模型: $H = -\sum_{(l,j)} J_{lj} \sigma_l \sigma_j$   $\langle J_{lj} \rangle = 0$   $\langle J_{lj}^2 \rangle = J^2$   $P(J_{lj}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi l^2}} \exp\left\{-\frac{J_{lj}^2}{2l^2}\right\}$  或 $P(J_{lj}) = p_+ \delta(J_{lj} - J) + N(1/8) = 60$ 。 为了减少误差,应该使不同尺寸的网格能覆盖相同大小的图形,如 512×512 象素的图形的  $\epsilon$ 应当是 1, 1/2, 1/4, ...直到降到 1/512。作  $\ln N(\varepsilon) \sim \ln \varepsilon$ 图,  $N \sim (1/\varepsilon^D)$ 

> Sandbox 法: 把一个分形生长到不同阶段得到的图形进行分维计算,是将一系列尺寸(r>1)不断增大的方框 (也可以是圆)覆盖到分形图形上,计数不同方框(或圆)中象素数 $N: N \sim r^D$ 。适合用于单个生长图形。对单中

面积-回转半径法: 把所有分形看成大大小小先后生成的图形 $N \sim R_a^D \rightarrow \ln N \propto D \ln R_a$ 

已知分形中心或质心时:  $R_a^2 = \sum r_i^2/N$  (i = 1, 2, 3, ..., N)无明确中心或质心时:  $R_a^2 = \sum (r_i - r_i)^2/[2N(N - r_i)^2]$ 1)] (i,j = 1,2,3,...,N)对包含许多团簇的图形,用面积-回转半径法能得到更准确一些的分维(比从中选出几个典 变换法: (1)固定矩形宽度R,, 矩形高度由最高和最低点的高度差决定, 一步一步移动矩形,遍及所有象素点(矩形高 度有变化),将每一象素点处矩形的面积相加,得到总面积 $S(R_i) = \sum_{j=1}^{N-R_i} S_j(R_i), N(R_i) = S(R_i)/R_i^2$ (2)改变矩形宽度  $R_i$ 的大小,重复以上操作;(3)由 $S(R_i)$ 求 $N(R_i)$ :覆盖一部分粗糙曲线所需的面积为 $R^2$ 的盒子数,不过它一般不是整

变换法计算粗糙曲面的分维计算。(I)此时测量用的矩形被正方柱代替,正方柱的底面取为 $1 \times 1, 3 \times 3, ..., R \times R$ 。 正方柱的高度由正方柱范围内粗糙曲面的最高、低点高度差决定,一步一步移动正方柱遍及所有点,将所有正方 柱的体积加起来得到总体积 $V(R_i)$ 。(2)改变 $R_i$ 的大小后重复以上操作,得到一系列体积。(3)计算N(R):  $N(R_i)$  =  $V(R_i)/R_i^3$ ,  $N(R_i)$ 实际上是覆盖一部分粗糙曲面所需的体积为 $R_i^3$ 的盒子数(4)作 $\ln N(R_i) \sim \ln(1/R_i)$ 曲线,求线性部 分斜率 D。

密度-密度相关函数法:  $C(r) = \langle \frac{\sum \rho(r')\rho(r'+r)}{r} \rangle \sim r^{-\alpha}$ 

Li-Yorke 定理: 对闭区间 I 上的连续函数 f(x),如果存在一个周期为 3 的周期点时,就一定存在任何正整数的周期 ρ(r')是图形的密度函数,有图形象素处为 1,无图形处为 0;N 是总象素数:C(r)的几何意义是: 原始图形和平移 r 后的图形重叠部分的象素数和全部象素数的比值,即在相距 r 处发现另一象素的概率; 对于有限的图形, C(r) 随 r 的增大而减小。除了对 N 个不同的 r'求平均之外,还对不同方向、长度相同的 r 求平均

特例,固定r', 并把它取为图形的中心, 即r'=0, 此时 $C(r)=\langle \rho(0)\rho(r)\rangle$ 。表示重心为圆心、r为半径的圆周各点上 发现另一图形象素的概率。由于分形具有自相似性,可以将C(r)表示为幂函数 $C(r)\sim r^{-\alpha}$ 。C(r)在回转半径R内积 数,δ是不依赖于迭代函数的普适常数。倍周期分岔的图上作 $\mathbf{x}=0.5$ 的直线和放大的分岔曲线相交,得到分岔纵 分,在 $\mathbf{R}$ 足够大时,积分值很接近于和图形总象素数 $\mathbf{N}$ 成正比,即 $\int_{\mathbf{c}}^{\mathbf{R}} C(\mathbf{r}) d^d \mathbf{r} \propto \mathbf{N} \to \mathbf{N} \propto \mathbf{R}^{\mathbf{d} - \mathbf{\alpha}} \to \mathbf{D} = \mathbf{d} - \mathbf{\alpha}$ 。D是 分形维数, d 是欧氏空间维数。

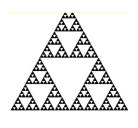
标度不变性: 标度(测量尺度)改变了λ倍后, 函数具有自相似性或标度不变性

数。R愈大,N(R)越小; (4)做 $\ln N(R) - \ln(1/R)$ 双对数图 $N(R) \sim R^{-D} \ln N(R) \sim \ln(1/R)$ 

 $\mathbf{L}$  系统:  $\mathbf{L}$  系统由三部分(V,  $\omega$ , P)组成。V: 模拟事物的最基本结构或初始结构。 $\omega$ : 公理, 迭代过程中遵循的一些基

实际操作: 1、用各种字符串符号表示 L 系统的基本结构V, 公理ω和迭代规则P。2、按一定的规则和公理, 进行多 次迭代并画图。迭代过程就是字符串重写(或替换)过程,多次迭代后将产生一个较长的命令串,然后可根据预先规定

符号	图形解释
F	从当前位置向前走一步,同时画线
G	从当前位置向前走一步,但不画线
+	从当前方向向左转一个给定的角度
-	从当前方向向右转一个给定的角度
- 1	原地转180°
1	将当前状态压进栈 (当前状态存储起来)
1	将图形状态重置为栈项的状态,并去掉该栈中的内容 (执行完[]内的指令后,画笔回到[前位置,并保持原 先的方向不变)



画出 $(x_0,y_0)$ 点,若还未达到 $n_0$  次迭代,已经有 $D>D_0$ ,则点 $Z_0$ 不属于该 Julia 集, $(x_0,y_0)$ 点不画出。彩色 Julia 集:变量,在作图形解释时跳过它,不做任何操作 F=FF;替换规则 1 是将每一线段分为两段 X=-FXF++FXF++FXF-; 替换规则 2 是将中间变量 X 变成一个三角形 1:结束

选代函数系统(IFS): 采用确定性算法与随机性算法相结合。"确定性": 用以迭代的规则是确定性的,它们由一组仿 Manderlbrot 集: 给定 Z0 后,在复参数 C 填充的平面上,对参数 C 进行分类得到的图形。通常取Z<sub>0</sub> = 0进行迭代; 射变换(如R<sub>1</sub>,R<sub>2</sub>,R<sub>3</sub>等等)构成;"随机性": 每一次迭代用哪一个规则(即选 Ri 中哪一个),不是预先定好的,而是 而在一维 XY 模型中可以出现孤立子或孤立波激发,一维链上的自旋发生  $2\pi$  的扭转,在反铁磁情况下这种扭转有参数C变化, $Z_0$ 不变。对每个C(C=a+ib),以 $Z_0$ 开始,连续计算 $Z_n$ :如果在 $n\to\infty$ 时, $|Z_n|\to\infty$ ,则该 C(a,b)点 随机的。每个迭代规则 Ri 都是一个仿射变换。设最终要生成的图形为 M,它要满足下述几何方程:  $M=R_1$  U  $R_2$  U

设平面上有面积区域为D, 经仿射变换后变成D', 则D与D'的面积(S)关系为: $S(D') = |det(A)| \cdot S(D)$ .

 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \tan \alpha \\ \tan \alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & 0 \\ 0 & l_2 \end{pmatrix}$ ,分别是旋转,扭曲,拉伸

自仿射性是自相似性的一种拓展和延伸。自相似性可看成是局部到整体在各个方向上的等比例变换的结果。自仿 射性可看作局部到整体在不同方向上进行不等比例变换的结果。自相似性变换是自仿射性变换的特例。

图形压缩率:  $|\det(A)|$ 。 $P_i = |\det A_i|/\sum_{i=1}^{N} |\det A_i|$  若某个  $|\det(A)| = 0$ ,则实际操作时可把该 $p_i$ 设成一个较小的整 数,如 0.00001。

维上演化的动力学系统。

Wolfram 一维元胞自动机: 一维情况,设演化规则的半径为r,则包括自身共有2r+1个近邻;每个位置可能有的 状态为k,则2r+1个邻座可以取 $k^{2r+1}$ 种状态排列;对于每种排列,下一个时刻可以取k个不同的值,因此一共有  $k^{k^{2r+1}}$ 个不同的元胞自动机。

r = 1, k = 2的 256 种元胞自动机的编码规则: 第一行是对相邻状态的编号(从 0 到 7 共 8 种); 第二行中每种相邻 状态编号对应的三个二进位数 $S_{l-1},S_l,S_{l+1}$ 的值,第三行的八个二进位数换算成十进位数 90(第四行), 就得到这 **条规则的编码。** 

-维元胞自动机的长期行为: ①演化到全部是 0 或全部是 1 的均匀状态(0,4,16,32,36,48,54,60,62); ② 演化到不随时间变化的定态或周期性的循环状态(8, 24, 40, 56, 58); ③演化到混沌状态,具有初值敏感性(2, 6, 10, 12, 14, 18, 22, 26, 28, 30, 34, 38, 42, 44, 46, 50); ④演化到更复杂的结构, 具有局部结构的复杂 模式处于"秩序"与"混沌"之间,被称之为混沌的边缘(20,52)。

边界条件: 1.周期型: 一维空间首尾相接。二维空间上下相接左右相接 2.反射型: 边界外邻居的元胞状态是以边界为 轴的镜面反射。3.定值型: 所有边界外元胞均取某一固定常量,如0,1等。

这三种边界类型在实际应用中,可以相互结合。有时在应用中,为更加客观、自然地模拟实际现象,还有可能采 用随机型,即在边界实时产生随机值。

元胞自动机的主要特征: 空间是离散的、时间是离散的、状态取值是离散的、演化的运算规则是局域的。

盒计数法: 将尺寸分别为 s = 1/4,1/8 的网格覆盖在分形图形上,计数网格有像素的方格数目,例如得到 N(1/4)=16 和二维元胞自动机:常用邻居定义: 冯·诺依曼(Von. Neumann)型: 周围四个:摩尔(Moore)型: 周围八个:扩展的摩尔 (Moore)型: 比 Moore 型再大一圈;



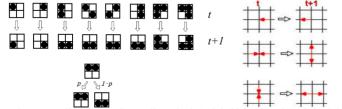
表决与退火模型: 网格: 正方形网格; 初始状态: 网格上随机分布一些白点和黑点; 邻居: Moore 型邻居; 生长规则 1: 多数决定规则,即 ≥5 • 得 •, ≥5○得○; 模拟结果: 形成了一 些相当细碎的畴域; 生长规则 2: 少数决定规则, 即≥5 个●得○, ≥5 个○得●;模拟结果: 黑 白边界的棱角和曲折抹平了许多,黑白的畴界融合起来,成为更大的畴域,这很像是退 火过程,产生了表面张力引起的效果。

Q2 规则—Ising 自旋动力学模型: 网格: 二维正方网格,每个格点有自旋 S=1 or 0;邻居: Von Neumann 邻居:物理依据:自旋对 $(s_i, s_i)$ 的耦合能量—相同自旋排列能量较低(设为-I), 相反自旋排列能量较高(设为I):演化规则:要求保持局部能量守恒,即只有当自旋向上的邻 居数和自旋向下的邻居数相同时,自旋 $s_i$ 才翻转,在t+1时刻变成 $1-s_i$ 。因为自旋的这 种变化没有引起任何能量交换。上述判定某格点自旋翻转与否是基于邻居不变化的假

马哥勒斯 (Margolus)型

定,如果邻居也翻转(因为它们遵循相同的规则),那么能量将不守恒。解决这个问题的方法是:把网格划分为奇数子 (2)动量有序度参数: Boltzman H 函数 $H=\frac{1}{3}(H_x+H_y+H_z)$  where  $H_x=(\ln f(v_x))=1$ 定,如果邻店也翻转(因为它们理解相呼四次规则为证公比黑内工学员。 新公根据偶数子格上自旋的构形,翻转奇数子  $\sum_{\Delta v_x} f(v_x) \ln f(v_x) \Delta v_x, f(v_x) \Delta v_x = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{N} \delta(v_x - v_{xl}) \Delta v_x$ 格上的自旋; 然后再根据奇数子格上自旋的构形, 翻转偶数子格上的自旋。

格工的目录:然后再根据可数于格工目录的构形,翻转函数于格工的目录。 格子气自动机(HPP 模型):目的:模拟流体粒子的运动;网格,二维正方网格·邻居:Margolus 型邻居·限定条件:指 结果统计:相对压力或压缩率 $Z = \frac{PV}{NKT} = 1 + \frac{1}{4NKT} (\sum_{i < f} r_{ij} \cdot F_{ij}) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT} \sum_{c=1}^{Nc} m \Delta v_{ij}(t_c) \cdot r_{ij}(t_c) = 1 + \frac{1}{3NKT$ 定运动方向进入指定格位的粒子数为 1。 t 时刻格位信息  $s(\mathbf{r},t)$  中包括 4 位数,如  $s(\mathbf{r},t)=(1011)$  表示有 3 个粒子分别  $\frac{m\sigma}{2}\sum_{\ell=1}^{Nc}|\Delta v_{ij}(t_{\ell})|$  第二个等号代入了 $\mathbf{F}_{ij}=m\mathbf{a}_{ij}=m\frac{\Delta v_{ij}}{\Delta t}$  第三个等号代入了 $\mathbf{F}_{ij}(t_{\ell})=\sigma$ 沿 1.3 和 4 方向进入该格位。可以按照能量与动量守恒来制定相应规则。粒子相互作用的特性:碰撞过程满足动由此可以求出由于相互作用势的引入带来的非理想气体的压力,它是分子模拟中进行统计分析和待求的主要结 量守恒和粒子数守恒定律;交互作用的微观性质:时间逆转过程中的不变性。HPP 模型采用正衬底,不能模拟各向 同性。FHP模型:三角型网格,可模拟出各向同性现象。



Langton 蚂蚁规则:自扮:模拟蚂蚁运动;网络:正为网络无胞为自色或黑色:创始条件:列有无胞都是自己,蚂蚁集甲在图中间;规则:① 白色元胞中,蚂蚁向左转 90 度:② 黑色元胞中,蚂蚁向右转 90 度:③ 蚂蚁的力进入下一个元胞时,原坐标前进一步x(t+τ),并计算速度ν(t+τ);(3)计算体系的瞬时温度、动能、势能和总能(4)计算监控体系是否趋于中间;规则:① 白色元胞中,蚂蚁向右转 90 度:③ 蚂蚁的动力。一个元胞时,原坐标前进一步x(t+τ),并计算速度ν(t+τ);(3)计算体系的瞬时温度、动能、势能和总能(4)计算监控体系是否趋于中间;统则: (5)将周期性边界条件应用于每一个在Δt后离开元胞的粒子空 来的元胞颜色反转(原来白色的变为黑色,原来黑色的变为白色);④每个元胞可以被不同数量的蚂蚁占据。多蚂蚁 情况:格位的颜色依据蚂蚁存在的数目进行修改:原来白色的:有1个或3个蚂蚁变为黑色,有2个或4个蚂蚁保持白 入新的混沌运动,或公路沿其他方向迁移。

1变为0)、或者是空地(结点值为0)。演化规则:下一个时刻(1)正在燃烧的树变成空格位;(2)如果绿树格位的最更标定因子),对平衡态,体系状态不受扰动;对亚温态,热力学量会有大变化。 近邻居中有一个树在燃烧,则它变成正在燃烧的树;(3)以概率 p 随机选取一个结点-如果它为空地-则长出一棵树; (4)没有最近邻为着火状态的树以概率 f 被点燃。整数型森林火灾模型:结点的值可以是大于 1 的整数,表示该结 点树木的质量。m:火灾损失(火灾面积或火灾烧掉的树木总质量)N:为森林中质量为 m 的树丛的个数。N 与 m 成幂

管虫礁模型: 模型中用●代表管虫的活动状态, ○代表管虫的藏匿状态。设当一只管虫的邻域内活动的邻居多到 n 个,它所受到的刺激足以使它藏匿起来。模拟时用计时器计算藏匿起来的管虫何时该出来,并且采用平面0和平 面 1 两块板,前者作为管虫的栖息地,后者是各处管虫的计时器。计时器所取数值决定于管虫的藏匿时间,以计 时器取 0, 1, 2, 3 四个值为例,对于活动的管虫计时器的状态为 0,一旦它的活动邻居数达到 n 个,计时器跳到 3,发出警告。下一步管虫缩回管内,计时器退到 2,然后逐步倒数,经 1至 0。下一步管虫就重新钻出来了,计 致,保持了动能守恒或温度一定,这样,微正则系综过渡到正则系综。 时器保持读数为0,直到再次受到足够强烈的刺激为止。

Born-Oppenheimer 近似: 由于(Mn>>me, vn<<ve), 电子的运动和原子核的运动可以相互分离。

分子动力学:只考虑核的运动(其动力学方程由牛顿方程近似),电子的贡献由原子间的相互作用势能来描述。 局域电子密度泛函理论: 只考虑电子的动力学问题。

子或更大的粒子的集合。

MD 模拟目的:1. 计算体系状态(由 N 个粒子的位置 n、动量 pi 或速度 vi 标志) 随时间的演化;2.模拟与粒子运动路径 理论双精度浮点计算能力(峰值)=处理器主频×处理器每个时钟周期执行双精度浮点计算 相关的基本过程或粒子在相空间中的轨迹;3.进而计算感兴趣的物理量的值 Q;4.MD 是微观过程与宏观性质的桥梁。 MD 模拟方法: 分子动力学是在原子、分子水平上,用数值方法,求解经典牛顿运动方程(微分方程),模拟体系状 近几年 CPU 在主频方面无大提升,主要向多核发展。 态相空间演化轨迹,是一种经典力学方法。

硬球的势能:
$$u(r) = \begin{cases} \infty, & r \le \sigma \\ 0, & r > \sigma \end{cases}$$
  $F(r) = \begin{cases} \infty, & r \le \sigma \\ 0, & r > \sigma \end{cases}$ 

**硬球碰撞遵循的基本规律(1)碰撞**是弹性的;粒子间的能量转移是改变粒子的动能,而不是用于球体的形变或内部自 由度; (2)总动能守恒;(3)总动量守恒;

两等质量、等直径硬球的一维运动:一维运动下,等质量的粒子碰撞后只交换速度,因此粒子的初始速度分布不 变;不管模拟时间多长也不能达到各态历经性;其计算得到的平衡态性质不对,除非大量粒子的初始速度是由 Maxwell 分布中得到。

两等质量硬球的二维或三维运动: 二维、三维或高维下,每次碰撞时的 r12 方向(两球的连线方向)的速度分量可发 生变化; 多次碰撞后可以达到各态历经性; 最终, 粒子速度分布可取得合理的平衡分布。

周期性边界条件:实际上只能对给定密度下的有限的粒子数目 N 即有限面积或体积作计算;为了减少有限面积/体 只是空间位置不同当 j 球和其镜像球 j'与 i 球的碰撞都满足碰撞条件时, 选碰撞时间最短的与镜像球 j'的碰撞等同 于与 ; 球的碰撞, 碰撞后 ; 球也同样改变方向

便球碰撞的模拟步骤: I、初始化(1) 给定粒子数 N 、密度ρ或堆积分数η; 设模拟空间是边长为 L 的立方体,粒子 直径为σ (2) 热能 KT 作为能量单位,将时间和速度约化(3)给定初始位置坐标 {ri (0), i=1,...N}由于硬球是不能互相 重叠,因此采用随机方法选取其空间坐标将是极为耗时的,除非密度非常小。通常按规则晶格排布,如对单原子 分子的模拟,常以面心立方开始;也可用上次不同条件模拟得到的结果为初始位置(4)给定初始速度{vi(0)。

应热运动能:要保证总动量为零。方法是将每个粒子的动量求和并除以粒子数,得到平均总动量,再将每个粒子 的动量减去此平均总动量(5) 构造 N(N-1) /2 个球对的碰撞时间列表 II、动力学模拟至平衡态(1)从碰撞时间表中找 最小值,决定距离下一次碰撞的时间差 $\Delta t$ 、以及碰撞球对 (i,j); (2)将所有粒子的坐标前进一步: (3)将周期性边界 条件运用于每一个在 $\Delta t$ 后离开原胞的粒子,求其在元胞中的空间位置;(4)计算碰撞粒子对的新速度矢量;(5)更新 条件运用了每一个在2亿高河 原胞的粒子,来共在几胞中的空间位置;(4)计算 酸强粒子对的新速及大量;(5)更新 在ALL MPI\_COMM\_RANK(MPI\_COMM\_WORLD, MYID, IERR) 碰撞时间列表 [含 N(N-1)/2 个球对];(6)监控位置和动量有序度参数,判断是否达到平衡(7)对上面(1)-(6)步骤执行循 [F (MYID == 0) THEN \n 0 号进程运行的程序段 环,直到达到平衡。

平衡态判断:在相空间中看体系趋于平衡的过程,就是使轨迹从任意给定的初始点,运动到最可能的区域一平衡态 ENDIF 区域的过程,为了监控这个趋于平衡的过程,需要用两个参数,分别用于跟踪原子位置无序度的变化以及速度的 程序相同部分在不同进程中变量值不一样: Maxwell 分布的演化;对于从晶格起始的模拟,可采用平移序参数作为位置参数;对于速度分布的演化,通常用-个数即 Boltzmann H 函数来表征。

(1)位置有序度参数:Verlet 平移序参数 (面心立方晶格) $\lambda = \frac{1}{2}(\lambda_x + \lambda_y + \lambda_z)$  where  $\lambda_x = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\cos(4\pi\frac{x_i}{x_i})$ 

果。硬球体系在高密度下呈现固态,有长程有序,自扩散系数很小。而在低密度下为流体特征(液态),即格子会融 \*\*\*argv) 解,体系无长程有序,扩散系数值有适当大小。在中间的相变区域,体系处于亚稳态,在固相和液相之间变动, 沙堆规则:目的:模拟像沙一样的颗粒的基本堆积和倒塌现象;邻居: Margolus 型邻居(2x2 的元胞块做统一处理) 亚稳态的寿命与尺度 N 的大小有关。无吸引势相互作用的体系中的固化是由于不可形变的物体堆积在较小的空间 造成的几何结果。该硬球体系不能描述气-液相变。

软球的势能、势能的截断。解牛顿运动方程: (1)力的计算 $\mathbf{F}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{f}_{ij}$   $\mathbf{f}_{ij} = -\frac{du(r_{ij})}{dr_{ij}} = -\frac{du(r_{ij})}{dr_{ij}} r_{ij}$  (2) 列表技术 MPI\_Send: 发送 buf 缓冲区中的 count  $\uparrow$  datatype 数据类型的数据发送到 dest 目的进程,且带有 tag 标记 int (用列表技术减少计算力 Fi 需要的时间) (a)元胞列表法: 计算量与 N 成正比,实际计算时并不需要考虑与其他 N. I MPI\_Send(void\* buf, int count, MPI\_Datatype datatype, int dest, int tag, MPI\_Comm comm) 个粒子的相互作用,只需要考虑一定范围内的粒子体系空间分成若干尺度等于或稍大于 r c (势能的截断半径)的元 MPI\_Recv: 从指定的 source 进程接收带有 tag 标记消息,按 datatype 数据类型存到 buf 缓冲区,收到的消息所包含 版,给定元脑中的一个粒子(红)只与相同元脑和近邻元脑中的粒子发生相互作用。(b)最小映像判据(c)Verlet 列表法的数据元素的个数最多不能超过 count。int MPI\_Recv( void\* buf, int count, MPI\_Datatype datatype, int source, int tag, MPI\_Comm comm, MPI\_Status \*status ) (d)Bekker 法—周期性边界条件下的 verlet 列表法(3)位置和速度的计算

模拟步骤: (1) 初始化给出系统的状态参数:粒子数 N、密度ρ、截断半径 rc,温度 T(正则系综),元胞边长 (L>2rc)。软球的初始位置{ri(0), i=1,...N}:固定格子坐标、或随机偏离固定格子、或完全随机分布(因软球可互相重 叠)。软球的初始速度{vi (0), i=1,...N}:速度大小和分布无关紧要,可以是[-1, 1]区间的均匀分布或 Maxwell 分布中随 机选取;保证总动量为零。构造 verlet 或元胞列表(2)动力学模拟至平衡态(1)根据列表技术,求出每个粒子受到的作用 Langton 蚂蚁规则:目的:模拟蚂蚁运动:网格:正方网格.元胞为白色或黑色:初始条件:所有元胞都是白色,蚂蚁集中在图 加克克里。 Fx(t)、Fy(t)、Fz(t): (2)增加时间步长下,根据运动方程的 Verlet 算法或其它算法将所有粒子的 间; (6)更新列表(verlet 列表或元胞列表); (7)对上面(1)-(6)步骤执行循环,直到体系达到平衡态。(3)结果统计 平衡态判据(1) 因总能量恒定,则动能和势能的涨落的关系 $\Delta k = -\Delta U(2)$  每个速度分量都满足 Boltzmann 分布,各 

> <sup>'</sup>碰撞失稳性: 解经典力学的确定性方程时,由于: 算法的误差,如截断误差;浮点数精度的舍入误差;初始值的任意 小的不确定性,导致轨迹发生极大变化。确定性运动方程可能产生随机性运动轨迹。但只要保证总能量守恒,这 些轨迹都可以对相空间中的允许运动区域进行随机性抽样,保证长时间平均结果不变。分子动力学模拟中,只要 保证各态历经性,长时间的计算时间步下,轨迹基本上是随机性的对相空间进行抽样,这时的统计预测是足够 好。分子动力学模拟的目标并不仅仅是预测一个已知初始条件的体系将会发生什么,或知道相空间中的代表点的 轨迹。而是对其平衡态的统计平均也很感兴趣。因此碰撞失稳性对分子动力学模拟结果来说,问题不是很严重。 等温分子动力学-约束方法: 微正则系综: 系统总能量(动能+势能)恒定 正则系综(更常用): 系统温度恒定 定义粒子的瞬时温度  $T^*$ 满足 $\frac{1}{2}d(N-1)k_BT^* = \frac{1}{2}\sum_i mv_i^2$ 则对速度进行修正 $v_i = v_i\sqrt{T/T^*}$  可使速度与指定温度-

均方位移判断体系固、液态: $(\Delta r^2(t)) = \frac{1}{12} \sum_{t=1}^{N} [r_t(t) - r_t(0)]^2$ 液态:与时间成正比:固态:常数。也可用平移序参数

径向分布函数判断晶态特征: $g(r) = \frac{1}{4\pi r^2 \rho_0 N} \langle \sum_{i \neq j} \delta(r - r_{ij}) \rangle$ 

MD 研究对象:大量粒子(N个)集合体系(固体、气体、液体);粒子的最小结构单元是原子而不是电子,也可以是分 Monte Carlo 算法的缺点:对于基础风险因素仍然有一定的假设,存在一定的模型风险、如产生的数据序列是伪随机 数,可能导致错误结果、计算量很大,且准确性的提高速度较慢

摩尔定律: 当价格不变时,集成电路上可容纳的晶体管数目,约每隔 18 个月便会增加一倍,性能也将提升一倍。

国产 CPU 问题:国内工艺不够,部分受美国限制,即使设计出来,也无法生产:性能有些还不错,但应用生态(兼

容性、效率等)短时间内跟不上。 高性能计算:High Performance Computing, HPC.超级计算:Supercomputing 并行计:Parallel Computing

通常指使用很多处理器(作为单个机器的一部分)或某一集群中组织的几台计算机(作为单个计算资源操作)的计算

影响高性能计算性能的主要因素:1.硬件: CPU: 主频、并发数、Cache;内存: 主频、CL 延迟(CAS Latency, 内 存存取数据所需的时间)、容量 IO 能力:缓存、转速、接口速率网络:带宽、延迟 2.软件:编译器、数值函数 库、并行库 3.设置: 硬件、操作系统、软件

超算系统 CPU 特点:1.单核 CPU 性能并不高:串行程序运行速度主要依赖于 CPU 主频:单个串行程序速度不会提高, 有可能比自己的计算机运行还慢 2.超算系统 CPU 核数非常多

<del>‡行计算:</del> 可以加快速度、可以加大规模,更加宏大或微小的尺度、完成单颗 CPU 无法完成的任务

享节点内内存节点之间分布式内存,CPU之间通过传递消息交换信息。

<del>1.行化分解方法:1.任务分解:多任务并发执行 2.功能分解:分解被执行的计算 3.区域分解:分解被执行的数据</del> MPI(Message Passing Interface)是一种消息传递接口标准,并不是一种编程语言。实际上是一个消息传递函数库的标准 MPI\_WAITALL(count, array\_of\_requests, array\_of\_statuses): 等待所有检测的通信都完成 说明,以语言独立的形式来定义这个接口库,并提供了与 C/C++和 Fortran 语言的绑定.

通讯因子定义了进程组内或组间通讯的上下文(具体就是指明通讯链路的数据结构指针).MPI 通过指定通信因子 和组来对进程进行一种逻辑上的划分,MPI COMM WORLD 通信因子在 MPI 环境初始化过程中创建。

i=0,1...N ]速度值分布无关紧要,可以取 [-1, 1] 区间的均匀分布,或 Maxwell 分布中随机选取;但其平均速度应对 在一个通信因子中,每个进程都有一个唯一的整数标识符,称作"进程号"进程号是从 0 开始的连续整数,编号 为:0~进程数-1.

> MPI 消息包括信封和数据两部分。信封:指出了发送或接收消息的对象及相关信息,含: <源/目进程号,标识,通信域> 数据:是本消息将要传递的内容,含: <起始地址,数据个数,数据类型>

用讲程号可以控制程序的不同部分在不同的进程中并行运行

ELSE IF (MYID == 1) THEN \n 1 号进程运行的程序段

CALL MPI\_COMM\_RANK(MPI\_COMM\_WORLD, MYID, IERR) \n A=A+MYID

MPI 消息包括信封和数据两部分。信封:指出了发送或接收消息的对象及相关信息,含:《源/目进程号,标识,通信 MPI\_TEST\_CANCELLED(status, flag):探测通信是否已取消 域>数据:是本消息将要传递的内容,含: <起始地址,数据个数,数据类型>

MPI 函数的命名规则:函数名形式为 MPI\_Class\_action\_subset、 MPI\_Class\_action、 MPI\_Action\_subset 或 MPI Action

C语言:MPI 和第一个 后的首字符为大写,其余为小写:Fortran 语言: 函数名不区分大小写.Fortran 函数除了

MPI Wtime、MPI Wtick 外, 比 C 函数多一个参数 IERROR

在 MPI 标准中 MPI 函数采用语言独立的方式说明,参数用 IN、OUT 或 INOUT 标记:IN:变量为输入给函数的, 调用后其值不变;OUT: 变量不是输入给函数的,其值被函数调用后更新;INOUT: 变量既是输入给函数的,调用后 也会被更新

MPI\_Init: 初始化 MPI 环境,必须调用;首先调用;调用一次;每个进程都有一个参数表 int MPI\_Init( int \*argc, char

MPI\_Comm\_size: 返回与该组通信因子相关的进程数,存在 SIZE 变量中通讯因子必须是组内通讯因子 int MPI Comm size (MPI Comm comm, int \*size)

MPI\_Comm\_rank: 返回该进程在指定通信因子中的进程号(0~进程数-1),存在 RANK 变量中一个进程在不同通 信因子中的进程号可能不同 int MPI Comm rank( MPI Comm comm, int \*rank )

MPI\_Finalize: 结束 MPI 执行环境。该函数一旦被应用程序调用时,就不能调用 MPI 的其它例行函数(包括

MPI\_Init)必须保证在进程调用 MPI\_Finalize 之前完成与进程有关的所有通信 int MPI\_Finalize(void)

目的地(dest): 发送进程指定的接收该消息的目的进程, 也就是接收进程的进程号

原(source):接收进程指定的发送该消息的源进程,也就是发送进程的进程号如该值为 MPI ANY SOURCE表 示接收任意源进程发来的消息

标识符(tag):由程序员指定的为标识一个消息的唯一非负整数值(0-32767)发送操作和接收操作的标识符一定 要匹配。对于接收操作来说,如 tag 指定为 MPI\_ANY\_TAG 则可与任何发送操作的 tag 相匹配

通信因子(comm): 包含源与目的进程的一组上下文相关的进程集合。除非用户自己定义(创建)了新的通信因 子,否则一般使用系统预先定义的全局通信因子 MPI\_COMM\_WORLD

状态(status):对接收操作,包含接收消息的源进程(source)和标识符(tag)。在 C 程序中,是个包含三个成员 的结构体: status.MPI\_SOURCE: 发送数据的进程标识; status.MPI\_TAG: 发送数据使用的 tag 标识;

```
#include <stdio.h>
#include "mpi.h" //包含MPI头文件
main(int argc, char **argv)
   int NumProce MyID i i k
   MPI Status status:
    char msg[20];
   MPI_Init(&argc, &argv); //初始化MPI环境
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &NumProcs); //採取进程数, 存储在NumProcs中, 注意&
   MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &MyID); //获取进程号, 存储在MyID中
    if(MvID == 0){
       strcpy(msg,"Hello,World"); //下行向1号进程发送msg中strlen(msg)+1个字符串数据
       MPL_Send(msg, strlen(msg) + 1, MPL_CHAR, 1, 99, MPL_COMM_WORLD); ise if (MyID ==1) { //下行从0号进程接收20个字符串数据存储在msg中
    }else if(MyID ==1){
       MPI_Recv(msg, 20, MPI_CHAR, 0, 99, MPI_COMM_WORLD, &status);
       printf("Receive message = .%s\n".msg);
    MPI_Finalize(); //结束MPI环境
```

# 注意, 因为有些是变量地址, 某些变量前需要有&

缓存模式 MPI\_BSEND(buf, count, datatype, dest, tag, comm): 只要一可能, 消息就被发送。

同步模式 MPI\_SSEND(buf, count, datatype, dest, tag, comm): 发送者发一个"请求发送"的消息。接收者存储这个请 求。当一个匹配接收登入时,接收者发回一个"允许发送"的消息,这时接收者发送消息;

准备好模式 MPI\_RSEND(buf, count, datatype, dest, tag, comm): 发送者把消息拷贝到一个缓存, 然后以非阻塞方式发 送它(使用与标准发送同样的协议)

通过重叠通信和计算在许多系统能提高性能。当数据已被从发送缓存拷出时,发送完成调用返回

MPI\_ISEND(buf, count, datatype, dest, tag, comm, request): 标准模式

MPI\_IRECV(buf, count, datatype, source, tag, comm, request):接收,只有一种标准模式 MPI\_IBSEND(buf, count, datatype, dest, tag, comm, request): 缓存模式

MPI\_ISSEND(buf, count, datatype, dest, tag, comm, request): 同步模式

MPI\_IRSEND(buf, count, datatype, dest, tag, comm, request): 准备好模式

注: 多了个请求句柄(request 参数),在 C 语言中为 MPI\_Request 类型。

MPI WAIT(request, status): 等待检测的通信完成

MPI\_WAITANY(count, array\_of\_requests, index, status): 等待任意一个检测的通信完成

MPI\_WAITSOME(incount, array\_of\_requests, outcount, array\_of\_indices, array\_of\_statuses): 等待有些检测的通信完成

MPI TEST(request, flag, status): 测试检测的通信是否完成

MPI\_TESTANY(count, array\_of\_requests, index, ag, status): 测试是否任意一个检测的通信完成

MPI\_TESTALL(count, array\_of\_requests, ag, array\_of\_statuses): 测试是否所有要检测的通信都完成

MPI TESTSOME(incount, array of requests, outcount, array of indices, array of statuses): 測试是否有些检测的通信

MPI\_REQUEST\_GET\_STATUS(request, ag, status): 获取检测的通信的状态,与 WAIT 和 TEST 不同,并不释放句柄 MPI\_REQUEST\_FREE(request): 释放某个通信

WAIT 是要等待满足某个条件后完成, TEST 是检测以后即完成

MPI\_IPROBE(source, tag, comm, flag, status): 非阻塞探测进程 source 是否发标记为 tag 的消息来,状态存储在 flag MPI\_PROBE(source, tag, comm, status): 阻塞探测进程 source 是否发标记为 tag 的消息来

MPI\_CANCEL(request): 取消通信

坚持式通信请求: 当重复发送接收同样参数的信息时,可以利用下面坚持式通信方式得到更高的通信性能

MPI SEND\_INIT(buf, count, datatype, dest, tag, comm, request)

MPI\_BSEND\_INIT(buf, count, datatype, dest, tag, comm, request) MPI SSEND INIT(buf, count, datatype, dest, tag, comm, request)

MPI RSEND\_INIT(buf, count, datatype, dest, tag, comm, request)

MPI\_RECV\_INIT(buf, count, datatype, dest, tag, comm, request)

MPI\_START(request): 开始某个通信

MPI\_STARTALL(count, array\_of\_requests): 开始所有通信

MPI REQUEST FREE(request): 释放某个通信

## 发送接收和空讲程

MPI\_SENDRECV(sendbuf, sendcount, sendtype, dest, sendtag, recvbuf, recvcount, recvtype, source, recvtag, comm, status): 发送接收使用不同的缓冲区

MPI SENDRECV REPLACE(buf, count, datatype, dest, sendtag, source, recvtag,comm, status): 发送接收使用同样缓冲

MPI\_PROC\_NULL: 空进程(虚拟进程),对此进程的发送或接收立即返回,在某些情况下编程采用空进程会更

注意:目的地与源、数据个数、数据类型等都可以不一样,可以用普通的 MPI\_SEND 与 MPI\_RECV 来接收,只要 #pragma omp for [clause] ... ] new-line \n for-loops 匹配集合,没必要非也得用 MPI\_SEDNRECV 等

集合通信:所有组成员间的栅障同步(barrier synchronization)、一个成员到组内所有成员的广播(broadcast)通信 一个成员从所有组成员收集(gather)数据、一个成员向组内所有成员分散(scatter)数据、组内所有成员都接收 结果(allgather)、组内所有成员到所有成员间的分散收集数据操作(alltoall)、全局归约(global reduction)操 单执行结构指明相关代码只能有一个线程(并不必须是雇主线程,0号线程)执行,一般为先到的线程执行 作如求和(sum),求极大值(max),或用户自定义的操作,结、果返回给所有的组成员或仅返回给其中的一个 成员、组合归约(combined reduction)和分散操作、组内所有成员上的搜索(scan)操作(也称前置操作

注意:对所有集合通讯,每个进程都需要执行到这里才能执行,千万不要用进程号或其他方式限制到某个进程来 线程执行一次 执行, 也不需要再采用 MPI SEND 和 MPI RECV 等来发送接收, 否则会导致死锁

的缓冲区,在接收之后从连续缓冲区中解包。在多数情况下允许有一个派生数据类型不显式打包和解包,用户指 享结构具有并行性,而不需其它语句另行指明。允许一些并行结构和工作共享结构都允许的特定参数。如程序含 明要发送的和接收的数据的分布,通信库直接访问一个不连续的缓冲区。

MPI\_PACK(inbuf, incount, datatype, outbuf, outcount, position, comm): 打包

MPI UNPACK(inbuf, insize, position, outbuf, outcount, datatype, comm): 解包

MPI\_PACK\_SIZE(incount, datatype, comm, size): 获取打包数据占用空间的上界

的字节序列到另一个进程中。该打包单元这时可用任何接收操作使用任意数据类型来接收:类型匹配的规定对于 以 MPI\_PACKED 类型发送的消息不再起作用。以任何类型发送的消息(包括 MPI\_PACKED 类型)都可用 MPI PACKED 类型接收后被调用 MPI UNPACK 来解包。

通信子:将所有这些观点都封装起来以便为 MPI 中的所有操作提供适当的机会。通信子可分为两种:组内通信子 用于一组进程内的操作;组间通信子用于两组进程间的点对点通信。

缓冲区:通信子提供了一个缓冲机制允许人们将与 MPI 固有特征等价的新的属性联系到通信子上。高级用户可利 用这一机制进一步修饰通信子并通过 MPI 实现一些通信子函数。

组: 组定义了一个进程的有序集合,每一进程具有一个序列号,而且为组间进程通信定义低级名字也是由组完成 的。这样组在点对点通信中为进程名字定义了一个范围。另外组还定义了集合操作的范围。在 MPI 中可从通信子 中对组进行分别维护, 但是只有通信子才能用于通信操作。

上下文: 为 MPI 提供了拥有分离安全的消息传送空间的能力

拓扑是加在内部通信子上的额外、可选的属性,它不能被加在组间通信子上。对于一组进程(通信子内部),拓 扑能够提供一种方便的命名机制,另外,可以辅助运行时间系统,将进程映射到硬件上。MPI 中的进程组是 n 个 进程的集合,组中的每一进程被赋予一个从 0 到 n-1 的标识数。在许多并行应用程序中,进程的线性排列不能充分 <mark>原 子结构</mark>用于确保指明的存储区域对某项操作进行原子更新,而不使其暴露给多个同步进行写的线程,避免同 地反映进程间在逻辑上的通信模型(通常由基本问题几何和所用的数字算法所决定),进程经常被排列成二维或 时多个线程对这些变量进行更新 三维网格形式的拓扑模型,而且,通常用一个图来描述逻辑进程排列,我们指这种逻辑进程排列为"虚拟拓 扑"。在虚拟进程拓扑和底层的物理硬件拓扑之间有一个清晰的差别。进程分配到物理处理器上时,虚拟拓扑可 刷新结构指明对指定的变量执行内存刷新操作以保证线程此时看到这些变量在内存中的值一致 以由系统开发,假设这会帮助提高所给机器的通信性能,然而,这种映射是如何来完成的,已超出了 MPI 的范

围。另外,虚拟拓扑的描述仅依赖于应用,并且独立于机器。 MPI 环境管理:用于获取和在合适的地方设置相关于 MPI 实现及执行环境(例如错误处理)的不同参数的 例程。这里描述了用于进入和离开 MPI 执行环境的过程

MPI 派生数据类型:到此为止,所有的点对点通信只牵涉含有相同数据类型的相邻缓冲区,这对两种用户限制太 大。一种是经常想传送含有不同数据类型值的消息的用户;另一种是经常发送非连续数据的用户。一种解决的办 法是在发送端把非连续的数据打包到一个连续的缓冲区,在接收端再解包。这样做的缺点在于在两端都需要额外 的内存到内存拷贝操作,甚至当通信子系统具有收集分散数据功能的时候也是如此。而 MPI 提供说明更通用的, 混合的非连续通信缓冲区的机制。直到执行(implementation)时再决定数据应该在发送之前打包到连续缓冲中, 还是直接从数据存储区收集。这里提供的通用机制允许不需拷贝,而是直接传送各种形式和大小的目标。我们并 没有假设 MPI 库是用本地语言描述的连续目标。因此,如用户想要传送一个结构或一个数组部分,则需要向 MPI 中列出,对这些例外,在数据共享属性参数中允许列出一些预定义的变量,且将取代这些变量的预先定义数据 提供一个通信缓冲区的定义,该定义用问题模仿那个结构和数组部分的定义。这些工具可以用于使库设计者定义 能够传送用本地语言定义的目标的通信函数:通过对可获得的符号表或虚拟向量(dopevector)的定义解码即可。 这种高级通信功能不是 MPI 的部分。

MPI 动态进程管理:组间通信域、动态创建新的 MPI 进程、独立进程间的通信、基于 socket 的通信

MPI 并行 I/O:显式偏移的并行文件读写、多视口的并行文件并行读写、共享文件读写、分布式数组文件的存取

MPI 程序的主要因素为: 网络延迟、网络带宽。

并为一次等 2.改讲并行模型及算法,有时候比从所用函数等代码方面单纯优化程序对效率影响更大 OpenMP 是通过在源代码中添加一些 OpenMP 编译指令、调用 OpenMP 库函数来实现在共享内存的系统上并行运

OpenMP 格式: C/C++中利用 pragma 预处理指令做为 OpenMP 的指令,语法格式如下: #pragma omp directive-name [clause[ [,] clause]...] new-line

每个指令以#pragma omp 开始。指令其余部分按照 C/C++编译指令标准,并区分大小写。#之前和之后可有空白, 且有时必须用空白来分隔指令中的文字。#pragma omp 之后的预处理目标在编译时将被宏替换。每个 OpenMP 执行 default(shared | none) 指令必须应用于至少一个随后的语句,并且必须是一个结构块。每行只能有一个 OpenMP 指令。参数的位置无前 后之分,可重复。注:[]表示内部的参数是可选的

内在控制变量(ICV):內置的用于控制 OpenMP 程序行为的变量,如存储线程数、线程号等。影响并行块的内在 控制变量。dyn-var: 控制影响的并行区域是否允许动态调整线程数,每任务一个 ICV 副本 nest-var: 控制影响的并包括 数据复制参数 copyin(list):在执行 parallel 结构时,将主线程的线程私有变量的值复制给所有其它线程 行区域是否允许嵌套并行,每任务一个 ICV 副本 nthreads-var: 控制影响的并行区域的线程数,每任务一个 ICV 副 境

本 thread-limit-var: 控制程序最大允许参与的线程数,整个任务共用一个 ICV 副本 max-active-levels-var: 控制嵌套 线程嵌套的规则如下 1.工作共享区域: 可没被嵌套封闭在工作共享、显式 task、 critical、 ordered 或 master 区域 的激活的并行区域的最大数,整个任务共用一个 ICV 副本。影响循环区域操作的内在控制变量:run-sched-var:控 2.barrier 区域:可没被嵌套封闭在工作共享、显式 task、 critical、 ordered 或 master 区域 3.master 区域:可没被嵌 制循环区域的实时调度策略,每任务一个 ICV 副本 def-sched-var: 控制循环区域的默认实时调度策略,整个任务 套封闭在工作共享或显式 task 区域 4.ordered 区域: 可没被嵌套封闭在 critical 或显式 task 区域 5.ordered 区域: 必须 共用一个 ICV 副本。影响程序执行的内在控制变量: stacksize-var: 控制 OpenMP 实现产生的线程的堆栈(stack) 被嵌套封闭在具有 ordered 参数的循环区域或并行循环区域中 6.critical 区域:可没被嵌套(封闭或其它)在具有同 的大小,整个任务共用一个 ICV 副本 wait-policy-var: 控制等待线程的期望行为,整个任务共用一个 ICV 副本 样名字的 critical 区域中,此限制并不充分能防止一个死锁 并行结构:指明随后区域中的代码将并行执行,并且并行是可以嵌套的

#pragma omp parallel [clause[ [, ]clause] ...] new-line \n structured-block

作共享构造(Worksharing Constructs)会在执行到此结构的线程中分配与之相关区域的到各线程执行。线程会执行 omp\_destroy\_(nest\_)lock 分别销毁简单锁和嵌套锁 void omp\_destroy\_(nest\_)lock(omp\_nest\_lock\_t \*lock); 在每个正在执行任务的情况下隐含的部分区域。在每个工作共享构造的入口处无需进行同步,但在工作共享区域。omp\_set\_(nest\_)lock 分别设置简单锁和嵌套锁 void omp\_set\_nest\_lock(omp\_(nest\_)lock\_t \*lock); 的结束处,除非有 nowait 参数,否则默认会进行同步。如有 nowait,那么执行到此处时将会忽略此工作共享区域 omp\_unset\_(nest\_)lock 分别复位简单锁和嵌套锁 void omp\_unset\_(nest\_)lock(omp\_(nest\_)lock\_t \*lock); 的同步,早执行完此结构的线程会直接执行下面的指令而不需等待其它进程执行到此,也不需要进行刷新(flush)操作omp\_test\_(nest\_)lock 分别测试简单锁和嵌套锁,如存在则设置 int omp\_test\_(nest\_)lock(omp\_(nest\_)lock\_t \*lock); 限制: 1.工作共享区域必须为所有组内线程都执行到或都不执行到 2.一组内每个线程执行到工作共享区域和同步区 恭取计时器相关变量: 域的顺序必须一致

循环结构指明一个或多个与之相关的循环迭代将被一组线程执行

#pragma omp sections [clause[[,] clause] ...] new-line{[#pragma omp section new-line] \n structured-block \n [#pragma omp section new-line \n structured-block] \n

#pragma omp single [clause[[,] clause] ...] new-line \n structured-block

作共享结构(workshare Construct)指明相关的代码被分割成不同的单元以供不同线程执行,不同单元只能被某个

## C/C++: 不支持此 OpenMP 指令

<mark>数据的打包与解包</mark>:一些通信库为发送不连续数据提供打包解包函数,用户在发送前显式地把数据包装到一个连续 <mark>联合并行工作共享结构</mark>实际上是在并行结构中嵌套共享结构的一个快捷方式,这些指令将同时指明一个工作。共 MPI适合于广泛架构,但编程模型复杂;1.需要分析及划分应用程序问题,并将问题映射到分布式进程集合 2.需要 有对并行结构或工作共享结构具有不同行为的参数,那么其行为将不可预测。

并行循环结构指明一个或多个相关的循环迭代将被一组线程并行执行

#pragma omp parallel for [clause[[,] clause] ... ] new-line \n for-loops

并行分块结构指明与之相关的不同区域的代码将被不同线程并行执行

[#pragma omp section new-line \n structured-block ] \n ...}

<mark>并行工作共享结构</mark>指明相关的代码被分割成不同的单元以供不同线程并行执行,不同单元只能被某一线程执行一次 C/C++: 不支持此 OpenMP 指令

任务结构定义一个明确的任务

#pragma omp task [clause][,] clause] ...] new-line \n structured-block

雇主结构指明结构块需要雇主线程(主线程,0号线程)执行

#pragma omp master new-line \n structured-block

<mark>临界结构</mark>指明结构块在同一时间只能有一个线程执行,一个线程执行完毕,其它线程才能执行该处代码

#pragma omp critical [(name)] new-line \n structured-block

栅栏结构指明在此处有一个栅栏,需进行显式同步,即需本组内所有线程都要运行到此后才执行后续代码(栅栏结 构必须在所有线程的同样顺序中)

#pragma omp barrier new-line

**任务等待结构**指明需要自当前任务开始就需等待产生的子任务完成

# #pragma omp taskwait newline

#pragma omp atomic new-line \n expression-stmt

#pragma omp flush [(list)] new-line

序结构指明循环结构中结构块的执行按照循环的迭代顺序,将排序此结构块中的执行顺序,并允许结构块之

外的代码可以并行执行

#pragma omp ordered new-line \n structured-block

结构内引用的变量的数据共享属性法则:结构中引用变量的数据共享属性可为预先决定的、显示决定的或隐式决 定的之一。封闭结构中的 firstprivate、 lastprivate 或 reduction 参数声明的变量会导致此结构中变量采用隐式的 引用方式,并遵守以下规则: threadprivate 指令指明的变量是线程私有的、结构中某个范围内申明的具有自动 存储周期的变量是私有的、具有堆栈分配存储的变量是共享的、静态数据成员是共享的、关联的 for 循环或 parallel for 循环结构中的循环迭代变量是私有的、不具有易变成员的保留常数变量是共享的、结构中某个范围 内声明的静态变量是共享的。除了在以下情形中,具有预定义数据共享属性的变量也许未在数据共享属性参数 共享属性: for 循环或 parallel for 循环结构中的循环迭代变量可在 private 或 lastprivate 参数中被列出。数据共享 法则:具有显式决定或隐式决定的数据共享属性的变量: 1.具有显式决定的数据共享属性的变量: 在一个给定的 结构中被引用并且在此结构的数据共享参数中被列出的变量 2.具有隐式决定的数据共享属性的变量:在一个给 定的结构中被引用,但没有被预先决定数据共享属性,且没有在此结构的数据共享属性参数中列出的变量。隐 MPI 远程存储访问:远程存储访问即直接对非本地的存储空间进行访问、一个进程对另外一个进程的存储区域进行 式数据共享法则:1.在 parallel 或 task 结构中,如存在 default 参数,那么这些变量的数据共享属性由 default 参数决 定 2.在 parallel 结构中,如没有 default 参数,那么这些变量是共享的 3.对于不是 task 的结构来说,如没有 default 参数,那么这些变量将从此封闭上下文中继承数据共享属性 4.在 task 结构中,如没有 default 参数,那么在所有封 影响 MPI 程序效率的主要因素:1.并行程序由于进程线程之间有时候需要相互依赖,某个进程/线程需要等另外的进闭结构并一直到最内部的封闭 parallel 结构中变量被决定为共享的 5.在 task 结构中,如没有 default 参数且数据共享 程/线程完成才可以进行下一步计算,那么会产生等待,导致效率无法 100%。2.MPI 利用通信进行数据交换,影响 属性没有被上述规则决定,那么变量是 firstprivate 的。区域而非结构中的数据共享属性规则:1.在被调用子程序中声 明的静态变量在此区域中是共享的 2.不具有易变成员且在被调用子程序中声明的保留常数变量是共享的 3.除非是 解决措施:1.根据不同的网络情况决定发送接收的频率及通信包的大小等,比如降低通讯频率,将几次发送接收合在 threadprivate 指令中出现,否则区域中在被调用子程序中引用的文件范围或者名字空间范围变量是共享的 4.具有 堆栈分配存储的变量是共享的 5.除非是在 threadprivate 指令中出现,否则静态数据成员是共享的 6.区域中被调用子 程序的通过引用传递的正式参数继承关联的实际参数数据的数据共享属性 7.区域中被调用子程序中的其它变量是 私有的 threadprivate 指令指明变量是线程私有的

#pragma omp threadprivate(list) new-line default: 设置默认的共享方式

其中: shared: 线程共享

reduction: 声明对变量进行规约操作

reduction(operator:list)

omp\_init\_(nest\_)lock 分别初始化简单锁和嵌套锁 void omp\_init\_(nest\_)lock(omp\_(nest\_)lock\_t \*lock);

```
omp_get_wtime 获取以秒为单位的当前时间 double omp_get_wtime(void);
omp_get_wtick 获取计时器的精度 double omp_get_wtick(void);
利用时间程序可以计算程序中某段计算花费的时间
double start, end:
start = omp get wtime():
... work to be timed ...
end = omp_get_wtime();
```

MPI:进程级、分布式内存、显式、可扩展性好 OpenMP: 线程级(并行粒度)、共享内存、隐式(数据分配方式)、可扩展性差

OpenMP 采用共享内存,只适应 SMP、 DSM 架构,不适合集群架构

printf("Work\_took\_%f\_seconds\n", end - start);

解决通信延迟大和负载不平衡两个主要问题 3.调试麻烦 4.程序可靠性差,一个进程出问题,整个程序将错误 影响 OpenMP 并行程序的因素:OpenMP 程序为共享内存的,各线程可以直接读写其它线程的内存,无需通过网络 来进行数据交换: 1.避免频繁设置内存私有或共享 2.降低写同样内存的操作,为了保证正确,各线程写同样内存 时,需要排队,导致效率降低

## 常见数值函数库:

功能, 简直是小 Case。

int i,n=256

sum = 0:

for (i = 0; i < n; i++)

for  $(i = 1; i \le n; i++)$  {

printf ("sum\_=\_\%f\_\\n", sum):

sum = sum + a[i]\*b[i]

a[i] = i \* 0.5:

b[i] = i \* 2.0;

一般数值函数库:基本线性代数库(BLAS)、线性代数库(LAPACK)、可扩展性线性代数库(ScaLAPACK)、傅立叶变 换程序(Fourier Transform functions, FFT)、Netlib(http://www.netlib.org): 收集了大量常见的数学函数库 数值函数库的集合产品:MKL: Intel Math Kernel Library、AMD CPU 库、IMSL: Rogue Wave International Mathematics and Statistics Library

数据处理、计算可视化软件:Origin、Mathematica、Maple、MATLAB、IDL、GNUPLOT、Python 作业调度系统:在一个大型系统内部,通常需要处理一些自动化运行的任务,通常会采用系统自带的 crontable 的定 时任务完成。但是,很多情况下,是多个作业,彼此先后执行,共同完成任务。在这样的情况下,定时任务存在 两个明显的问题: 1.浪费了大量的系统等待时间 2.假设两个作业,第一个作业必须在第二个作业前运行,如第二个 作业先运行,就会有灾难性的后果,对于定时任务而言,解决任务这样两个作业优先级的问题是只能把任务一的 运行时间安排在二之前,不能完全满足前面的假设,但是对于作业调度器而言,安排作业的优先级,是最基本的

常见作业调度系统:LSF(IBM Platform Load Sharing Facility)、SLURM(Simple Linux Utility for Resource

Management), PBS(PBS Pro, OpenPBS, TORQUE), Maui, Condor, SGE(Oracle Grid Engine), LoadLeveler(IBM Tivoli Workload Scheduler)

```
#include "mpi.h"
int main(argc,argv)
int argc; char *argv[];
 double sum, sum local
  double a[256], b[256];
 int i, n, numprocs, myid, my_first, my_last;
 n = 256
 MPI Init(&argc, &argv):
  MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs); /*注意&*/
             rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
 my first = myid * n / numprocs: /*利田进程号及进程数使得每个进程的my first与my last不一样*
 my_{last} = (myid + 1) * n / numprocs;
  for (i = 0; i < n; i++) {
   a[i] = i * 0.5; b[i] = i * 2.0;
 for (i = my_first; i < my_last; i++) { /*每个进程的my_first与my_last不一样, */
     sum_local = sum_local + a[i] * b[i]; /*每个进程计算for循环的不同部分实现并行*/
                                                                                       知道效果
  MPI_Allreduce(&sum_local, &sum, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD);
 if (myid == 0) printf ("sum_=__%f\n", sum)
 MPI_Finalize();
 nt main(argc,argv)
char *argv[]
 double a[256], b[256];
 int status;
```

#pragma omp parallel for reduction(+:sum) /\*仅需该行代码即完成OpenMP并行\*/

TEX/LATEX:优点:1.排版 的效果非常整齐漂亮 2.排 版的效率非常高 3.非常稳 定,从1995年到现在, TEX 系统只发现过一个 bug4.排版科技文献,尤其 是含有很多数学公式的文 献特别方便、高效。现今 没有一个排版软件在排版 数学公式上面能和 TEX/LATEX 相媲美 5.纯 文本,可用任何编辑器编 辑;缺点:不是 WYSIWYG, 需编译后才