```
Monte Carlo 方法: 采用随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 理想气体: RDF 为抛物线;非晶体: r 较小时有小峰, r 很大时趋于抛物线
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    设在空点阵上随机添加上一个粒子使得格点成为占据态,如果不存在上下端连接路径,则在剩余的空格子内随
 个单独事件的结果
                                                                                                                                                                                                                           晶体: 很多狄拉克函数
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     机地再添加一个粒子,产生一个新的构型。当有 m 个粒子时出现上下通路,那么对于 n>=m 的粒子,
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     k(n)=k(n)+1, 直到可以穷尽所有的构型; 为了提高速度, 在 b 很大时可以让 m~NP 时再进行计算
 Schrage: (q=127773,r=2836)
                                                                                                                                                                                                                           Flory-Fisher 平均场理论
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    键-座逾渗的重整化群; 既有阀门在通道处, 也有阀门在接口处
m=aq+r, q=[m/a],r=m mod a。如 2147483647=16807*127773+2836.
                                                                                                                                                                                                                           将链段的空间看做是按照光滑的高斯型概率分布在质心周围,然后利用配分函数求最佳构型
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  协方差 \operatorname{cov}(x,y) = \langle xyy - \langle xx \rangle - y; 相关系数 \operatorname{cor}(x,y) = \frac{\operatorname{cov}(x,y)}{\operatorname{sgrtvarxvary}}, \sigma_{\leq x>} = \frac{\sigma_{x_1}}{\sqrt{N}}, \operatorname{var}(x+y) = \operatorname{var}(x) + \operatorname{var}(y) + 2\operatorname{cov}(x,y); \lim_{N \to \infty} P\left(\frac{\sum_i x_i - Ny}{\sqrt{Np(1-p)}} < z\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{z} e^{-x^2/2} \, dx
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=\{z/q*(aq+r)-rz/q\} mod \ m=\{z/q*(aq+r
                                                                                                                                                                                                                           设 N 个链段以恒定的密度~N/R^d 分布在半径为 R 的球体内,则排斥势能为 U=U_0N^2/R^d。配分函数
={a(z mod q)-r[z/q]}mod m=\begin{cases} a(z mod q) - r[z/q] & \text{if } >= 0 \\ a(z mod q) - r[z/q] + m \end{cases}
                                                                                                                                                                                                                           z(R)=RDF_d(R)<exp(-\beta U)>
                                                                                                                                                                                                                           Z(R) = C_d R^{d-1} exp(-dR^2/2l^2N) exp(-U_0N^2/R^dk_BT)
也可以当 4 字节整数超过 2^31-1 时只保留后 32 位。如果是复数就加 2*31-1 再加 1。该方法应取奇数种子值使 自由能 F=-k<sub>B</sub>TlnZ取最小值时对应最可几位形
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     随机行走的自相关系数: C(t)=cov{A(t),A(0)}=<A(t)A(0)>-<A>^2
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    自发回归涨落:<A(t)A(0)>=<A^{2}>t=0
(<A^{2}>t=0)
第一耗散涨落定理:<d×Vdt, \frac{d< x^{2}}{dt} = 2 < XV >,
                                                                                                                                                                                                                           \frac{R^2}{L^2N} = \frac{U_*0}{k_BT} * N^2/R^4 + (d-1)/d; 当 v>0.5 时,右二项对于大 N 可以忽略
 Tausworthe 位移计数器 I_n=I_{n-p} 与或 I_{n-q}。R250 产生器: p=250, q=103
                                                                                                                                                                                                                           R^2/(I^2N)=U_0N^2/(R_d*k_BT); v=3/(d+2)。当 d>4 时, v=0.5;
 避开随机数列缺陷的方法:
                                                                                                                                                                                                                          Eden 牛长模型:
 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种子值,还应使循环的周
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     \frac{d}{dt}varX = \frac{d}{dt}(< X^{2}> - < X>^{2}) = 2 < XV> - 2 < X> < V> = 2cov\{X, V\}
 期错开、或者淘汰序列中任意个随机数。
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      r(t) - r(0) = \int_0^t v(t')dt'; \frac{d}{dt} var[r(t) - r(0)] =
                                                                                                                                                                                                                           癌细胞模型
 Fibonacci: I_n=I_(n-p)(操作符)I_(n-q) mod m。Fibonacci 延迟产生器的优点是周期特别长
                                                                                                                                                                                                                           占据点代表癌细胞,未占据点代表正常细胞。在周界上已占据的格点或未占据的格点以 k:1 抽取一点 A。再从
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    2cov[r(t) - r(0), v(t)] = 2 < (r(t) - r(0)) \cdot v(t) > -2 < r(t) - r(0) > < v(t) > -2 < r(t) - r(0) > < v(t) > -2 < r(t) - r(0) > < v(t) > -2 < r(t) - r(0) > < v(t) > -2 < r(t) - r(0) > < v(t) > -2 < r(t) - r(0) > < v(t) > -2 < r(t) - r(0) > < v(t) > -2 < r(t) - r(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 < v(t) > -2 < v(t) - v(0) > < v(t) > -2 
A 周边任取一点 B。将 B 改为 A 的标识。k 可以看作是癌细胞的分裂速率。
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      =2\int_{0}^{t}\langle v(t')v(0)\rangle dt'=2\int_{0}^{t}\langle v(0)*v(t-t')\rangle dt'=2\int_{0}^{t}\langle v(t')*v(0)\rangle dt''--->6D
                                                                                                                                                                                                                           随机行走解 laplace \nabla^2 \phi(x,y) = q(x,y); \quad \phi_{ij} = (\phi_{i-1j} + \phi_{ij-1} + \phi_{i+1j} + \phi_{ij+1} - h^2 q_{ij})/4
 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
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     宏观扩散系数是微观速度自相关函数的积分
                                                                                                                                                                                                                           从体系内第(Lj)格点开始游走,选邻近 4 个格点之一的 m 时,\phi_0 = \phi_m - h^2 2q_0/4 = \phi_n - h^2 2(q_0 + q_m)/4。
D=1/3\int_0^t < v(t')*v(0) > dt'; 计算自相关函数: dv/dt=-1/ta*v+A(t)
                                                                                                                                                                                                                           直到碰到边界\theta; \langle \phi_0 \rangle = \frac{1}{N} \sum \{\theta(s_n) - h^2/4 \sum q_k\}
                                                                                                                                                                                                                          levy 随机行走,步长 s 按幂次分布。p(s)=s^{(-a),if} s>1;1 if(s<1)。行走:和路程相交就固连。飞行:路程终点相交 v(t)=v(0)e^{-t} - t/ta\} - t/ta = t/ta
y\_n = y\_\{n-1\}^{**}(7654321/16777216); \ z\_n = x\_n^{**}y\_n
独立性检验: 自相关函数(线性关系) C(l) = \frac{\langle x\_nx\_\{n+l\} \rangle - \langle x\_n \rangle^2}{\langle x\_n^2 \rangle - \langle x\_n \rangle^2}
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    C(t)=1/3<v(t)v(0)>=1/3<v(0)^2>e^{-t/ta}; 计算得:
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     <v(t)>=<v(0)>e^{-t/ta}; <v^2(t)>=<v^2(0)>e^{-2t/ta}+D'ta(1-e^{-2t/ta})/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。 X^2=\sum_k \frac{(n_k-m_kk)^2}{m_k}
                                                                                                                                                                                                                           介电击穿模型: 假设已占据格点上\phi_{ij} = \phi_0, 远处为 0。需要数值求解\phi_{ij} = (\phi_{i-1j} + \phi_{ij-1} + \phi_{i+1j} + \phi_{ij-1})
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  p(v,t|v0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon\sigma^2}} exp(-\frac{(v-v,0\eta)^2}{2\sigma^2 \epsilon}), \quad \sigma^2 = 2D'ta, \eta = e^{-t/ta}, \quad \epsilon = 1 - \eta^2 t 趋于无穷时,p(v) = \sqrt{\frac{n}{2\pi KT}} exp(-\frac{mv}{2KT})
                                                                                                                                                                                                                          \phi_{ij+1})/4。假设格点扩散的速率为
 X^2 很大时,表示远远偏离理想值,X^2 很小时,代表有可能 N 已经陷入循环。通常使得求和中每一项约为
                                                                                                                                                                                                                           v_[I,j]=n*abs(\phi_0-\phi_{I,j})^a。然后环绕已经占据的格点周界上计算扩散速率。然后根据该速率的比值来选
 1, 此时 X^2=K。X^2 的极限分布是卡方分布, 自由度 v=K-1
                                                                                                                                                                                                                           取一个格点进行占据。
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。把 S 维空间中的
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    第二耗散涨落定理:摩擦阻力和涨落有关,摩擦越小,涨落越大
                                                                                                                                                                                                                           散射截面波恩近似;f(θ)=-(m/2{hbar}^2pi)\int drV(r)exp(iqr), q=2ksin(\theta/2)
 单位立方分割成 K 个子立方体。K_0=K^{-1/s}是边长。理论频数 m_k=N/K。同样可以这样子统计
                                                                                                                                                                                                                          卢瑟福散射:\frac{d\sigma}{d \setminus Omega} = \frac{Z^{\wedge}2e^{\wedge}4}{4E^{\wedge}2(1-\cos\theta+2e^{\wedge}2)},自由程\lambda=1/(N\sigma),sigma:总散射截面
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    mdv/dt=-1/Bv+F; r*dv/dt=1/2*d^2/dt^2(r^2)-v^2=d/dt(r*v)-v^2
                                                                                                                                                                                                                          poisson 分布抽样: \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\alpha^i}{i!} < e^{\alpha} \varepsilon \sum_{i=0}^{n} \frac{\alpha^i}{i!};
 指数分布抽样: p(x)=1/lambda*exp(-x/lambda); x=-lambda*ln(1-ε)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     所以特征时间段内为直线行走,长时间是随机行走。
变换抽样法: p(x)=\frac{dy}{dx}g(y);p(x,y)=|(\langle x,y\rangle, y\rangle)| ((\langle x,y\rangle, y\rangle, y\rangle)|
                                                                                                                                                                                                                          (-dE/dS)=N\sum_N\int\hbar\omega_nd\sigma_n=(2pie^4NZ/E)^*In(1.166E/I)。I:平均电离能
                                                                                                                                                                                                                          Gryzinski: 模拟原子电离,模拟能量损失的微分截面
 寻找 x=x(u,v),y=y(u,v),使得 p(x,y)=|(\partial u,v)/(\partial x,y)|,再对 u, v 进行均匀抽样,回代
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    d=1 \text{ $\mathbb{B}^{+}_{7}$, $$ $n_s=(1-p)^2p^s$; $$ $S=\frac{\sum_{S}^{2}(1-p)^2p^nS}{\sum_{S}(1-p)^2p^nS} = \frac{\sum_{S}^{2}p^nS}{\sum_{S}p^nS} = \frac{(p\frac{d}{dp})^{2}\sum_{P}^{2}S}{p\frac{d}{dp}\sum_{P}^{2}S} = \frac{1+p}{1-p} = \frac{p_{c}c+p}{p_{c}c-p}; $$ $$ $\mathsf{gamma}=1$ $$
                                                                                                                                                                                                                          \frac{d\sigma_n}{d\Delta E} = \pi e^{\Lambda} 4 z_n \frac{1}{\Delta E^3} \frac{E_n}{E} \left(\frac{E}{E+E_n}\right)^{1.5} \left(1 - \frac{\Delta E}{E}\right)^{E_n/(E_n + \Delta E)} * \left[\frac{\Delta E}{E_n} \left(1 - \frac{E_n}{E}\right) + \frac{4}{3} ln(2.7 + \sqrt{\frac{E-\Delta E}{E_n}})\right] \cdot z_n 为 E_n 球壳的电子数
设 u, v 为[0,1]上的均匀随机数, x=\sqrt{-2lnu}cos(2\piv), y=\sqrt{-2lnu}sin(2\piv)
 |(\hat y)| = 1/(2pi) \exp(-x^2/2 + y^2/2)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    任一格点属于无限大集团的概率:
國环上的代数曲样法:取 u、v[0,1]。计算 r^2=u^2+v^2。如果 r^2<1。则 x=u/r, y=v/r。(可以将该方法用到上 总电离截面 N\sigma_n=N\int_{E_n}^E d\sigma=\pi e^{\Lambda}4Nz_n\frac{1}{E_n}\frac{E_n}{e}(\frac{E-E_n}{E+E_n})^{1.5}[1+2/3*(1-\frac{E_n}{2E})ln(2.7+\sqrt{\frac{E}{E_n}}-1)]
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     P_{\inf} + \sum sn_s = p; \ \ d=1, p_c=1, \ n_s=(1-p)^2p^s; \ \ p < p_c \ \ \exists \ ; \ \ P_{\inf} = p-(1-p)^2\sum sp^s = 0; \ \ beta=0 
 面的 guass 中代替三角函数运算);
                                                                                                                                                                                                                          阻止本领: (-dE/dS)=N\int_{E_n}^E\Delta Ed\sigma=\pi e^{\Lambda}4Nz_n\frac{1}{E}(\frac{E-E_n}{E+E_n})^{1.5}\left[ln(E/E_n)+4/3*ln(2.7+\int_{E}^{V-n}\frac{1}{E_n}-1)\right]
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     关联函数: S=\sum_r g(r), g(r)为距离为 r 的格点属于同一有限集团的概率
对于三维球面: u, v[0,1], 计算 r^2=u^2+v^2, 选取 r<1。x=2u\sqrt{1-r^2},y=2v\sqrt{1-r^2}z=1-2r^2。
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     g(r)=p^r=exp(-r/epsilon), epsilon 为关联长度; epsilon=-1/lnp=-1/ln[p_c-(p_c-p)]=-1/ln(1-x)~(p_c-p)^{-1}; v=-1
                                                                                                                                                                                                                          介电函数模型: \omega描述能量损失, q 描述动量转移 \frac{d^2\sigma_{in}}{d(\hbar\omega)d\sigma} = \frac{1}{\pi a_s E} Im(\frac{-1}{\varepsilon(a_s\omega)}) \frac{1}{a}
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    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
 y_1,y_1[0,1]; y_3,y_4[0,1]; 取 r_1^2=y_1^2+y_2^2<1;r_2^2=y_3^2+y_4^2<1
                                                                                                                                                                                                                          电子气 Drude 模型: 把原子核周围的电子云看做有阻尼的简谐振子
  x\_1 = y\_1, x\_2 = y\_2, x\_3 = (y\_3/r^2) \setminus \{1-r\_1^2\}, x\_4 = (y\_4/r\_2) \setminus \{1-r\_1^2\} 
                                                                                                                                                                                                                           m \backslash ddot\{r\} \ + m \backslash gamma \ \backslash dot\{r\} + m\omega_0 ^2r = -e \backslash vec\{E\}
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     观态中,对应微正则系综<A>=\frac{1}{0}\int Ad\Omega; 另外一种可能是\rho=\rho(H),对应正则系综\rho\sim\exp(-H/kT)
                                               \int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y) dy
舍选抽样法: 设 p(x) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} g(x,y)dy}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} g(x,y)dy}。由 g(x,y)产生一堆抽样值,如在[0,1]内生成 a,b;
                                                                                                                                                                                                                          假设 r 的运动也为 e 指数形式,得 \vec{r}=-\frac{e\vec{E}/m}{(\omega_0^2-\omega^2)-i\gamma\backslash \mathrm{omega}}
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     正则系综: F(N,V,T), 恒温热浴; 微正则系综: S(N,V,E), 无能量与粒子交换
a=\int_{-\infty}^{x_1}dx\int_{-\infty}^{+\infty}g(x,y)dy,b=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{y_1}g(x,y)dy。判断 y1<h(x1)是否成立,成立则取 x1 为抽样
                                                                                                                                                                                                                          则宏观极化率: \frac{e^{\Lambda 2N/m}}{(\omega_0^2-\omega^2)-(i \lor omega)}; \epsilon=1+\frac{4me^22N/m}{(\omega_0^2-\omega^2)-i \lor omega}; 对于自由电子金属,取\omega_0^2=0。
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    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)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     微正则系综: N 个粒子放入体积为 V 的盒子内, 固定总能量 E
 在上式中,取 h(x)为 p(x),g(x,y)为均匀分布,可得简单的舍选抽样法
                                                                                                                                                                                                                           粒子输运的 Monte Carlo 模拟:
假设函数在区间[a,b]上有界 M,取 g(x,y)=1/[M(b-a)]。对 g 抽样,则 x=a+epsilon*(b-a), y=epsilon*M。判断 y<p(x)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     假设:对于孤立体系的平衡态求统计平均时,认为相空间中能量曲面 E 和 E+\delta E 之间相等的体积几率相
                                                                                                                                                                                                                           设已由弹性散射和费弹性散射求得了平均每个原子的总截面;\sigma_t = \sigma_{el} + \sigma_{in},平均自由程\lambda_t^{-1} = \lambda_{el}^{-1} + \lambda_{in}^{-1};考等,定义相空间体积:
                                                                                                                                                                                                                           虑强度为 I 的粒子穿过物质后,dl=-IN\sigma_t ds
 特别地,对于 p(x)=2x,x[0,1].M=2.根据舍选抽样法有条件 kexi2<kexi1 时,抽取 x=kexi1。但由于对称性,可以选
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    \Omega(E) = \int d\Omega |H < E, \int d\Omega |delta E = \Omega(E + dE) - \Omega(E) = \Omega'(E) dE
                                                                                                                                                                                                                           所以考虑步长为指数函数 p(s)=\lambda_t^{-1}exp(-s\lambda_t^{-1}); 然后利用\lambda_{el}^{-1}+\lambda_{in}^{-1}的大小关系来抽取是弹性散射还是非弹性
 x=max(kexi1,kexi2)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    由几率密度归一化, \rho = 1/[\Omega'(E)\Delta E], E<H<E+ \Delta E
                                                                                                                                                                                                                           散射; 对于弹性散射, 抽取角度 \varepsilon = \int_0^\alpha (d\sigma/d \omega) \sin\theta d\theta
 比较函数:设 F(x)形状和 p 相似但处处比 p 大,则先抽取出满足 F(x)分布的 xx,再 yy=epsilon*F(xx)。如果
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    <A>=\frac{1}{\Omega'(E)}\lim_{\Delta E \to >0} \frac{1}{\Delta E} \int Ad\Omega |\Delta E|, \Delta E \to 0, \rho = \mathbb{Z}_{-NVE}^{-1} \delta(H - E)
                                                                                                                                                                                                                          对于非弹性散射,类似的抽取角度和能量损失;在非弹性散射中,可以认为电子每失去 E 的能量,就会有一个
 yy<p(xx), 则选取 xx。
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    Z_{NVE} = \int \delta(H - E) d\Omega = \Omega'(E)
                                                                                                                                                                                                                           能量为 E 的电子从当前位置发射。可以先追踪一个电子的轨迹,再追踪二次电子的轨迹
 乘分布: p(x)=h(x)q(x), q 归一可积。h(x)上界为 M; 取 g(x,y)=q(x)/M, 0<y<M; 0 otherwise
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     配分函数等于总能量恰为 E 时候的微观状态数;体系的特征函数是熵,S=klnZ_{NVE}
                                                                                                                                                                                                                           简化模型:截面只考虑弹性散射,在行走的过程中根据 Bethe 阻止本领来计算损失的能量
抽取 xx 服从 q 分布,yy=M*epsilon。判断 yy<h(xx)是否成立。如p(x)=\frac{2\beta^{1.5}}{\sqrt{\pi}}\sqrt{x}e^{-\beta x}
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     根据 dE=Tds-Pdv+mudN, T=(\frac{\partial S}{\partial P})^{-1}_{-1}\{NV\}, P=T(\frac{\partial S}{\partial V})_{-1}\{EN\}, \mu=-T(\frac{\partial S}{\partial N})_{-1}\{EV\}
                                                                                                                                                                                                                           杂化模型: 只考虑内壳层电离(Gryzinski), 等离激元(Drude)等非弹性散射
取 q=2beta/3*exp(-2beta x/3)
                                                                                                                                                                                                                           然后剩余非弹性散射用 bethe 模型的预估值减去上述两种模型的预估值来模拟
 积分: (如何推广) \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{N} \sum_i f(x_i)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     可以将体系和热源合在一起看成是一个微正则系综,E_0=E+E_h 恒定,大体系相体积为 d\Omega d\Omega_h;
大数定理: \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{i}f_{i}=\mu; 中心极限定理: P\{\left|\frac{< f>-\mu}{\sigma/\sqrt{N}}\right|<\beta\}-> \emptyset(\beta)
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   <\!\!A\!\!>=\!\!\frac{1}{\Omega'(E_0)}\lim_{\Delta E\to 0}\frac{1}{\Delta E}\int Ad\Omega d\Omega\_h|\,\Delta=\frac{1}{\Omega'(E\_0)}\int Ad\Omega\lim_{\Delta E\to 0}\frac{1}{\Delta E}\int d\Omega_h|\Delta E=\frac{1}{\Omega'(E\_0)}\int A\Omega_h'(E\_h)d\Omega'
                                                                                                                                                                                                                           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) = 
                                                                                                                                                                                                                          sn_s/\Sigma_s sn_s, (排除无限大); 集团平均大小 S=\Sigma_s sw_s, 当占据概率为 p 时,点阵上任意一点属于无限大集团的 所以,\rho = \frac{n_s(E,b)}{n'(E,0)}, 假设热浴很大,E/E_0 = 1-E_b/E_0 < 1 概率 完 V 为验券概率 P_s V 为验券概率 P_s V V
 提取法: \int f dx = \int (f - g) dx + \int g dx (使得 f-g 较为平坦)
 重要抽样法: \int f dx = \int \frac{f}{g} g dx = \langle f/g \rangle
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    \ln(\Omega_h'(E_h)) = \ln(\Omega_{h(E_0)}') + \frac{\partial \ln \Omega_h'}{\partial E_h} \big|_{E_h = E_0} (E_h - E_0)
                                                                                                                                                                                                                           集团的标识: 用二维数组 A_ij 来标识格点所处的 i 行和 j 列,取值是集团序号。从左下角(1,1)处开始向右填
 权重 mont、e carlo 积分: 设 dy=g(x)dx,使[a,b]->[0,c]; \int_a^b f dx = \int_a^b \frac{f}{a} g dx = \int_0^c \frac{f}{a} dy
                                                                                                                                                                                                                          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,如果它下由于大体系可以看作微正则系统,beta=1/kT=1/k^* \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial \ln \Omega'}{\partial E} 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。 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。
\begin{array}{l} \text{m}\ddot{x} = F_x - \alpha \dot{x}; \quad x\ddot{x} = 1/2 \frac{d^2}{dt^2}(x^2) - \dot{x}^2; \quad 1/2 \frac{d^2}{dt^2}(mx^2) - (m\dot{x}^2) = < xF_z > -\frac{1}{2}\alpha \frac{d}{dt} < x^2 > \frac{d^2}{dt^2} < x^2 > + \frac{\alpha}{m} \frac{d}{dt} < x^2 \geq \frac{2kT}{m}; \quad < x^2 > \sim \frac{2kT}{a}t \\ - \frac{\alpha}{2} \times (x/k) = (q-p)Ni; \quad < x/2(N) > = 4pqNi^2 + N^2 2^2(q-p)^2 \end{array}
                                                                                                                                                                                                                          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
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    P_{\infty}(p){\sim}(p-p_c)^{\beta}, \ \ {\rm beta<1}; \ \ \sigma(p)=(p-p_c)^t, \ \ {\rm t>1}
                                                                                                                                                                                                                          定义集团跨越长度\xi^2=rac{\sum_s s^2 n_s R_s^2}{\sum_s s^2 n_s}, R_s 为某个集团的回转半径,\xi=abs(p-p_c)^{-v},集团平均大小 S(p)=
由扩散方程 \frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}。 两边乘 x 与 x^2 分部积分,<x(t)>=0,<x^2(t)>=2Dt
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     <A>_{NVT}=Z^{-1}_{-NVT}\int A(q,p)e^{-H}d\Omega
                                                                                                                                                                                                                          abs(p-p_c)^{-\backslash gamma}。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 < < L时,
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    Z_{NVT} = \int exp(-\beta H)d\Omega = \int exp(-\beta H)\Omega'(E)dE = \int exp(-\beta H)Z_{NVE}dE
 扩散方程的解是高斯函数, sigma=\sqrt{2Dt}
                                                                                                                                                                                                                          P_{oc}(p)\sim(p-p_c)^{eta},~\xi=abs(p-p_c)^{-v}是成立的,当\xi\simL时,abs(p-p_c)=L^{-1/v}。P_{oc}(p)\sim L^{-\beta/v},再根据标度 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
熵: S=-\sum_i p_i ln(p_i).(平面上划分网格,pi 为 i 格子里面的粒子数除总数);随机行走指数律< r^2(N) >=
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    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
                                                                                                                                                                                                                          律求指数
 aN^{2v}(1+bN^{-\Delta})
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    时候,两系统的平均值相等。
                                                                                                                                                                                                                          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。
权重法:
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    正则系综的特征函数是自由能 F
                                                                                                                                                                                                                           齐次函数就是幂指数函数;标度律:2\beta+\gamma=vd
1、起始一步权重为 w(1)=1; 2、自相交时 w(N)=0, 再重新选择另外一条路径; 3、如果可以选择 3 个方向:
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     E = -kT lnZ_{\{NVT\},F} = E - TS; \quad S = -(\frac{\partial F}{\partial T})_{NV}, \quad P = -(\frac{\partial F}{\partial V})_{NT}, \quad \mu = -(\frac{\partial F}{\partial N})_{VT}, \quad \mu = -(\frac{\partial F
                                                                                                                                                                                                                           重整化: p'=R(p), p^*=R(p^*), v=\frac{lnb}{ln(dp'/dp)}
w(N)=w(N-1); 4、其他情况 w(N)=(m/3)*w(N-1); 5、最后对行走数 i 进行求和< r^2(N)>=\frac{\sum_i w_i(N)r_i^2(N)}{n}
                                                                                                                                                                                                                          Monte Carlo 重整化方法: - 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); 总能量 E=F+TS=F+T(\frac{\partial F}{\partial T})_{NV}=-T^2(\frac{\partial}{\partial T}(\frac{F}{T})_{NV})_{NV}; < E> = \frac{\int He^{-\rho H}d\Omega}{\int e^{-\rho H}d\Omega}
 由于标度律r_{rms} = lN^{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
                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     C_{V} = \frac{\partial E}{\partial T} = -T(\frac{\partial^{2} F}{\partial T^{2}})_{NV} = \frac{-1}{kT^{2}} \frac{\partial^{2} \ln Z}{\partial \beta^{2}} = \frac{1}{kT^{2}} \frac{(\frac{\int exp(-\beta H)H^{2}d\Omega}{\int exp(-\beta H)d\Omega} - (\frac{\int Hexp(-\beta H)d\Omega}{\int exp(-\beta H)d\Omega})^{2})}{(\frac{\int exp(-\beta H)d\Omega}{\int exp(-\beta H)d\Omega})^{2}}
                                                                                                                                                                                                                          K(n): 随机占据 n 个格子的联通几率
p(r) = Aexp(-Br^2), A = (2pi/3)^{(-1.5)} * r_{rms}^{-3}, B = (3/2)r^{-2}_{rms}
```

径向分布函数 RDF(r)=4pi r^2 p(r);

 $=\frac{1}{1-T^2}[\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2]$

等温等压系综: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 由于ρ = 4πr²ροg (τ)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 $p_{\alpha} = \frac{e^{-E_{\alpha}/k_BT}}{Z(T)}$, $Z(T)=\sum_{\alpha} e^{-E_{\alpha}/k_BT}$ 能量和体积不定, 在平均值附近涨落 $u(r)\rho(r)4\pi r^2 dr$,求和再乘 N/2 后就得到所有粒子的能量总和。 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 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 自由能 $F = -k_B T \lim_{N \to \infty} \frac{1}{n} lnZ$, $M = k_B T \frac{\partial lnZ}{\partial H}$, $U = -\frac{\partial}{\partial (1/k_B T)} lnZ$, $C = \frac{\partial U}{\partial T}$, $x = \lim_{N \to \infty} \frac{\partial M}{\partial H}$ M 和休积 V n 恒定 强度量,强度量难以从 Monte Carlo 中得到, 因此我们用位力定理 $\frac{PV}{NKT}=1+\frac{1}{dNDT}\langle \sum_{l < j} r_{lj} \cdot F_{lj} \rangle =1-$ 总体系的配分函数为两个体系的配分函数之积、 Ω ;为理想气体 (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 $\text{U=<E>=} \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}, \quad \text{M=} N \mu_{B} < \sigma > = \mu_{B} \sum_{\alpha} p_{\alpha} (\sum_{i=1}^{N} \sigma_{i})_{\alpha}, \quad \langle E^{2} \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha} E_{\alpha}^{2}, \quad \text{M}^{2} = \mu_{B}^{2} \sum_{\alpha} p_{\alpha} (\sum_{i=1}^{N} \sigma_{i})_{\alpha}^{2}$ $Z_{MV-T} = \int exp(-\beta H)d\Omega \int exp(-\beta H_i)d\Omega_i$ $\int exp(-\beta H_{i})d\Omega_{i} = (\int dV \int exp(-\beta p^{2}/2m)dp)^{M-N} = [(V_{0} - V)(2\pi mkT)^{1.5}]^{M-N}$ 由于比热可以用总能的统计涨落来表示,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= 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 所以 $\rho = \frac{(V_0 - V)^{M-N} exp(-\beta H)}{\int (V_0 - V)^{M-N} dV \int exp(-\beta H) d\Omega}$, 去极限 $V_0 = 0$, $M = \inf$ $\frac{(\Delta E)^2}{k_BT^2},\;\; x=\frac{(\Delta M)^2}{k_BT};\;\; <\sigma>$ 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lpha的平均 $S(k)=1+\rho \int [g(r)-1]exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r}$ 正好是散射粒子在给定角度 θ 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 Δr ,然后扫描系统中的所有粒子对,对每一个粒子 $(V_0 - V)^{M-N} -> V_0^{M-N} (1 - \frac{V}{V_0})^{M-N} -> V_0^{M-N} \exp(-(M-N) \frac{V}{V_0}) = V_0^{M-N} \exp(-\beta pV)$ 一维 Ising 解:在没有外磁场时,E=-J $\sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1}$,设 K=J/ $k_B T$,配分函数为,S_i= $\sigma_i \sigma_{i+1} = \mp 1$; (i, j)得到其相应的距离值 $n = r_{ij}/\Delta r_o$ 然后在 g(n) 直方图上计数一次。模拟结束后归一化 g(r)。 Δr 使得接
$$\begin{split} & = \sum_{S_1 = \pm 1} \sum_{S_2 = \pm 1} \dots \sum_{S_{N-1} = \pm 1} e^{K \sum_{l=1}^{N-1} \sigma_l \sigma_{l+1}} \geq \sum_{S_1 = \pm 1} \sum_{S_2 = \pm 1} \dots \sum_{S_{N-1} = \pm 1} e^{K \sum_{l=1}^{N-1} S_l t} \\ & = 2 \sum_{S_1 = \pm 1} e^{KS_1} \sum_{S_2 = \pm 1} e^{KS_2} \dots \sum_{S_{N-1} = \pm 1} e^{KS_{N-1}} \geq (2\cos kR)^{N-1} \\ & = 2 \sum_{S_1 = \pm 1} e^{KS_1} \sum_{S_2 = \pm 1} e^{KS_2} \dots \sum_{S_{N-1} = \pm 1} e^{KS_{N-1}} \geq (2\cos kR)^{N-1} \\ & = 2 \sum_{S_1 = \pm 1} e^{KS_1} \sum_{S_2 = \pm 1} e^{KS_2} \sum_{S_2 = \pm 1} e^{KS_2} \sum_{S_1 = \pm 1} e^{KS_1} \sum_{S_2 = \pm 1} e^{KS_2} \sum_{S_2 = \pm 1$$
其中代入了气体状态方程 $\rho = \beta P$; 体系的特征函数是 $G(N,P,T)=-kTlnZ_{NPT}$ 他和其他热学量的关系是; $S=-(\frac{\partial G}{\partial T})_{NP},\ \ V=(\frac{\partial G}{\partial P})_{NT},\ \ \mu=(\frac{\partial G}{\partial N})_{PT},$ 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交叠 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 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, 巨正则系综:有确定的温度,体积,化学势,但粒子数可变。体系的总能量,化学势,粒子数存在涨落。巨正 有外磁场时,若采用周期性边界条件, $\sigma_{N+1} = \sigma_1$, 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。 $H = -\sum_{\langle i,j \rangle=1}^{N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \mu_B H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i$,设 $= \mu_B H/k_B T$,配分函数为 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 设力学体系和热浴的总能 $E_0 = E + E_s$, $N_0 = N + N_h$ 保持不变, 并且力学体系的粒子数远小于热浴的。那么几 $Z = \sum_{\sigma_1 = \overline{+}1} \sum_{\sigma_2 = \overline{+}1} \dots \dots \sum_{\sigma_N = \overline{+}1} e^{\sum_{i=1}^{N} (K \sigma_i \sigma_{i+1} + l \sigma_i)}$ 所在的元包和周边的元包内的粒子进行距离计算。 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, $\rho(\mathbf{p},\mathbf{q}) = \frac{\alpha r_{\perp} \mathbf{h}(\mathbf{E},\mathbf{h},\mathbf{N},\mathbf{h})}{\alpha r(\mathbf{E}_{\leftarrow} - \mathbf{N}_{o})}$,分子取对数,再对能量 $\mathcal{L}^2 \Sigma_{\sigma_1=1} \Sigma_{\sigma_2=1} \dots \Sigma_{\sigma_M=1}$ 艺术自旋写成向量的形式,再定义 $\mathsf{P}= \begin{pmatrix} e^{K+I} & e^{-K+I} \\ e^{-K-I} & e^{K-I} \end{pmatrix}$,配分函数可以表示为 具体的参数 Δr 和势能的形式有关。如果 Δr 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 $Z = \sum_{\sigma_1 = \mp 1} \sum_{\sigma_2 = \mp 1} \dots \dots \sum_{\sigma_N = \mp 1} \langle \sigma_1 | P | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | P | \sigma_3 \rangle \dots \dots \langle \sigma_N | P | \sigma_1 \rangle = \sum_{\sigma_1 = \mp 1} \langle \sigma_1 | P^{\wedge} N | \sigma_1 \rangle = Tr(P^{\wedge} N) = Tr(P$ $\ln(\Omega_h'(E_h,N_h))$ = $\ln(\Omega_h'(E_0,N_0))+\frac{\partial \ln\Omega_h'}{\partial E_h}|_{E_h=E_0}(-E)+\frac{\partial \ln\Omega_h'}{\partial N_h}|_{N_h=N_0}(-N)$ 由两个具有粒子交换的体系达到热平衡的热力学,化学势 μ 相等 间比接受短, 所有要增加拒绝的概率 $\lambda_+^N + \lambda_-^N$; $\lambda_{\pm} = e^K \cosh I \pm \sqrt{e^{2K} \sinh^2 I + e^{-2K}}$; 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 $F \approx ln(e^{K} coshI + \sqrt{e^{2K} sinh^{2}I + e^{-2K}})$, 它仍然是温度的解析函数, 没有相变 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 $\frac{\partial \Omega'_h}{\partial N_h} = \frac{\partial \ln \Omega'}{\partial N} = \beta \mu;$ 对应有: $\Omega'_h(E_h, N_h) = \Omega'_h(E_0, N_0) \exp[-\beta(\mu N + H)]$ Weiss 平均场理论: $H = -0.5 * \sum_{l=1}^{n} \mathcal{I}(\sigma) \sigma_l - \mu_B H \sum_{l=1}^{n} \sigma_l = -\sum_{l=1}^{n} \varepsilon(J, H) \sigma_l$ 。其中 z 是配位数, 0.5 是为了保 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 证每对自旋求和一次, $zJ(\sigma)\sigma_i$ 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 (σ) 。 巨正则的配分函数为 $Z_{\mu VT} = \sum_{N} \frac{1}{N!} \int exp(-\beta[\mu N + H])d\Omega$ 中的所有粒子进行相互作用,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rc 在此近似下, $Z=(\sum_{\sigma=\pm 1} e^{\varepsilon \sigma/k_BT})^N = [2cosh(\varepsilon \sigma/k_BT)]^N$ 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 $\rho = Z_{uVT}^{-1}(N!)^{-1}\exp(-\beta[\mu N + H]);$ 如果体系有多种粒子 $F = -k_B T \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \ln Z = -k_B T \ln(2 \cosh(\varepsilon \sigma/k_B T)) , M = k_B T \frac{\sin 2}{\partial H} = N \mu_B \tanh(\varepsilon/k_B T)$ $\text{fi} ||X| \langle \sigma \rangle = \lim_{N \to \infty} \frac{M}{N \mu_B} = \tanh(\varepsilon/k_B T) = \tanh(|z| + 0.5 \langle \sigma \rangle + \mu_B H) / (k_B T)$ $\rho = \mathbf{Z}_{\mu \mathrm{VT}}^{-1}[\prod_{i} \mathbf{N}_{i}!]^{-1} exp(-\beta[\sum_{i} \mu_{i} \mathbf{N}_{i} + H]) \; ; \; \; \mathbf{Z} = \sum_{\mathbf{N}_{i}}(\prod_{i} \frac{e^{-\beta \mu_{i} \mathbf{N}_{i}}}{\mathbf{N}_{i}!}) \int exp(-\beta[\mathbf{H}]) \mathrm{d}\Omega$ 实际上只有势能收敛快于 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。 特征函数:J=-kTlnZ=F- μ N=-PV; S= $-(\frac{\partial J}{\partial T})_{V\mu}$, P= $-(\frac{\partial J}{\partial V})_{\mu T}$, N = $-(\frac{\partial J}{\partial u})_{PT}$, 截断引起的误差为 $\Delta = N \frac{1}{2} \int_{r_{-}}^{\infty} \rho(r) u(r) 4\pi r^2 dr$ 用数值迭代法来求解该方程 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。 在温度很低时,a=2J/2kT<1 时,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。可以对于 \Box 势能,截断引起的压强贡献为 $\Delta P^{limp}=\frac{8\pi}{3}\rho^2\varepsilon\sigma^3[\left(\frac{\sigma}{r_*}\right)^9-\left(\frac{\sigma}{r_*}\right)^3]$ 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 对压强的尾部校正为 $\Delta P^{tait} = \frac{16\pi}{3} \rho^2 \epsilon \sigma^3 [\frac{2}{3} (\frac{\sigma}{r_*})^9 - (\frac{\sigma}{r_*})^3];$ 对于接近凝固的液体不适合用晶体初始条件 定义 $W_{ij} = p(x_i|x_i)$, 则 $\sum_i W_{ij} = 1$; $p_n(x_1x_2, ..., x_n) = p(x_1)W_{1,2}, ..., W_{n-1,n}$ 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 d=4。自旋系统的序参数 (σ) 和逾渗系统的 $P_\{inf\}$ 有相似行为 用约化单位制进行模拟:长度单位 σ ,能量单位 ϵ ,质量单位m,时间单位为 $\frac{\sigma}{m}$ 取 tanx=x-x^3/3, $\langle \sigma \rangle = \frac{T_c}{T} \langle \sigma \rangle - \frac{1}{2} \left[\frac{T_c}{T} \langle \sigma \rangle \right]^3$,铁磁相的解为, $\langle \sigma \rangle \sim (T_c - T)^{\circ}(\backslash beta)$, $\beta = 0.5$ 布是玻尔兹曼分布 $r^*=r/\sigma$. $u^*=u/\varepsilon$. $rho^*=rho^*\sigma^3$. $P^*=P\sigma^3/\varepsilon$. $T^*=kT/\varepsilon$ 任务就是寻找合适的转移概率矩阵 M,使其极限分布为 P。 $p(x,t+\Delta t)-p(x,t)=-\int dx'W(x->$ 求磁化率和相应的临界指数 $x=\frac{\partial M}{\partial H}=N\mu_B\frac{\partial(\sigma)}{\partial H}=N\mu_B sec \hbar^2(\varepsilon/k_BT)\frac{1}{k_BT}(\frac{zJ}{2}\frac{\partial(\sigma)}{\partial H}+\mu_B)$ $\frac{\partial(\sigma)}{\partial H}=\frac{\mu_B/k_BT}{\cosh^2(s\sigma)T_c/T)-T_c/T}, \quad H\to 0$ 的极限下, $x=\frac{2^N\mu_B^2}{xJ}\frac{T_c/T}{\cosh^2(s\sigma)T_c/T)-T_c/T}$ 在 T^cT_c 附近, $x=\frac{2^N\mu_B^2}{T_c}\frac{T}{T_c}\sim (T-T_c)^{\Lambda}-1$ verlet 列表法:引入另外一个截断半径 $r_v > r_c$,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 $x')p(x,t)\Delta t + \int dx'W(x'->x)p(x',t)\Delta t; \ \frac{\partial p}{\partial t} = \int dx' [W(x'->x)p(x',t) - W(x->x')p(x,t)] \ \mbox{该式被称为主方}$ 中心,半径为水之内的粒子的列表,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 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)=1子之间的相互作用,如果某个粒子尝试移动的量小于 $r_v - r_c$,则该粒子仍然只对 r_v 内的粒子有相互作用。 W(x->x')p(x,t). 即细致平衡解 因此只需要对表中的粒子计算即可 细致平衡解即可逆 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 证明正则系综的特征函数是亥姆霍兹自由能, 离散化, $\mathbf{p}_{_i}W_{ij}=\mathbf{p}_{_j}W_{ij}$,上式对 j 求和,结合 $\sum_i W_{ij}=1$,得 $\mathbf{p}_{_i}=\sum_i \mathbf{p}_{_j}W_{ij}$ 二维 Onsager 解: 比热等于,E_1, E_2 为 1,2 类椭圆积分; $C = \frac{4}{\pi} k_B K^2 coth^2 (2K) \{E_1(\alpha) - E_2(\alpha) - E_3(\alpha)\}$ 这样的方程有 2M 个, 但是矩阵元有 M^2 个, 所以难以求解 $sech^{2}(2K)[\frac{\pi}{2} + (2tanh(2K) - 1)E_{-}1(\alpha)]\}$; α =1 时,积分发散,相变点为 α = $2\frac{sinh(2K)}{cosh^{2}(2K)} = 1$ 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 二维 Ising 模拟: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 由热力学定律 $C = T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta}, \frac{\partial S}{\partial \beta} = -k\beta \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$ 有可能将刘维尔方程改写为主方程 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 $S=-ketarac{\partial\ln Z}{\partialeta}+klnZ$, $F=U-TS=-rac{1}{6}lnZ$ 。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 Metropolis 方法: 影响,可以假设周期性边界条件,在边界外再加一行和一列。 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 $W_{ij} =$ $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{NV}$, $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{NT}$, $\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{VT}$, $M = -\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right)_{VT}$ $\left\{ egin{align*} T_{i,j} & \text{if } p_j > p_i \\ T_{i,j,n,l,n,n} & \text{if } W_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} W_{ji}, \end{array} \right.$ 抽样满足细致平衡,另一种为 $W_{ij} = T_{ij} \frac{p_j}{p_i + p_j}$ 者 Y 为分为加的场, X 为对应的共轭力学广 廷量,如磁场和磁化矢量 $E \propto -XY$, $X = -\frac{\partial F}{\partial Y} = -\frac{\partial E}{\partial Y}$, $\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \Sigma_\alpha E_\alpha^2 e^{-\beta E_\alpha} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}$, $\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = \frac{C}{k\beta^2}$ 比热正比于能量涨落。 Λ 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 指数的确定同样可以使用有限尺度标度法 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 定义自旋之间的关联函数 $G(r) = \langle \sigma(r)\sigma(0) \rangle - \langle \sigma(r) \rangle \langle \sigma(0) \rangle \rightarrow r^{-(d-2)}f(r/\xi)$ 。 ξ 成为体系的关联长度,在 过小,要使得接受率在50%. 相变点处ξ→∞,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 着 E \propto XY, 関 $U \propto TS$, $U \propto -PV$, $U \propto -MH$, $U \propto_{L} N$, 可得 $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{NV}$, $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial \theta}\right)_{NT}$, $\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{VT}$, $M = -\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right)_{VT}$ $var(x) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} X_{\alpha}^2 e^{-\beta E_{\alpha}} - \frac{1}{\beta^2 z^2} \left(\frac{\partial F}{\partial Y}\right)_{\gamma}^2 = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 F}{\partial Y^2} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial Y} \langle X \rangle$ 证明 metropolis 抽样: N 为概率密度函数 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 设 W(x \rightarrow y)=T(x \rightarrow y)A(x \rightarrow y),设 T(x \rightarrow y)=T(y \rightarrow x),则 N(x)/N(y)=A(y \rightarrow x)/A(x \rightarrow 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; X,Y 模型:系统的自旋具有两个任意的取向。 $E = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \cdot \sigma_j = -J \sum_{(i,j)} \sigma_{ix} \sigma_{jx} + \sigma_{iy} \sigma_{jy} =$ 所以在任何情况下都有 N(x)/N(y)=p(x)/p(y) $-I\sum_{(i,l)}cos(\varphi_i-\varphi_i)$, 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 物理量平均值可以由自由能关于外场 Y 的一阶导数求得 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 旋,因此临界点实际上是临界线 物理量的涨落可以由自由能关于外场 Y 的二阶导数求得 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 定义广义磁化率: $x = \frac{\partial}{\partial Y}(X) = \beta var(X)$, 左边用于实验测量, 右边用于 MC 模拟 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 $\epsilon \propto MH$, $x = \frac{\partial M}{\partial t} = \beta var(M)$, $A \equiv \frac{\partial M}{\partial t} = \beta var(M)$, $A \equiv -\Delta var(M)$, A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 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 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。 在一维, 二维, 三维格点上。 $H = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \cdot \sigma_i = -J \sum_{(i,j)} \sigma_{ix} \sigma_{ix} + \sigma_{iy} \sigma_{iy} + \sigma_{iz} \sigma_{iz}$ 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 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。 b、如果 dU 小干 0. 那么接受这个移动并且将 demon=demon+dU 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,甚至可以正负值都取到。模 致平衡原理 p_iW_{ij}=p_jW_{ji}, 或者概率归一化条件,可得 2/3w_{12}=1/3w_{21}; 若取 $\begin{pmatrix} 3/4 & 1/4 \\ 0.5 & 0.5 \end{pmatrix}$, 则 c、如果 dU 大于 0. 若 demon>dU 则接受并且 demon=demon-dU,若 demon<dU, 拒绝 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 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 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。 对应 metropolis-hasting 抽样 很好地代表了一个微正则系综 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 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 $A_{ij} = \frac{1}{1+P_{i/p_{i}}}$ 等温等压系综的蒙特卡洛模拟: 结的状态转移到高温, 以脱离亚稳态。 $W_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} W_{ij}$,由于 $p_i W_{ij} = T_{ij} \frac{p_i p_j}{p_i + p_j}$, $p_i W_{ij} = T_{ij} \frac{p_i p_j}{p_i + p_j}$,交换 i,j 即可证明细致平衡条件 体系的几率密度分布为,其中 $s_i = \frac{r_i}{l}$ L 为盒子长度; $\rho = exp(-\beta[U(S^N;V) + PV - N\beta^{-1}lnV])$ 临界慢化: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 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 很快就能产生很多各种各样的构型。达到平衡要求各态经历性。但当温度下降到临界点附近时,开始形 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, $\frac{p_j}{n_i} = \frac{W_{ij}}{W_{ij}} = \frac{T_{ij}A_{ij}}{T_{ij}A_{ij}}$,取 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 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 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。 巨正则系综的蒙特卡洛模拟: N 是粒子数, s 是归一化坐标; $\rho = \frac{v^N exp(-\beta \mu N)}{(2-v^N)(N-v)} exp(-\beta U(s^N))$ 逾渗模型与 qpotts 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) $\delta_{\sigma:\sigma:}$),即 a、粒子在空间中随机移动。利用 metropolis 方法决定是否接受 $\sigma_i \neq \sigma_i$ 时不成键,反之则按照概率成键。 b、 粒子剔除与增加. 类似地决定是否接受 swednsen-wang 加速重要抽样法 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,系统的能量为 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 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 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~r+d 的球壳内的粒子数为 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 4/rho*pi*r^2g(r)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。

N_c是接受的构型数目, N 是格点数目。

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。

磁化率自相关函数: $C(t) = covA(t), A(0) = \langle \delta A(t) \delta A(0) \rangle = \langle (A(t) - \langle A \rangle) * (A(0) - \langle A \rangle) \rangle =$ $\langle A(t)A(0)\rangle - \langle A\rangle^2 = \int dt' [m(t+t')m(t') - \langle m\rangle^2] \propto exp(-t/\tau)$

临界慢化, $\tau \approx L^z$, $T_{CPU} = L^{d+z}$

wolff 算法:

1 随机选择一个自旋为自旋块生长的种子, 检查它的某近邻自旋是否取向相同;

2 如相同, 以几率 Paad 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;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);

 $\mathsf{P}_{\mathsf{aad}}$ 依赖于温度,随温度增加而降低。 $\frac{W(x o y)}{W(y o x)} = \frac{T(x o y)A(x o y)}{T(y o x)A(y o x)} = (1 - P_{add})^{m-n} \frac{A(x o y)}{A(y o x)} = exp(-eta(E_y - P_{add}))^{m-n} \frac{A(x o y)}{A(y o x)} = exp(-B(E_y - P_{add}))^{m-n} \frac{A(x o x)}{A(y o x)} = exp(-B(E_y - P_{add}))^$

 $E_x)) = \frac{p(y)}{p(x)} \stackrel{\text{def}}{\leftarrow} E_y - E_x = 2J(m-n), \frac{A(x-y)}{A(y-x)} = [exp(2\beta J)(1-P_{add})]^{n-m} = 1$

所以当选取 $P_{add}=1-\exp\left(-2\beta J\right)$ 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住了一样。尽管长程序,但 有短程序, 因此磁化率有尖峰。

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

Edwards-Anderson 模型: $H = -\sum_{(ij)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$, $\langle J_{ij} \rangle = 0$, $\langle J_{ij}^2 \rangle = J^2$, $P(J_{ij}) = \frac{1}{J_2\pi I^2} exp(-\frac{J_{ij}^2}{2I^2})$, or $P(J_{ij}) = \frac{1}{J_2\pi I^2} exp(-\frac{J_{ij}^2}{2I^2})$ $p_+\delta(J_{ij}-J)+p_-\delta(J_{ij}+J)$

高温时,顺磁相, $\langle \sigma_i \rangle = 0$, $\langle m \rangle = 0$,低温时,自旋玻璃相, $\langle \sigma_i \rangle \neq 0$, $\langle m \rangle = 0$,

 $C(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} [\langle \sigma_i(t) \sigma_i(0) \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2], \quad \text{FS} \equiv q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \langle \sigma_i^2 \rangle \neq 0, \quad x = \frac{1}{\pi} (1-q)$

Sherrington-Krikpatrick 模型: $H=-\sum_{\{ij\}}J_{ij}\sigma_i\sigma_j$, 此处 $\{i,j\}=all$ 。 $\langle J_{ij}\rangle=0$, $\langle J_{ij}^2\rangle=J^2$ 。

 $P(J_{ij}) = \frac{1}{J_{2\pi I^2}} exp(-\frac{J_{ij}^2}{2J^2}), \text{ or } P(J_{ij}) = p_+ \delta(J_{ij} - J) + p_- \delta(J_{ij} + J)$

 $\langle lnZ_J \rangle = \int dJ_{ij} P(J_{ij}) lnZ_{ij},$

副本方法: $\langle lnZ_J \rangle = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} \langle lnZ_J^n \rangle$, $Z^n = Tr_{\{\sigma_a^i\}} exp\{\beta \sum_{\{ij\}} \sum_{a=1}^n J_{ij} \sigma_i^a \sigma_j^a\}$

模拟退火: 设低温为 T_0 , β_0 , 高温为 T_1 , β_1 , $\Delta E=E_v-E_\mu$, 交换温度时接受概率为 $1 \Delta E < 0$

 $A = \begin{cases} exp(-(\beta_0 - \beta_1)\Delta E), & \Delta E > 0 \end{cases}$

证明交换温度时满足细致平衡条件Puv=

 $\frac{1}{7}exp(-\beta_0 E_\mu)\frac{1}{7}exp(-\beta_1 E_v)$

 $\frac{\frac{2_0}{W(\mu\nu\to\mu'\nu')}}{\frac{2}{N}} = \frac{P_{\mu'\nu'}}{N} = exp[-\beta_0(E_{\mu\prime} - \frac{N}{N})]$ $W(\mu'\nu'\rightarrow\mu\nu) = P_{\mu\nu}$

 E_{μ}) $[exp[-\beta_1(E_{\nu\nu} - E_{\nu})], \mu' = \nu, \mu = \nu'$

 $\frac{W(\mu\nu\to\nu\mu)}{\omega} = exp[-\beta_0\Delta E]exp[\beta_1\Delta E] =$

A(μν→νμ),即接收概率 A 满足细致平衡条件

对于复杂的物理系统,常出现无论多少次迭代,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_n 和 x_{n-1} , 构造新的输入为: $x_{n+1} = \alpha x_n + (1 - \alpha) x_{n-1}$.

分岔值 λ_m 和前后分岔间距的比值 $(\lambda_m - \lambda_{m-1})/(\lambda_{m+1} - \lambda_m)$ 。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 $\lambda_m: \lambda_m - \lambda_m =$ $A\delta^{-m}$, 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 周期分岔的 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 纵向间距 d_1,d_2,d_3 等值。 $d_m/d_{m-1} o$ α ; 这里的 α 也是一个普适常数。它的数值是: α =2.502907875 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的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变化而连续地变化。

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_0 和 x_0 +dx、经过迭代、两个状态之间的差别愈来愈大(dx_0 , dx_1 , dx_2 ,…愈来愈大): $\mathrm{dx}_n = \mathrm{dx}_0 e^{n\lambda}$; 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速率,它是对混沌态的初值敏 感性的定最判据。

Julia 集: $Z_{n+1} = Z_n^2 + C$,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^2+y^2; 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1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,可得图案。J 集可以是闭环也可不是。

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_n (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, 所以 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^2+y^2, 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,它是无穷数量的 J 集的直观的图像目录表。因此常 常把 M 集称为是 J 集的缩微字典。

拓扑维数。拓扑学研究可连续变化的图形,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。一条十分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= $\frac{ln(N(\epsilon))}{ln(1/\epsilon)}$;这里的 ϵ 是测量单元的尺寸, $N(\epsilon)$ 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ε由 1 减小为 1/2^n 时(n 是正整数),测量正方形得到的 N(z)由 1 增大为 4^n.

Cantor 集:用尺寸 ϵ 为 (1/3) 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 2ⁿ 个单元(N=2ⁿ),由上述维数定义得到分维 D=In2/In3=0.631 上述规则分形符合豪斯道夫维数

.. ..

.. ..

大于拓扑维数的定义。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^2=Nb 或 N=(R/b)^2。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。作 InN~In(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: $N' \propto N^{0.5}$ 。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 $Rg \propto N^{0.5}$, 这个结果和非等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对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。布朗轨迹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。但是重复访问概率数 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几何结构是与它所处的空间维数 d 有着密切的关系。

在一维情形下,自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 $Rg=N^{1/D}$; 这里的 D 是分形维数、并且它与空间维数 d 有以下关系

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 InN~Ins: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.

从周长-面积关系或表面积-体积关系求分维:规则图形(如圆、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 \propto A $^{0.5}$ 。对于在二维空间内的不规则分形的周长和面积。 $\frac{\log(P(\epsilon)/\epsilon)}{D} = \log(a_0) + \log(\frac{A(\epsilon)^{\circ}0.5}{\epsilon})$ 这里的分维 D 大于 1(周长光滑时 D=1), a_0 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, $\frac{\log(A(\varepsilon)/\varepsilon^2)}{2} = \log(a_0) + \log(\frac{V(\varepsilon)^{\frac{1}{3}}}{3})$

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 继续计数含图形象素的网格数 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 InN(s)~In(1/s)图,如能得到一条直线,它说明 Ns 和 s: $N \sim \left(\frac{1}{\varepsilon^D}\right)$

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 InN ~Inr 图上如有直线部分,则在此范围内存在:N~r^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等的各团簇的分布并给出直方图。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 $InN \sim InR$,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差。

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 干矩形的宽度。将 S(R)除以 R^2 得到

N(R)=S(R)/R^2, 作 1nN(R)~ In(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^3 得到 N(R)=Q(R)/R^3, 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: $C(r)=\rho(0)\rho(r)$ 。它表示重心为圆心、r 为半径的圆周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^a。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 N 成正比,即 $\int_{0}^{R} C(r) d^{d}r \propto N$ 。这里的上 标 d 是欧氏空间维数。于是得到 $N \propto R^{d-\alpha}$ 此时分维 D 为 d-a。由此可见,密度-密度相关函数法求 D 时 In[C(r)]~Inr 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: $f(\lambda r) = \lambda^m f(r)$, 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,—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			
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顶的状态,并去掉该栈中的内容			



Sierpin{ ; Sierpinski 三角毯

Angle 6 ;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;结束

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 一次迭代用哪一个规则是随机的。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。

 $A=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \tan\alpha \\ \tan\alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l1 & 0 \\ 0 & l2 \end{pmatrix}$,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 $R\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix}$

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 可下法确定。 $P_i = \frac{|\det(A_i)|}{|E_i|}$

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由具有离散、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。

一维元朐自动机: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 杰、则这 3 个近邻可以取 2^3=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^(2^3)=256 个不同的元胞自动机。K^(k^(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

杰 第四行是一转十 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

1 0 1 1 0 1 0 $N = 0 \times 2^7 + 1 \times 2^6 + 0 \times 2^5 + 1 \times 2^4 + 1 \times 2^3 + 0 \times 2^2 + 1 \times 2^1 + 0 \times 2^0 = 90$ 图 3 第 01011010(90)号元胞自动机规则

(7) (6) (5) (4) (3) (2) (1) (0)

willson 一维分形元胞自动机: $q^t(s) = (1+s)^t$,

In 2

s^(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 In3/

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 则是在最近邻和次近邻及其本身共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 才可能翻转、在时间 t+l 时刻变成 l-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 说明了构形引倒塌而进行的演化。这里、将单元块上步是两粒子、下部为空 的构形处理成概率规则(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 里变白.

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。

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,用黑灵汞示。所有在(i-1+ δ , i+ δ)半开半闭的圆环内(圆环宽度为 1,i=1,2,3。表示圆环增大,0 < δ < 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+ δ , i+ δ)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 δ ,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。