



等温等压强综：将 N 个粒子放入可移动边界的盒子内，使其压强为恒定值 p，并固定在温度为 T 的热浴中。总体系和环境不断交换能量，最终在平衡态附近涨落，用正则系综来描述，体系处于 alpha 状态的概率密度为能量和体积不定，在平均值附近涨落

设想体系里面有 M-N 个粒子，体积为 V\_0-V，力学体系通过一个活动边壁与理想气体保持接触，总体系粒子数 M 和体积 V\_0 恒定。

总体系的配分函数为两个体系的配分函数之积，Q\_l为理想气体

Z\_{M,N,T} = \int exp(-\beta H)d\Omega \int exp(-\beta H\_1)d\Omega\_1 \\ \int exp(-\beta H\_1)d\Omega\_1 = (\int dV \int exp(-\beta p^2/2m)dp)^{M-N} = [(V\_0 - V)(2\pi mkT)^{-1.5}]^{M-N}

所以\rho = \int(V\_0-V)^{M-N}dV \int exp(-\beta H) d\Omega，去极限\_V V\_0=0，M=inf

(V\_0 - V)^{M-N} \rightarrow V\_0^{M-N} (1 - \frac{V\_0}{V})^{M-N} \rightarrow V\_0^{M-N} exp(-(M - N) \frac{V\_0}{V}) = V\_0^{M-N} exp(-\beta pV)

其中代入了气体状态方程\rho = \beta P；体系的特征函数是 G(N,P,T)=kTlnZ\_{[NPT]}

他和其他热力学的关系是：S=-(\frac{\partial G}{\partial T})\_{NP}, V=(\frac{\partial G}{\partial P})\_{NT}, \mu = (\frac{\partial G}{\partial N})\_{PT},

巨正则系综：有确定的温度、体积、化学势，但粒子数不定。体系的总能量，化学势，粒子数存在涨落。巨正则系综可以看作正则系综的推广，正则系综可以看作微正则系综的推广。

设力学体系和热浴的总能E\_0 = E + E\_d，N\_0 = N + N\_h保持不变，并且力学体系的粒子数远小于热浴的。那么几率密度函数不仅仅是体系能量的函数，还是体系粒子数的函数，\rho(p,q) = \frac{\partial \gamma(h(E,h,N))}{\partial \gamma(E\_0-N\_0)}，分子取对数，再对能量和粒子数展开

ln(Q\_h^l(E\_h,N\_h))=ln(Q\_h^0(E\_0,N\_0)) + \frac{\partial ln Q\_h^l}{\partial E\_h}|\_{E\_h=E\_0} (-E) + \frac{\partial ln Q\_h^l}{\partial N\_h}|\_{N\_h=N\_0} (-N)

由两个具有粒子交换的体系达到热平衡的热力学，化学势相等

\frac{\partial \Omega\_h}{\partial N\_h} = \frac{\partial \Omega\_{mV}}{\partial N} = \beta \mu\_l；对应有：\Omega\_h^l(E\_h,N\_h) = \Omega\_h^0(E\_0,N\_0)exp[-(\beta \mu + H)]

巨正则的配分函数为Z\_{mVT} = \sum\_N \int \int exp(-\beta[\mu N + H])d\Omega

\rho = Z\_{mVT}^{-1}(N!)^{\*}[-1]exp(-\beta[\mu N + H])；如果体系有多种粒子，

\rho = Z\_{mVT}^{-1}[\prod\_i N\_i! ]^{-1}exp(-\beta[\sum\_i \mu\_i N\_i + H])；Z= \sum\_N (\prod\_i \frac{e^{-\beta \mu\_i N\_i}}{N\_i!}) \int exp(-\beta[H])d\Omega

特征函数j=-kTlnZ=F-\mu N=-PV；S=-(\frac{\partial F}{\partial T})\_{\mu,N}, P=-(\frac{\partial F}{\partial V})\_{\mu,T}, N = -(\frac{\partial F}{\partial \mu})\_{PT},

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。

P(x\_n|x\_{n-1}x\_{n-2}...) = P(x\_n|x\_{n-1})

定义W\_{ij} = p(x\_i|x\_j)，则\sum\_j W\_{ij} = 1；p\_n(x\_1x\_2...x\_n) = p(x\_1)W\_{[1,2]}...W\_{[n-1,n]}

设状态数目为 M，转移概率构成 M\*M 的矩阵，P(N)=P(1)W^{\*}[N-1],Markov 的极限和初态无关，保证了极限分布是玻尔兹曼分布

任务就是寻找合适的转移概率矩阵 M，使其极限分布为 P。p(x,t+\Delta t)-p(x,t)=\int dx'W(x->x')

x')p(x,t)\Delta t+\int dx'W(x'>->x)p(x,t)\Delta t; \frac{\partial p}{\partial t} = \int dx'[W(x'>->x)p(x',t) - W(x->x')p(x,t)] 该式被称为主方程，相当于几率守恒方程，即对所有时间都有\int p(x,t)dx = 1。在平稳分布下，W(x'>->x)p(x',t) = W(x->x')p(x,t)，即细致平衡解

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

离散化，p\_{i|Wij}=p\_{j|Wij}，上式对 j 求和，结合\sum\_j W\_{ij} = 1，得 p\_{i|}=\sum\_j p\_{j|Wij}

这样的方程有 2M 个，但是矩阵元有 M^2 个，所以难以求解 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能将刘维尔方程改写为主方程

Metropolis 方法：

设W\_{ij} = T\_{ij}A\_{ij}，T 代表 x 选择到 y 的概率，A 代表接受的概率，假设 T 对称设概率分布为 p，可设 W\_{ij} =

\begin{cases} T\_{ij} & \text{if } p\_j > p\_i \\ T\_{ij}(p\_j/p\_i) & ,W\_{ii} = 1 - \sum\_{j\neq i} W\_{ij}, \text{ 抽样满足细致平衡，另一种可为 } W\_{ij} = \frac{p\_j}{p\_i+p\_j} \end{cases}

对于抽样点 x\_n,可以选择一个步长 d，x=x\_n+d，然后按照上面概率进行抽样

给定任意一个初始值，然后社区序列的初始段，或者随机舍去序列中的一部分抽样点。步长不可以设得过大或过小，要使得接受率在 50%.

证明 metropolis 抽样：N 为概率密度函数

设 W(x->y)=T(x->y)A(x->y), 设 T(x->y)=T(y->x)，则 N(x)/N(y)=A(y->x)/A(x->y)

若 P(y)>p(x)，则 A(y->x)=p(x)/p(y)，A(x->y)=1；若 p(y)<p(x)，则 A(x->y)=p(y)/p(x)，A(y->x)=1；

所以在任何情况下都有 N(x)/N(y)=p(x)/p(y)

正则系综的蒙特卡洛模拟：将玻尔兹曼分布直接代入 Metropolis 抽样即可

微正则系综的蒙特卡洛模拟：使 N 和 V 保持恒定，随机地改变粒子的动力学变量并且尽可能多地计数微观状态的抽样。但只选择那些保持总能量恒定的状态。该方法效率很低也可以将所考虑的体系附加一个外部自由度 demon，如果体系能量要减小，就对应着 demon 增加一部分能量，体系能量要增加，如果 demon 手上有这个能量就允许，没的话就不允许。

a、随机选取一个粒子开始移动，形成一个新构型，计算体系能量变化

b、如果 du 小于 0，那么接受这个移动并且将 demon-demon+du

c、如果 du 大于 0，若 demon>du 则接受并且 demon=demon-du,若 demon<du，拒绝

足够多步后，体系和 demon 各自达到平衡，由于 demon 只有一个自由度，它带来的涨落是很小的，可以认为很好地代表了一个微正则系综

等温等压强综的蒙特卡洛模拟：

体系的几率密度分布为，其中\gamma = \frac{N}{L}，L 为盒子长度；\rho = exp(-\beta[U(S^N;V) + PV - N\beta^{-1}lnV]) V 被处理成一个附加坐标。再对上面的 rho 用 metropolis 方法，一般来说，一次体积移动的尝试需要重新计算新的约化坐标下的所有粒子间的相互作用。通常是先进行 N 次位置移动，然后插入一次体积移动

巨正则系综的蒙特卡洛模拟：N 是粒子数，s 是归一化坐标；\rho = \frac{V^N exp(-\beta \mu N)}{(2\pi m kT)^{N/2} N!} exp(-\beta U(S^N))

a、粒子在空间中随机移动，利用 metropolis 方法决定是否接受

b、粒子剔除与增加，类似地决定是否接受

Ising 模型：采用格点模型，自旋设为 +1，Ising 模型中，每一个自旋有相互作用的，系统的能量为 H = - \sum\_{\langle i,j \rangle = 1}^N J\_{ij} \sigma\_i \sigma\_j - \mu\_B H \sum\_{i=1}^N \sigma\_i，<i,j>代表邻近的自旋对，J 是交换积分常数。如果一一对自旋方向相同，能量为 1，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。

p\_{\alpha} = \frac{e^{-\epsilon\_{\alpha}/k\_B T}}{Z(T)}, \quad Z(T)=\sum\_{\alpha} e^{-\epsilon\_{\alpha}/k\_B T}

自由能 F=-k\_B T \lim\_{N\rightarrow\infty} \frac{1}{N} \ln Z, \quad M=k\_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial H}, \quad U=-\frac{\partial}{\partial (1/k\_B T)} \ln Z, \quad C=\frac{\partial U}{\partial T}, \quad x=\lim\_{H\rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial H} (M,H) 可以类比(P,V)，另一方面，我们也可以用玻尔兹曼分布将这些物理量表达出来 U=<E>=\sum\_{\alpha} p\_{\alpha} E\_{\alpha}, \quad M=N\mu\_B <\sigma>=\mu\_B \sum\_{\alpha} p\_{\alpha} (\sum\_{i=1}^N \sigma\_i)\_{\alpha}; \quad <E^2>=\sum\_{\alpha} p\_{\alpha} E\_{\alpha}^2, \quad M^2=2=\mu\_B^2 \sum\_{\alpha} p\_{\alpha} (\sum\_{i=1}^N \sigma\_i)^2\_{\alpha} 由于比热可以用总的统计涨落来表示，所以磁化率也可以用零磁场下磁化强度的统计涨落来表示；C = \frac{(\Delta E^2)}{(k\_B T)^2}, \quad x = \frac{(\Delta M)}{k\_B T}; \quad <\sigma> 是每个格点的平均自旋，对于处在平衡态的系统，相当于对构型\alpha 的平均

—维 Ising 解：在没有外磁场时，E=-J\sum\_{i=1}^N \sigma\_i \sigma\_{i+1}, \quad 设 K=J/k\_B T，配分函数为 S\_{-1}=\sigma\_{i+1} = \mp 1;

Z=\sum\_{\sigma\_1=\mp 1} \sum\_{\sigma\_2=\mp 1} \cdots \sum\_{\sigma\_N=\mp 1} e^{K \sum\_{i=1}^N \sigma\_i \sigma\_{i+1}}=2 \sum\_{\sigma\_1=\mp 1} \sum\_{\sigma\_2=\mp 1} \cdots \sum\_{\sigma\_{N-1}=\mp 1} e^{K \sum\_{i=1}^{N-1} S\_i S\_{i+1}} \\ Z=2 \sum\_{S\_1=\mp 1} e^{KS\_1} \sum\_{S\_2=\mp 1} e^{KS\_2} \cdots \sum\_{S\_N=\mp 1} e^{KS\_N}=1 = 2(2\cosh K)^{N-1}

每个自旋的自由能为 F=-kTln(2coshK)，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，\sigma\_{N+1} = \sigma\_1,

H = - \sum\_{i,j=1}^N J\_{ij} \sigma\_i \sigma\_j - \mu\_B H \sum\_{i=1}^N \sigma\_i, \quad 设 \mu\_B H/k\_B T，配分函数为

Z=\sum\_{\sigma\_1=\mp 1} \sum\_{\sigma\_2=\mp 1} \cdots \sum\_{\sigma\_N=\mp 1} e^{\sum\_{i=1}^N (K\sigma\_i \sigma\_{i+1} + \sigma\_i)}

若将自旋写成向量的形式，再定义 P = (\begin{smallmatrix} e^{K+1} & e^{-K+1} \\ e^{-K-1} & e^{-K-1} \end{smallmatrix}), 配分函数可以表示为

Z = \sum\_{\sigma\_1=\mp 1} \sum\_{\sigma\_2=\mp 1} \cdots \sum\_{\sigma\_N=\mp 1} (\sigma\_1 | P | \sigma\_2) (\sigma\_2 | P | \sigma\_3) \cdots (\sigma\_N | P | \sigma\_1) = \sum\_{\sigma\_1=\mp 1} (\sigma\_1 | P^N | \sigma\_1) = Tr (P^N) = \lambda\_+^N + \lambda\_-^N; \quad \lambda\_{\pm} = e^K \cosh l \pm \sqrt{e^{2K} \sinh^2 l + e^{-2K}};

F \approx \ln(e^K \cosh l + \sqrt{e^{2K} \sinh^2 l + e^{-2K}}), 它仍然是温度的解析函数，没有相变

Weiss 平均场理论：H = -0.5 \* \sum\_{i=1}^N z f(\sigma) \sigma\_i - \mu\_B H \sum\_{i=1}^N \sigma\_i = -\sum\_{i=1}^N \epsilon f(H) \sigma\_i。其中 z 是配位数，0.5 是为了保证每对自旋求和一次，z f(\sigma) 每个自旋和它邻近自旋的平均相互作用能。我们要从配分函数中求 f(\sigma)。

在此近似下，Z= (\sum\_{\sigma=\pm 1} e^{\epsilon \sigma / k\_B T})^N = [2\cosh(\epsilon \sigma / k\_B T)]^N

F = -k\_B T \lim\_{N\rightarrow\infty} \frac{M}{N} \ln Z = -k\_B T \ln(2\cosh(\epsilon \sigma / k\_B T)), M=k\_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial H} = N \mu\_B \tanh(\epsilon / k\_B T)

所以 f(\sigma) = \lim\_{N\rightarrow\infty} \frac{M}{N \mu\_B} = \tanh(\epsilon / k\_B T) = \tanh([z f + 0.5 (\sigma) + \mu\_B H] / k\_B T)

用数值迭代法来求解该方程

在温度很低时，a=z/2KT<1，迭代会出现关于原点对称的两个解，此时对应铁磁相，a>1 时，顺磁相。可以给出相变温度值。该理论预言任何 d 维的格子都有相变，这是和理论不符合的。平均场理论成立边缘维数 d=4，自旋系统的序参数\langle\sigma\rangle和逾渗系统的 P\_{c}(inf)有相似行为

取 tanx=x-x^3/3, \langle\sigma\rangle = \frac{z}{3} \langle\sigma\rangle - \frac{1}{3} [\frac{z}{3} \langle\sigma\rangle]^3，铁磁相的解为，\langle\sigma\rangle-(T\_c - T)^{\wedge}(\beta eta), \beta=0.5

即有效的平均场值

求磁化率和相应的临界指数x = \frac{\partial M}{\partial H} = N \mu\_B \frac{\partial \langle\sigma\rangle}{\partial H} = N \mu\_B \sec^2 \hat{\epsilon} (\epsilon / k\_B T) \frac{1}{k\_B T} (\frac{z f}{2} \frac{\partial \langle\sigma\rangle}{\partial H} + \mu\_B)

\frac{\partial \langle\sigma\rangle}{\partial H} = \frac{\mu\_B/k\_B T}{\cosh^2((\sigma)T\_c/T)-\frac{T\_c}{T}} H \rightarrow 0\text{的极限下}, \quad x = \frac{2N \mu\_B^2}{z f} \frac{\tau\_c/T}{\cosh^2((\sigma)T\_c/T)-T\_c/T} \\ \text{在 } T \sim T\_c \text{ 附近}, \quad x = \frac{2N \mu\_B^2}{z f} \frac{T}{T - T\_c} \sim -(T - T\_c)^{-1}

二维 Onsager 解：比热等于,E\_1, E\_2 为 1,2 类椭圆积分；C = \frac{1}{2} k\_B K^2 \coth^2(2K) \{E\_1(\alpha) - E\_2(\alpha) - \sec^2(2K) \}^2 + (2\tanh(2K) - 1) E\_1(\alpha) \}；\alpha=1 时，积分发散，相变点为\alpha=2 \frac{\sinh(2K)}{\cosh^2(2K)} = 1

二维 Ising 模型：根据反转前后能量的变化，二维情况下构型共有 10 种变化，对应 5 种能量变化。因此在每次改变构型的时候可以直接从数组调用能量变化值而不用全部计算一次。同时为了减弱有限边界的影响，可以假设周期性边界条件，在边界外再加一行和一系列。

\begin{matrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 \rightarrow 1 & 0 & 1 \rightarrow 0 & 1 \rightarrow 0 & 0 & 1 \rightarrow 0 & 1 \rightarrow 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{matrix}

指数的确定同样可以使用有限尺度标度法

定义自旋之间的关联函数G(r) = \langle\sigma(r)\sigma(0) \rangle - \langle\sigma(r)\rangle\langle\sigma(0) \rangle \sim r^{-(d-2)} f(r/\xi)。{\xi}成为体系的关联长度，在相变点处\rightarrow \infty，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。

XY 模型：系统的自旋具有两个任意的取向。E = -J \sum\_{\langle i,j \rangle} \sigma\_i \cdot \sigma\_j = -J \sum\_{\langle i,j \rangle} (\sigma\_{ix} \sigma\_{jx} + \sigma\_{iy} \sigma\_{jy} = -J \sum\_{\langle i,j \rangle} \cos(\varphi\_i - \varphi\_j)，其中 phi 是自旋和 x 轴的夹角。此时只要低于临界温度，体系就会有成对的涡旋，因此临界点实际上是临界线

模拟时先选取对应于高温的无序模型，然后在利用 metropolis 方法抽取完所有的粒子后大幅度降低温度

Heisenberg 模型：自旋可以取三维空间中的任意方向。注意无论是 XY,Y 模型还是 heisenberg 模型都可以用在一维，二维，三维格点上。H = -J \sum\_{\langle i,j \rangle} \sigma\_i \cdot \sigma\_j = -J \sum\_{\langle i,j \rangle} (\sigma\_{ix} \sigma\_{jx} + \sigma\_{iy} \sigma\_{jy} + \sigma\_{iz} \sigma\_{jz}

q 态 potts 模型：广义自旋，不再只有 0 和 1 的取值，可用来研究材料的微结构。

自旋涨落：Ising 模型中，交换常数 J 不再是常数，可以从高斯分布中选取，甚至可以正负值都取到。模拟时首先给每一条键赋予明确的常数 J，然后开始 metropolis 抽取构型。高温下这种模拟类似于 Ising 的铁磁与反铁磁模型，但是接近相变温度时，模拟需要的时间显著变长。

模拟退火法：同时模拟不同温度下的系统，在模拟步骤中逐次交换这些系统的温度，因此可以将低温下冻结的状态转移到高温，以脱离亚稳态。

临界现象：在相变温度即高温的情况下，自旋之间的关联性很小，单个自旋拥有很高的反转几率，因此很快就能产生很多各种各样的构型。达到平衡要求各态历经性。但当温度下降到临界点附近时，开始形成磁畴，此时系统的涨落会很大，大块的自旋会整体反转。然而如果每次只是仅仅一个自旋的反转，由于能量的增高，这种构型是很难被接受的。所以可以使得整块磁畴一起反转，从而加快运算。

逾渗模型与 apotts 模型的联系：在相互作用自旋 Potts 点阵模型上，用成键几率 p=1-exp(-abs(K)\delta\_{\sigma\_i\sigma\_j}), 即 \sigma\_j \neq \sigma\_i 时不成键，反之则按照概率成键。

swednsen-wang 加速重要抽样法

先产生初始的自旋构型，然后按上述方法进行逾渗变换。再用集团标记法标记集团，然后给集团内的所有自旋赋予一个随机数值，由此得到一个新的构型。

经典液体：定义径向分布函数 g(r)，定义为考虑一个在原点的粒子，在其 r\rightarrow r+d 的球壳内的粒子数为 4\langle\rho h^2 \pi r^2 g(r)\rangle 对于理想气体，g(r)=1，对于实际有相互作用的粒子，r 趋于 0 的时候 g 也趋于 0，之后随着 r 的增加会存在极值点。

由于\rho = 4\pi r^2 \rho\_0 g(r) 为粒子的局域密度，所以该粒子与球壳内的其他粒子的相互作用为 u(r) \rho(r) 4\pi r^2 dr，求和再乘 N/2 后就得到所有粒子的能量总和。

单粒子的平均势能为 \frac{U}{N} = \frac{1}{2} \int u(r) \rho(r) dr，现在我们要求出流体的状态方程，由于涉及压强 P，他是一个强度量，强度量难以从 Monte Carlo 中得到，因此我们用位力定理 \frac{PV}{NKT} = 1 + \frac{1}{dNkT} (\sum\_{\langle i,j \rangle} T\_{ij} \cdot F\_{ij}) = 1 -

\frac{1}{2dNkT} \int \rho(r) r^d \frac{dr}{dr} 实际上可以对任意给定的势能 u(r)解析或模拟地计算出 g(r)，另一方面，g(r)傅里叶变换 S(k)=1+ \rho \int [g(r) - 1] exp(ik \cdot r) dr 正好是散射粒子在给定角度\theta 方向上的相对强度

在模拟计算中，将距离 r 分割成许多小等分，间隔为\Delta r，然后扫描系统中的所有粒子对，对每一个粒子(i, j)得到其相应的距离值n = r\_{ij}/\Delta r。然后在(g,N)直方图上计数一次。模拟结束后归一化 g(r)，\Delta r使得接受率为 0.5 时最佳

钢球势模拟流体运动，随机选择一个粒子 i，让它进行一个随机行走，看看他会不会和其他粒子有重叠，如果没有就接受这个构型，如果有就拒绝，然后在平均值计算时原构型要多计数一次。为了加快算法，有以下一些方法

1、元包列表法，将系统空间分割为若干个小圆包，尺寸要大于粒子尺度和行走步长，然后仅对这个粒子所在的元包和周边的元包内的粒子进行距离计算。

具体的参数\Delta r 和势能的形式有关。如果\Delta r 较大，那么被拒绝的可能性就增大。对于连续势能，由于每一次都要计算所有粒子之间的能量，所有拒绝还是接受对时间没有影响，但是对于钢球势，拒绝所花的时间比接受还长，所有要增加拒绝的概率

lennard-jone 液体：以连续势模拟粒子体系时候需要加入一些特殊的考虑，因为给定 N,V，所以边界的大小会给模拟带来影响。对于边界上的粒子，它仅仅对 V 内部的其他粒子有相互作用，丧失了对外部可以存在的粒子的相互作用。我们可以借助于周期性边界条件将体系包裹起来，一个粒子将与无限周期体系中的所有粒子相互作用，包括该粒子在其他单元的镜像。采用连续势能时，可以将势能在某一个 r\_c 值进行截断。采用周期性的结果是，可能产生与盒子边长相容的粒子密度数起伏。另一个影响是会导致 g(r)的各向异性。

实际上的所有势能收敛快于 r^3 时才可以截断，对于库仑势是不满足这个要求的。因要采用其他的算法。截断引起的误差为\Delta = N \frac{1}{2} \int\_{r\_c}^{\infty} \rho(r) u(r) 4\pi r^2 dr

对于 U 势能，截断引起的压强贡献为\Delta P^{imp} = \frac{6\pi}{3} \rho^2 \epsilon \sigma^3 [(\frac{r\_c}{3} \epsilon)^0 - (\frac{r\_c}{3} \epsilon)^3]

对压强的尾部校正为\Delta P^{tail} = \frac{16\pi}{3} \rho^2 \epsilon \sigma^3 [\frac{2}{3} (\frac{r\_c}{3} \epsilon)^2 - (\frac{r\_c}{3} \epsilon)^3]；对于接近凝固的液体不适合用晶体初始条件用约化单位进行模拟：长度单位\sigma，能量单位\epsilon，质量单位 m，时间单位为 \frac{\sigma}{v\_{me}}, r^\*=r/\sigma, \quad u^\*=u/\epsilon, \quad \rho^\*=\rho \sigma^3/\epsilon, \quad T^\*=kT/\epsilon \\ \text{verlet 列表法:引入另外一个截断半径} r\_0 > r\_c \text{,在计算相互作用之前，首先对每一个粒子都制作以该粒子为中心，半径为} r\_0 \text{之内的粒子的列表，在计算其后的相互作用时，对某个粒子只考虑他与列表中的其他粒子之间的相互作用，如果某个粒子尝试移动的量小于} r\_0 - r\_c \text{，则该粒子仍然只对} r\_0 \text{内的粒子有相互作用。因此只需要对表中的粒子计算即可。}

证明正则系综的特征函数是亥姆霍兹自由能，

\rho\_{\alpha} = \frac{1}{Z} exp(-\beta E\_{\alpha}), \quad Z = \sum\_{\alpha} exp(-\beta E\_{\alpha}), \quad \langle A \rangle = \sum\_{\alpha} A\_{\alpha} \rho\_{\alpha} = \frac{1}{Z} \sum\_{\alpha} A\_{\alpha} e^{-\beta E\_{\alpha}}

U=(E) = \frac{1}{Z} \sum\_{\alpha} E\_{\alpha} e^{-\beta E\_{\alpha}} = -\frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \quad 比热 C=\frac{\partial U}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta} = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}

由热力学定律C = T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta}, \quad \frac{\partial S}{\partial \beta} = -k\beta \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}

S=-k\beta \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} + k \ln Z, \quad F=U-TS=-\frac{1}{\beta} \ln Z，特征函数的意义是其他的热力学变量都可以通过这一个函数得到

S=-(\frac{\partial F}{\partial T})\_{N,V}, \quad P=-(\frac{\partial F}{\partial V})\_{NT}, \quad \mu = (\frac{\partial F}{\partial N})\_{VT}, \quad M=-(\frac{\partial F}{\partial H})\_{VT}

若 Y 为外加的场，X 为对应的共轭力学广延量，如磁场和磁化矢量

E\propto -XY, \quad X=-\frac{\partial F}{\partial Y}, \quad \langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum\_{\alpha} E\_{\alpha}^2 e^{-\beta E\_{\alpha}} = -\frac{\partial^2 F}{\partial \beta^2}; \quad \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = \frac{C}{k\beta^2}

比热正比于能量涨落。

若 E\propto -XY，即 U\propto -TS, \quad U\propto -PV, \quad U\propto -MH, \quad U\propto \mu N, 可得

S=-(\frac{\partial F}{\partial T})\_{N,V}, \quad P=-(\frac{\partial F}{\partial V})\_{NT}, \quad \mu = (\frac{\partial F}{\partial N})\_{VT}, \quad M=-(\frac{\partial F}{\partial H})\_{VT}

var(X) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{Z} \sum\_{\alpha} X\_{\alpha}^2 e^{-\beta E\_{\alpha}} - \frac{1}{\beta^2 z^2} (\frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2})^2 = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 F}{\partial \beta^2} = \frac{\partial}{\partial \beta} \langle X \rangle

物理量平均值可以由自由能关于外场 Y 的一阶导数求得 物理量的涨落可以由自由能关于外场 Y 的二阶导数求得

定义广义磁化率：x = \frac{\partial \langle Y \rangle}{\partial \beta} = \beta var(X)，左边用于实验测量，右边用于 MC 模拟

E\propto MH, \quad x = \frac{\partial M}{\partial H} = \beta var(M),

考虑一个二能级系统，其第一和第二能级的玻尔兹曼因子之比为 2:1，则其 metropolis 跃迁矩阵为 \begin{pmatrix} 0 & 0.5 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}；解其本征值方程，(2/3 - 1/3) = (2/3 - 1/3) \begin{pmatrix} w\_{11} & w\_{12} \\ w\_{21} & w\_{22} \end{pmatrix}，得到 2w\_{-12}=w\_{+21}；结合细致平衡原理 p\_{-1|w\_{12}}=p\_{w\_{-12}|}, 或者概率归一化条件，可得 2/3w\_{-12}=1/3w\_{+21}；若取 \begin{pmatrix} 3/4 & 0.5 \\ 0.5 & 1/4 \end{pmatrix}，则

对应 metropolis-hasting 抽样

metropolis barker 抽样：设W\_{ij} = T\_{ij}A\_{ij}，T 可对称，A 为该步的接收概率，barker 建议取A\_{ij} = \frac{1}{1+p\_{ij/p\_j}}, W\_{ii} = 1 - \sum\_{j\neq i} W\_{ij}

metropolis hasting 抽样规则：一般的，A 和 T 都是非对称的，根据细致平衡条件，\frac{p\_i}{p\_t} = \frac{W\_{ij}}{W\_{ji}} = \frac{T\_{ij}A\_{ji}}{T\_{ji}A\_{it}}, 取

A\_{ij} = \min\{1, \frac{p\_{t|j}}{p\_{i|j}}\} 则W\_{ij} = \begin{cases} T\_{ij}, & \text{if } \frac{p\_{t|j}}{p\_{i|j}} > 1 \\ \frac{p\_{t|j}}{p\_{i|j}}, & \text{otherwise} \end{cases}, \quad W\_{ii} = 1 - \sum\_{j\neq i} W\_{ij}

一般来说，T 是任意的条件概率分布，最后有与 p 相近的形状，例如 H=H\_0+H\_1, 则选取 T=exp(-

beta H\_0)，由于p\_t|W\_{ij} = \begin{cases} p\_t|T\_{ij}, & \text{if } \frac{p\_{t|j}}{p\_{i|j}} > 1 \\ p\_t|T\_{ji}, & \text{otherwise} \end{cases}，交换 ij 即证明满足细致平衡

x = \frac{\Delta M^2}{k\_B T}，磁化率是磁化强度的涨落。磁化强度是序参数，\langle M \rangle = \frac{1}{N\_g} \sum\_{m=1}^{N\_g} (\frac{1}{N} \sum\_{i=1}^N \sigma\_i) = \frac{1}{N} \sum\_{i=1}^N \langle \sigma\_i \rangle，其中 N\_g 是接受的构型数目，N 是格点数目。

磁化率自相关函数：



C
(
t
)
=
c
o
v
A
(
t
)
,
A
(
0
)
=
⟨
δ
A
(
t
)
δ
A
(
0
)
⟩
=
⟨
(
A
(
t
)
−
⟨
A
⟩
)
⋅
(
A
(
0
)
−
⟨
A
⟩
)
⟩
=
⟨

A

2


(
t
)

d

t

′



[
m
(
t
+
t
′
)
m
(

t

′

)
−
⟨
m

t

′

⟩

2



]
∝
exp
⁡
(
−
t
/
τ
)


 临界慢化，



τ
≈

L

2


,

T

C
P
U
=

L

d
+
z

wolff 算法:

1 随机选择一个自旋为自旋块生长的种子，检查它的某邻近自旋是否取向相同；

2 如相同，以几率 P<sub>add</sub> 添加到该自旋块中；

3 对新添加的块成员自旋，再检查其邻近自旋以确定是否要添加到块中;添加块新成员时，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转（翻转几率取决于能量消耗）;

P<sub>add</sub> 依赖于温度，随温度增加而降低。






W
(
x
→
y
)


T
(
x
→
y
)


A
(
x
→
y
)


=
(
1
−

P

a
d
d


)

m
−
n



A
(
x
→
y
)


A
(
y
→
x
)



=
exp
⁡
(
−
β
(

E

y


−

E

x


)
)

P

a
d
d


=



T
(
y
→
x
)


T
(
y
→
x
)


A
(
y
→
x
)


=
[
exp
⁡
(
2
β
)
(
1
−

P

a
d
d


)

]

n
−
m

所以当选取 P<sub>add</sub> = 1 - exp（-2β）时，两种翻转都可以接受。满足细致平衡条件。

自旋玻璃：自旋玻璃是一个铁磁和反铁磁相互作用竞争的无序自旋系统。由于自旋间不同相互作用的竞争，导致系统有冻结的无序度，宛如玻璃中原子的无序空间排列结构被冻结了一样。尽管长程序，但有短程序，因此磁化率有尖峰。

RKKY 相互作用：



H
=

Σ

i
j



J
(

R

i
j


)

σ

i


σ

j


,

I
(
r
)
=

I

0




cos
⁡
(
2
k

F

r
+
ϕ
)


(

k

F


r
)

3




,

 长程震荡

Edwards-Anderson 模型：



H
=
−

Σ

i
j



J

i
j



σ

i


σ

j


,
⟨

J

i
j


⟩
=

J

2


,

P
(

J

i
j


)
=



1


√
2
π

j


exp
⁡
(
−


J

i
j


2
j


)
,

或 P(J<sub>ij</sub>) =

p<sub>s</sub>δ(J<sub>ij</sub> - J) + p<sub>d</sub>δ(J<sub>ij</sub> + J)

高温时，顺磁相，⟨σ<sub>i</sub>⟩ = 0,⟨m⟩ = 0;低温时，自旋玻璃相，⟨σ<sub>i</sub>⟩ ≠ 0,⟨m⟩ = 0,

C
(
t
)
=



1


q


Σ

μ
=
1


n



[
⟨

σ

i


(
t
)

σ

i


(
0
)


⟩
−
⟨

σ

i


⟩

2


]
,

序参数 q=






1


N


Σ

μ
=
1


N



⟨

σ

μ

2


⟩
≠
0
,

x
=



1


2


(
1
−
q
)

Sherrington-Krikpatrick 模型：H=Σ<ij>J<sub>ij</sub>σ<sub>i</sub>σ<sub>j</sub>，此处<ij>=all。(J<sub>ij</sub>) = 0，(J<sub>ij</sub><sup>2</sup>) = J<sup>2</sup>。

P
(

J

i
j


)
=



1


√
2
π

j


exp
⁡
(
−


J

i
j


2
j


)
,

或 P(J<sub>ij</sub>) = p<sub>s</sub>δ(J<sub>ij</sub> - J) + p<sub>d</sub>δ(J<sub>ij</sub> + J)

⟨lnZ<sub>i</sub>⟩ = ∫ dj<sub>ij</sub>P(J<sub>ij</sub>)lnZ<sub>ij</sub>,

副本方法：



⟨
ln

Z

i


⟩
=

lim

n
→
0



1


n


(
ln

Z

n


)

,

Z

n


=
T

r


σ

i


c


exp
⁡
{
β

∑

i
j


J

i
j



Σ

a
=
1


n



J

i
j


σ

i


a


σ

j


a


}

模拟退火：设低温为T<sub>0</sub>，β<sub>0</sub>，高温为T<sub>1</sub>，β<sub>1</sub>，ΔE = E<sub>v</sub> - E<sub>μ</sub>，交换温度时接受概率为

1


Δ
E
<
0

A
s
=
{
exp
⁡
(
−
(
β

0


−
β

1


)
Δ
E
)
,

Δ
E
>
0

证明交换温度时满足细致平衡条件P<sub>uv</sub> =

1


Z

n




exp
⁡
(
−
β

0


E

u


)


1


Z

n




exp
⁡
(
−
β

1


E

v


)

W
(
μ
v
→
μ
′
ν
′
)


W
(
μ
′
ν
′
→
μ
ν
)


=



E

ν
μ




E

μ
ν




P

μ
ν

W
(
μ
ν
→
μ
′
ν
′
)


W
(
μ
′
ν
′
→
μ
ν
)


=
exp
⁡
[
−
β

0


(

E

μ
ν
−

E

ν
μ
)
−
β

1


(

E

μ
′
ν
′
−

E

ν
μ
′
)
]
,

μ
′
=
ν
,

μ
=
ν
′

W
(
μ
ν
→
μ
′
ν
′
)


W
(
μ
′
ν
′
→
μ
ν
)


=
exp
⁡
[
−
β

0


Δ
E
]
exp
⁡
[
β

1


Δ
E
]
=

W
(
μ
ν
→
μ
′
ν
′
)


W
(
μ
′
ν
′
→
μ
ν
)


=
exp
⁡
[
−
β

0


Δ
E
]
exp
⁡
[
β

1


Δ
E
]
=

W
(
μ
ν
→
μ
′
ν
′
)


W
(
μ
′
ν
′
→
μ
ν
)


=
exp
⁡
[
−
β

0


Δ
E
]
exp
⁡
[
β

1


Δ
E
]
=

Δ(μν→μν′),即接收概率 A 满足细致平衡条件

对于复杂的物理系统，常出现无论多少迭代都不能达到收敛的精度。但是从物理系统本身来说，应该是收敛的。不收敛是迭代过程太粗糙所造成的。要使迭代收敛的可保留x<sub>n</sub>和x<sub>n-1</sub>，构造新的输入为：

x<sub>n+1</sub> = αx<sub>n</sub> + (1 - α)x<sub>n-1</sub>。

分岔值λ<sub>m</sub>和前后分岔间距的比值(λ<sub>m</sub>-λ<sub>m-1</sub>)/(λ<sub>m+1</sub>-λ<sub>m</sub>)。前后分岔间距的比值趋向于一个常数δ=4.669 201。Feigenbaum 发现：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λ<sub>∞</sub>：λ<sub>m</sub>-λ<sub>∞</sub> = Δδ<sup>-m</sup>，A 是依赖于迭代函数的常数。倍周期分岔可以通过不同的迭代函数获得。他还发现：δ是不依赖于迭代函数的普适常数。3周期间岔的δ= 55.247图上作 x=1/2 的直线和放大的分岔曲线相交，得到分岔纵间距d<sub>1</sub>,d<sub>2</sub>,d<sub>3</sub>等值。d<sub>m</sub> /d<sub>m-1</sub>~α；这里的α也是一个普适常数。它的数值是:α=2.50297875

095892822 283

一个动力学过程的吸引子是它的轨迹在充分长时间之后将渐近地收敛到极限的状态或状态的集合。作为吸引子它本身是不可分解的，吸引子在相空间的体积为 0。奇异吸引子具有吸引子的性质，奇异的原因有三点。一是它对初值具有敏感的依赖性（吸引子本身没有，但是点在吸引子附近的位置有）；二是具有无限嵌套的自相似结构，即具有分数维；三是它的几何结构完全不随迭代方程的参数的发展和连续地变化。Lyapunov(李雅普诺夫)指数可以用来表示初值敏感性是否出现以及敏感的程度，图中有两个相差很小的起始点，设它们分别为x<sub>0</sub>和x<sub>0</sub>+dx，经过迭代，两个状态之间的差别愈来愈大(dx<sub>0</sub>, dx<sub>1</sub>, dx<sub>2</sub>...愈来愈大): dx<sub>n</sub> = dx<sub>0</sub>e<sup>λ<sub>n</sub></sup>，这个大于 0 的指数给出 n 次迭代中每一次迭代的平均的发散数,它是对混沌态的初值敏感性的定判据。

Julia 集：Z<sub>n+1</sub> = Z<sub>n</sub><sup>2</sup> + C，称其中迭代过程中不收敛也不发散的组成 Julia 集 可以规定一个距离函数：D=x<sup>2</sup>+y<sup>2</sup>；计算例如 D>20 所需迭代的次数，如果某点经过 300 次迭代仍未逃离，就可以认为它属于 J 集。对于趋于内部的点也可以类似处理。还可以将逃离所需迭代的次数对起始迭代点进行分类，可得图面。J 集可以是闭环也可以是。J 集中是给定 C 后对复变量 Z 进行分类；而 M 集则是在复参数 C 填充的平面上对参数 C 进行分类得到的图形。M 集的初始值 Z 通常取为 0，然后进行迭代。对每一个 C 连续计算Z<sub>n</sub>(0)，如果发散则认为该 C 点在 M 集以外，否则就认为 C 点在 M 集内。由于取远离原点的 C 时，迭代后都会逃离，故 C 应在原点附近取值。对每一个 C 值重复这一过程就可以在计算机上画出 M 集的图形。类似地，可以规定一个距离函数 D=x<sup>2</sup>+y<sup>2</sup>，计算 D> 20 所需的迭代次数，如迭代次数超过 10 的点标为白色，迭代次数超过 35、110 的，

M 集的内部放大达到百万倍时又会找到一个新的与原 M 集相似的图形。这种自相似性是 M 集的第一特性。M 集的另一个特性是在 M 集内任选一点 C，通过把它在它附近愈来愈小的片断放大，就会找到对应于这个 C 值的 J 集。换句话说，M 集概括了所有的 J 集，它是无穷数目的 J 集的直观的图像目录表。因此常把 M 集称为 J 集的缩微字典。拓扑维数。拓扑学研究可连续变形的图形，而几何学研究刚性图。在几何学中圆和方形是不同的，但在拓扑学中是等价的，因为它们可连续相互变换，并且都将平面上的点分成三个集合:图形内、图形外和图形上，所以它们具有共性。一条无数曲折但连续的折线和一条直线是等价的，因为它们可以连续地相互变换，而且两者的拓扑维数都是 1。

把规则图形的维数 D 确定为 D=



ln
(
N
(
ε
)


ln
(
1
/
ε
)


)


;这里的ε是测量单元的尺寸,N(ε)是测度得到的规则图形的测量单元（线段、方形和立方体）数。如由 1 减小为 1/2<sup>n</sup>时(n 是正整数)，测量正方形得到的 N(ε)由 1 增大为 4<sup>n</sup>。

Cantor 集:用尺寸ε为 (1/3)<sup>n</sup>·n(n=0,1,2,3-...)的尺子测量 Cantor 集,只要线段内有 Cantor 集的点就予以计数,得到图形有 2<sup>n</sup>个单元(N=2<sup>n</sup>),由上述维数定义得到分维 D=ln2/ln3=0.631 上述规则分形符合豪斯道夫维数大于拓朴维数的定义。Cantor 集是无限多点形成的点集，其总长度趋于零，按照拓扑学的图形的概念，这个集可无限地收缩，它的拓扑维数为零，它的豪斯道夫维数为 0.63。

布朗运动 R<sup>2</sup>=Nb 或 N=(R/b)<sup>2</sup>。这是一个步数 N 和无量纲约化总位移(R/b)之间的关系式，N 相当于图形包含的单元数，R/b 相当于图形尺寸放大的倍数，令lnN ~ ln(R/b)曲线，得到的斜率为 2，因此布朗运动的分维为 2。

在一维情形下，显然，随着总步数 N 的增大，被访问的一维格

点数 N'也增大，统计结果得出：N'∝ N<sup>0.5</sup>。N'比 N 小得多，这是因为离原点近的格点，被访问的次数愈多，而且不同格点被访问的概率符合正态分布（高斯分布），而原点位置是被访问概率最大的点。

在二维情形下，格点上的运动粒子可以向 4 个最近邻随机运动，当总步数 N 很大时，得到的访问点分布图形的回转半径 Rg∝ N<sup>0.5</sup>,这个结果和等非步长布朗运动的结果是一致的。二维情形下被访问的格点数 N 为 N' ∝ N / log N。N'比 N 小不少，这是因为二维布朗运动可以以离原点较近的格点访问多次，但其概率比一维情形下访问的概率要小得多。

在三维到高维情形下，运动粒子有充分多的方向上的格点去访问，重复访问的概率实际上将降到 0，所以访问格点数实际上等于总步数，即 N' ∝ N。重复访问的分维数与它所处的欧几里德空间维数 d 是无关的，因此这个分维数 D 是一个普适常数。但是重访维数 N' 在不同空间维数时与总步数 N 存在着不同的关系。这实质上反映布朗轨迹的任何结构是与其所处的空间维数 d 有着密切的联系。在一维情形下，回避随机行走无法进行，高分子只能沿它的轴不断生长下去。二维、三维以至高维情形下，理论分析得出回转半径 Rg 为 Rg=N<sup>1/D</sup>；这里的 D 是分形维数，并且它与空间维数 d 有以下关系 D=(d+2)/3，d≥3 时，D 恒为 2。

粗糙曲线的图观维数：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r 尺寸为 s 后丈量，得到更大的 N(s)。如果作 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<sup>ε</sup>·(D)。这样测定的分维被称为图观维数。

从周长-正面积或表面积-体积关系求分维：规则图形(圆、正方形等)的周长 P 与测量单位尺寸 ε 的一次方成正比，而面积 A 则与ε 的二次方成正比。P∝ A<sup>0.5</sup>。如果在二维空间时的不规则分形的周长和面积。






log
⁡
(
P
(
ε
)
/
ε
)


D



=
log
⁡
(

a

0



+
log
⁡
(


A
(
ε
)


ε


)


)


D


这里分维 D> 1(周光滑时 D=1)，a<sub>0</sub>和形状有关，ε是测量尺寸。

推广到三维，对于表面积-体积的情况，






log
⁡
(

a

0



+
log
⁡
(


V
(
ε
)


ε


)


)


D



=
log
⁡
(

a

0


)
+
log
⁡
(


V
(
ε
)


ε


)


D

盒计数法：将尺寸分别为 s=1/4 和 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 N(1/8)=60。不断减小网格尺寸 s 继续计数含图形像素的方格数 N(s),直至最小的网格尺寸达到象素为止。为了减少误差，应该使不同尺寸 r 的网格能覆盖相同大小的图形，如 512×512 象素的图形的 s 应当是 1，1/2，1/4，，直到降到 1/512。数据作 ln(N(s))~ln(1/s)图，如能得到一条直线，它说明 Ns 和 s：N~(1/ε<sup>D</sup>)

Sandbox 法：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（如 DLA 图形)上，计数不同方框（或圆）中象素数 N(即以象素为测量单元)，在 lnN ~lnr 图上如有直线部分，则在此范围内存在 N~r<sup>α</sup>D，直线部分的斜率即分形维数 D。sandbox 法适合用于单个生长图形。

面积-回转半径法：对含有许多个团簇的图形，除了用上述盒计数法计算整个图形的分维之外，也可用面积-回转半径法计算分维，这样的计算还可以具体地指明图中大小不同的各团簇的分布并给出外方图，此法利用通常的图像处理软件把各个分形（团簇）的面积 N 和回转半径 Rg 计算出来，作 lnN ~lnR<sub>g</sub>图，如有直线部分，此部分的斜率就是分维 D。

回转半径定义为到中心距离的方维。

变换法：此法设置宽为 R 的矩形（盒子）覆盖到分形曲线上，矩形的高度由分形曲线在框内的最高点和最低点决定。一步一步移动矩形遍及所有象素点，将所有矩形的高和宽相乘并且加起来得到总面积 S(R)。系列地改变 R 的大小后重复以上操作，得到一系列 S(R)。上述操作过程中矩形经过的范围应远远大于矩形的宽度。将 S(R)除以 R<sup>α2</sup>得到

N(R)=S(R)/R<sup>α2</sup>，作 1nN(R)~ln(1/R)曲线，取其中线性部分的斜率为分维 D。

变换法可以推广到粗糙曲面的分维计算。此时测量用的矩形被正方柱代替，正方柱的底面取为 1×1，3×3……一步一步移动正方柱遍及所有象素点，正方柱的高度由正方柱范围内粗糙曲面的最高点和最低点决定，将所有正方柱的体积加起来得到总体积 Q(R)。逐步改变 R 的大小后重复以上操作，得到一系列 Q(R)。上述操作过程中柱体经过的范围应远远大于 R，Q(R)除以 R<sup>α3</sup>得到 N(R)=Q(R)/R<sup>α3</sup>，这里的 N(R)实际上就是覆盖一部分粗糙曲面所需的体积为 R 的盒子数。作 1n N(R) ~1n(1/R)曲线，其中线性部分的斜率为分维 D。

密度-密度相关函数法:作为一个特例，可以在 C(r)中把 r'固定下来并把它它取为图形的中心(即取 r'=0),此时的密度-密度相关函数为:C(r)=ρ(0)ρ(r)。它表示重心为圆心、r 为半径的圆周上的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)~r<sup>αa</sup>。如果把固定中心后的 C(r)在回转半径 R 内积分，在 R 足够大时，积分值很接近于和图形总象素数 C 成正比，即∫<sub>0</sub><sup>R</sup> C(r) d<sup>d</sup>r ∝ N<sub>a</sub>。这里的上标 d 是欧氏空间维数。于是得到 N∝ R<sup>d-α</sup> 此时分维 D 为 d-α。由此可见,密度-密度相关函数法求 D 时 ln[C(r)]~lnr 图,从直线部分的斜率中得到α值,再根据上式求出分维 D。

标度不变性: f(λr) = λ<sup>m</sup>f(r)，满足这一性质的是幂函数

林氏系统：L 系统由三部分{V，ω，P}组成。V 是各种符号，用来表示所要模拟事物的最基本结构，如 F 表示从当前位置向前走一步，同时画线，一表示从当前方向向右转一个给定的角度。ω是被称为“公理”的符号串。P 是生成规则（或替换规则），按一定的生成规则多次作用，最后产生一个较长的命令串，用它来生成图形。作用一次称为一级。

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
	原地转 180°
l	将当前状态压进栈（当前状态存储起来）
j	将图形状态重置为栈顶的状态，并去掉栈中的内容

Sierpin[<sup>1</sup>；Sierpinski 三角毯

Angle 6°；角度增量是 60°

Axiom FXF-FF-FF<sup>1</sup>；初始图形是一个三角形，X 是替换中的中间变量，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;结果

迭代函数系统绘制分形图形:迭代函数系统采用确定性算法与随机性算法相结合。“确定性”指用以迭代的规则是确定性的，它们由一组仿射变换(如 R1，R2，R3 等等) 构成；“随机性”指迭代过程是不确定的，每一次迭代用哪个规则是随机的。设最终要生成的图形为 M，它要满足下述几何方程:M=R1UR2U...Urn。迭代时仿射变换应该用收缩变换。

A
=
(


a


c


b


d


)
=
(


cos
⁡
θ


−
sin
⁡
θ


tan
⁡
1


tan
⁡
1


)
(


1


0


0


12


)


，分别是旋转，扭曲，拉伸

实际上确定系数时可以选择变换前和变换后的点来解方程R(<sup>x</sup><sub>y</sub>) = (<sup>a</sup><sub>c</sub> <sup>b</sup><sub>d</sub>)(<sup>x</sup><sub>y</sub>) + (<sup>e</sup><sub>f</sub>)

为了使得迭代高效、迅速，概率的大小应与仿射变换的图形压缩率成正比。图形压缩率就是前文说的|det(A)|，对于 N=4 的情况，它有 4 个。一般 p 可法确定。




P

i


=



1


Σ

i


|
det
(

A

i


)
|

如果遇到某个 det=0，可以把 p 设成一个很小的数。

元胞自动机是定义在一个具有离散、有限状态的元胞组成的元胞空间上，并按照一定局部规则，在离散的时间维上演化的动力学系统。

一维元胞自动机：一维状态链，演化规则的半径为 r=1，包括自身共 3 个近邻。若每个位置可有 2 个状态，则这 3 个近邻可以取 2<sup>3</sup>=8 种排列，对每一种排列，下一个时刻可以取 2 个不同的值，因此一共有 2<sup>8</sup>(2<sup>3</sup>)=256 个不同的元胞自动机。K<sup>α</sup>[k<sup>α</sup>(2r+1)]。

r=1，k=2 的 256 种元胞自动机的编号规则：第一，

第二行是当前状态，第三行是中间元包下一时刻状

态，第四行是二转十

元胞自动机可用周期性边界条件、反射型边界条件

或者定值型边界条件

willson 一维分形元胞自动机：令 q<sup>1</sup>(s) = (1 + s)<sup>1</sup>,

s<sup>k</sup>(k)前系数为偶数为 0，奇数为 1，则多项式系数的演化对应着 Sierpinski 三角地毯，其分形维数为 ln3/ ln 2。

二维元胞自动机：表决与退火：初始状态是在正方形网格上随机分布的一些白点 o 和黑点●，生长的规则是在最近邻和次邻及其本身共 9 个网格点上采用少数服从多数的规则,来决定中心座下一时刻是●还是 o，即 5 个及 5 个以上●得●，5 个及 5 个以上 o 得 o。可研究逾渗 Q2 规则——Ising 自旋动力学模型：正方形网格上每个格位拥有一个向上自旋或向下自旋。系统中与自旋相关的来自自旋对的耦合：相同自旋排列能量为-J，相反自旋排列能量为 J。演化规则要求保持局部能量守恒，当且仅当不引起任何能量交换时，自旋 si 才可翻转，在时间 t+1 时刻变成 1-si。因此，如果自旋向上的邻居数和自旋向下的邻居数相同时，则自旋 si 翻转，自旋的这种变化没有引起任何能量交换。

格子气自动机：在二维正方形网格上模拟流体粒子的运动。每个格位上的粒子只能向四个方向之一运动(图 13)。t 时刻，可以用 4 位数字表示格位信息 s(r,t)，如 s(r,t)=(1011)表示有 3 个粒子分别沿 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。。HPP 规则还捕捉了粒子交互作用的微观性质的另一重要要素:时间逆转过程中的不变性，即当所有粒子的运动方向都反转时，系统将重新回到它的原始状态。HPP 模型采用正方格子，不能模拟各向同性。

沙堆规则：沙堆规则是用来模拟像沙粒一样的颗粒的基本堆积和倒塌现象。其基本思想是:如果颗粒的排列是稳定的，则可以向上堆叠。堆积和倒塌由 2x2 邻接的单元块内的状态决定。图 18 给出沙堆规则可能的实现方案，它们说明了构形自倒塌而进行的演化。这里，将单元块上步是两种粒子，下部为空的构形处理成率规则(颗粒间可能存在一定的摩擦力，具有某种“成拱”作用，延迟倒塌)，产生的结果更接近实际行为。当然，实际模拟中，需要引入一个基础面

Langton 蚂蚁规则：蚂蚁在正方网格上运动，格位是白色或黑色。演化规则是在白色元胞中，蚂蚁向左转 90 度；在黑色元胞中，蚂蚁向右转 90 度；蚂蚁移动进入下一个元胞时，原来的元胞颜色反转(原来白色的,变为黑色，原黑变白。

为了考虑多蚂蚁情况,考虑扩展的 Langton 规则：格位的颜色是黑色，进入格位的蚂蚁(至多 4 个)全部右转 90 度，格位的颜色是白色，进入格位全部左转 90 度，格位的颜色依据蚂蚁存在的数目进行修改(如原来白色的，有 1 个或 3 个蚂蚁变为黑色，有 2 个或 4 个蚂蚁保持白色;如原来黑色的，有 1 个或 3 个蚂蚁变为白色，有 2 个或 4 个蚂蚁保持黑色)。

森林火灾模型：定义在正方网格上，每个格位用未燃烧的树、正在燃烧的树和空状态填充。演化规则是：下一时刻，正在燃烧的树变成空格位；如果绿树格位的最近邻居中有一个树在燃烧，则它变成正在燃烧的树；在空格位，树以概率 p 生长;在最近的邻居中没有正在燃烧的树的情况下，树在每一时步以概率 f(闪电)变为正在燃烧的树。

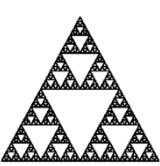
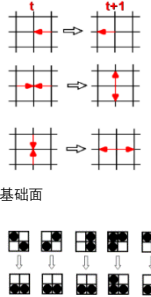


图 3.19 Sierpinski 三角毯



管虫礁模型：模型中用●代表管虫的活动状态，o 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 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，计时器保 0，直到再次受到足够强烈的刺激为止。

圆周元胞自动机：在正方点阵中心放置一粒种子，其值设为 1，用黑点表示。所有在  $(i-1+\delta, i+\delta]$  半开半闭的圆环内（圆环宽度为 1， $i=1, 2, 3\cdots$  表示圆环增大， $0\leq\delta\leq 1$ ）的点是将要被考虑生长或不生长的点的位置。各个点四个最近邻中有且只有一个位置是黑点时该局域点将会生长，而没有最近邻是黑点或两、三个最近邻都是黑点时则不会生长。此条件可以被称为中间程度拥挤条件。每一个  $(i-1+\delta, i+\delta]$  环中选择位置的顺序可以是顺时针、反时针或从上到下从左到右的扫描方式。为了方便起见，以下将第三种顺序简称为逐行扫描方式。这个模型中有两个可变的初始条件。一个是初值  $\delta$ ，另一个是上述的环内选择的生长顺序。圆周元胞自动机对初值十分敏感，表现出混沌行为。

