No.
Date

计算物理

一. Monte Carlo 方法基础

1. 随机数产生器 (好坏判断标准：周期长 随机性 速度)

线性同余法
$$\begin{cases} z_{n+1} = (a z_n + b) \bmod m \\ x_n = z_n / m \end{cases}$$

16807： $a = 7^5 = 16807$ $b=0$ $m = 2^{31}-1 = 2147483647$

Schrage 方法： $m = aq + r$

$$a z \bmod m = \left[\frac{z}{q}(aq+r) - \frac{rz}{q}\right] \bmod m$$
$$= \left\{a\cdot(z \bmod q) - r\left[\frac{z}{q}\right]\right\} \bmod m$$

2. 伪随机器的统计检验

独立性：相关性系数 $C(A,B) = \dfrac{\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle}{\sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}\sqrt{\langle B^2\rangle - \langle B\rangle^2}}$ $\Rightarrow C(l) = \dfrac{\langle x_n x_{n+l}\rangle - \langle x_n\rangle^2}{\langle x_n^2\rangle - \langle x_n\rangle^2}$

均匀性： $\chi^2 = \sum^{k} \dfrac{(O_k - e_k)^2}{e_k}$ $P(\chi^2 \le x|\nu) = \dfrac{1}{2^{\frac{\nu}{2}}\Gamma(\nu/2)}\int_0^x t^{(\nu-2)/2} e^{-\frac{t}{2}}\, dt$

另一种检验 $\left|\langle x^k\rangle - \frac{1}{k+1}\right| \sim O(\frac{1}{\sqrt{N}})$ $|C(l)| \sim O(\frac{1}{\sqrt{N}})$

3. ~~抽样~~直接抽样

离散 $x \sim p_i$ $\xi \sim R(0,1)$ $\sum^{n-1} p_i < \xi \le \sum^{n} p_i \to x_n$

连续 $x \sim p(x)$ $\xi \sim R(0,1)$ $\xi = \int_a^x p(x)dx$ $(x = F^{-1}(\xi))$

4. 变换抽样法

$p(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}}$ $\sim \xi = \frac{1}{\pi}\arcsin x + \frac{1}{2}$ $\sim x = \sin(\pi\xi - \frac{\pi}{2})$ $\sim x = \cos 2\pi\xi$

$p(x)dx = g(y)dy$ $p(x) = \lambda^{-1} e^{-\frac{x}{\lambda}}$ $\sim \xi = 1 - e^{-\frac{x}{\lambda}}$ $\sim x = -\lambda \ln\xi$

$p(x) = \left|\frac{dy}{dx}\right| g(y)$ $p(x) = \frac{1}{\pi}\frac{1}{1+x^2}$ $\sim \xi = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\arctan x$ $\sim x = \tan\pi(\xi - \frac{1}{2})$

$p(x,y) = \left|\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}\right| g(u,v)$

Box-Muller 法 $\begin{cases} x = \sqrt{-2\ln u}\cos 2\pi v \\ y = \sqrt{-2\ln u}\sin 2\pi v \end{cases} \to \begin{cases} u = e^{-\frac{x^2+y^2}{2}} \\ v = \frac{1}{2\pi}\tan^{-1}\frac{y}{x} \end{cases} \to p(x,y) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}$ $g(u,v)=1$

Marsaglia 方法 $u,v \in R(0,1)$ $u^2+v^2 = r^2$ 直至 ≤ 1 $(x,y,z) = (2u\sqrt{1-r^2}, 2v\sqrt{1-r^2}, 1-2r^2)$

四维球 $r_1^2 = y_1^2 + y_2^2 \le 1$ $r_2^2 = y_3^2 + y_4^2 \le 1$ $(y_1, y_2, \frac{y_3}{r_2}\sqrt{1-r_1^2}, \frac{y_4}{r_2}\sqrt{1-r_1^2})$

5. 舍选抽样法

对于 $p(x) = \dfrac{\int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y)dy}{\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y)dy}$ $\xi_1 = \int_{-\infty}^{\xi_x} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy\, g(x,y)$

$\xi_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{\xi_y} dy\, g(x,y)$

$\xi_y \le h(\xi_x)$，则 $\xi_x \sim p(x)$

Date

简单分布 $F(x)>P(x)$ $\xi_1=\int_a^{\xi_x}F(x)dx$ $\xi_x=\xi_x(\xi_1)$ $\xi_y=\xi_2F(\xi_x)$ $\xi_y\le P(\xi_x)$ ✓

$P(x)=2x$ $[0,1]$ ~~$x=\max\{\xi_1$~~ $x=\xi_1$ $\xi_1\le\xi_2$ ~ $x=\max\{\xi_1,\xi_2\}$

乘分布 $P(x)=h(x)g(x)$

$\xi_x\sim g(x)$ $M\xi_2<h(\xi_x)$ ✓

$p(x)=\frac{2\beta^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\sqrt{x}e^{-\beta x}$ $\xi_x=-\alpha^{-1}\ln\xi_1$ $\xi_2^2\le e\xi_1\ln\xi_1$ ✓ $\alpha=\frac{2\beta}{3}$ $g(x)=\alpha e^{-\alpha x}$

6.定积分计算

(投点方法) 平均值法 $\Pi(b_i-a_i)\cdot\frac{1}{N}\sum f(x_1,x_2,\cdots x_n)$ $(x_1,x_2,\cdots x_n)\in R[a_i,b_i]$

$\delta\langle f\rangle\propto\frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\langle f^2\rangle-\langle f\rangle^2}=\frac{\sigma_f}{\sqrt{N}}$

减小方差取法 $\int(f(x)-g(x))dx+\int g(x)dx$

重要抽样法 $\int f(x)dx=\int\frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx$ $\int g(x)dx=1$

按照 $g(x)$ 抽样 $\xi_g(\xi)$ $\sum\limits_{\xi}\frac{f(\xi_g)}{g(\xi_g)}$

二. 迭代 分形 混沌

1.直接迭代法 牛顿迭代法 混合输入代法

2.混沌 Feigenbaum常数 $\lambda_\infty-\lambda_m=A\delta^{-m}$ $\frac{d_n}{d_{n+1}}\to\alpha$ d_i 之与分岔曲线横坐标，纵向间距

内随机性 分维性质 普适性和Feigenbaum常数

吸引子奇异吸引子 Lyapunov指数λ' $dx_n=dx_0e^{n\lambda'}$

Julia集 Mandelbrot集： $z_{n+1}=z_n^2+C$，变z 变C

3.分形 维数 $D=\frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln\frac{1}{\varepsilon}}$ 放大图形的方法： $N(L)=L^D$

粗糙曲线 $N\sim\varepsilon^{-D}$ (圆规维度)

粗糙曲线封闭 $\ln\sqrt{A(\varepsilon)}/\varepsilon\sim\ln P(\varepsilon)/\varepsilon$ 斜率

$\ln\sqrt[3]{V(\varepsilon)}/\varepsilon\sim\ln\sqrt{A(\varepsilon)}/\varepsilon$ 斜率

盒计数法

林氏系统；字符串重写系统

三 元胞自动机

Wolfram 一维元胞自动机

No.
Date

一.7 随机行走 RW $\langle r^2(N)\rangle \propto N$

自规避随机行走 SAW

指数 $\nu(N)=\frac{1}{2}\frac{\ln\langle r^2(N)\rangle}{\ln N}$ 权重 $w_i=\prod_k \frac{m_k}{3}$，$m_k$ 为每一步的选择数

8 生长问题 DLA

Laplace生长 $\phi_0=\phi(s)-\frac{h^2}{4}\sum_{k}^{k_1}q_k$

9. 粒子运输问题

10. 渗透问题 $n_s(p)=$ 集团数 / 格点总数（集团大小分布） $w_s=\frac{sn_s}{\sum sn_s}$ 某占据格点属于大小s 概率

$S=\sum sw_s=\frac{\sum s^2 n_s}{\sum sn_s}$ 集团平均大小， ξ 最大间距

$R_s^2=\frac{1}{s}\sum(r_i-\bar{r})^2$ 回转半径 或 $=\frac{1}{2s^2}\sum_{i,j}(r_i-r_j)^2$

渗透概率 $P_\infty(p)$ 任一格点属于无穷大集团的概率

重整化群 b放大因子 $p'=p'(p)$ 不动点 p^* 为 P_c 的近似

$\lambda=\frac{dp'}{dp}$ $\nu=\frac{\ln b}{\ln\lambda}$

三 重要抽样的 Monte Carlo 模拟

Metropolis方法 $x_n\sim p$ $x_{n+1}\sim p'$ 当 $p'>p$ 时 $e^{-\beta H}$

正则系综：直接使用

微正则系综： Demon：E_d 恒 ≥ 0 $\Delta u=U(')-U$ 成功 $E_d\mathrel{+}=\Delta u$

恒 NPT：附加坐标 V 为随机的体积移动插入到粒子移动

计算物理 听课

No.
Date

8.31 丁泽军 zjding@ 孙霞 sunx@ (63602490) 李会民 hmli@

助教 章琨俊 kjzhang9@mail 程斌 sar@mail.

徐欢 xuh@mail 原韶凡 yuan.shaofan@qq.com

作业：3周 语言 Fortran C MATLAB Mathematica

课堂笔记：不提供ppt | 课程主页 micro.ustc.edu.cn/Chindex.htm

成绩 作业 50%+ ~ 60% 点名 $\alpha \times \beta$ 考试 + $(1-\beta)$ 作业 + 课题 − 考勤+1

9.7 作业 PDF 题目，算法公式，具体_图表，结论 源程序 可执行程序 原始数据

PB..._名_01.rar PB..._名_01_V01.rar

ftp://202.38.88.216 Student 2015

~~ ~~ 画图 (作业要求.ppt)

Monte Carlo 方法基础 〈第二讲〉

随机数 产生均匀随机数 (~~平~~取中法 ×)

$I_{n+1}=f(I_n)$ $x_n=g(I_n)$ I_0 种子 周期性

线性同余法 $I_{n+1}=aI_n+C \mod m$ $x_n=I_n/m$ $(7^5=)16807$ a, $c=0$, $m=2^{31}-1$

Schrage方法 $m=aq+r$ $az \mod m = \{a(z \mod q)-r[\frac{z}{q}]\} \mod m$

广义线性同余法, $I_n=f(I_{n-1},\cdots I_{n-k}) \mod m$

$I_n=(a_1 I_{n-1}+a_2 I_{n-2}+\cdots a_k I_{n-k}) \mod m$

多项式递归产生器

Tausworthe 位移寄存器 Fibonacci 延迟产生器 R250

$p=250$ $q=103$

$I_n=I_{n-p}\ \mathrm{XOR}\ I_{n-q}$

9.14 随机数检验 均匀性，关联性

$$C(l)=\frac{\langle x_i x_{i+l}\rangle-\langle x_i\rangle^2}{\langle x_i^2\rangle-\langle x_i\rangle^2}\to 0 \qquad \langle\ i\rangle \doteq \frac{1}{N}\sum_i x_i$$

$$\left(C\equiv\frac{\langle xy\rangle-\langle x\rangle\langle y\rangle}{\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}\sqrt{\langle y^2\rangle-\langle y\rangle^2}}=\frac{\frac{1}{N}\sum(x_i-\langle x\rangle)(y_i-\langle y\rangle)}{\sqrt{\frac{1}{N}\sum(x_i-\langle x\rangle)^2}\sqrt{\frac{1}{N}\sum(y_i-\langle y\rangle)^2}}\in[-1,1]\right)$$

均匀性检测：χ^2 分布 $\chi^2=\sum_{k}^{K}\frac{(O_k-e_k)^2}{e_k}$

$$P(\chi^2\le x_\alpha)=\frac{1}{2^{\nu/2}\Gamma(\nu/2)}\int_0^{x_\alpha} t^{(\nu-2)/2}e^{-\frac{t}{2}}dt \qquad \chi^2\to P \qquad \nu=K-1$$

另一种检测

$\langle x^k\rangle = \frac{1}{N}\sum x^k \Rightarrow \int_0^1 x^k p(x)dx = \frac{1}{k+1}$ $\quad |\langle x^k\rangle - \frac{1}{k+1}| \sim O(\frac{1}{\sqrt{N}})$

$C(l) = \frac{1}{N}\sum x_i x_{i+l} - \langle x\rangle^2 = \int_0^1\int_0^1 xy\,p(x,y)\,dxdy - \frac{1}{4} = 0$ $\quad |C(l)| \sim O(\frac{1}{\sqrt{N}})$.

抽样 直接抽样法.

离散型 $x_i \sim p_i$ $\quad p_i = \sigma_i/\sum\sigma_i$ $\quad \sum p_i = 1$

$\xi \le p_1 \sim x_1$ $\quad \xi \le p_1+p_2 \sim x_2$ $\quad \xi \le p_1+p_2+p_3 \sim x_3$

$x_n: \sum^{n-1} p_i < \xi \le \sum^{n} p_i$

$P(x) = \sum p_i\,\delta(x-x_i)$

连续性

$p(x)\ge 0$ $\quad \int p\,dx = 1$ $\quad p\,dx = \text{prob}$ $\quad \langle x\rangle = \int$ ......

$\xi = \int_a^x p(t)dt$ $\qquad F(x)=\int_a^x p(t)dt$ $\quad \frac{dF}{dx} = p$

指数分布 余弦分布 $p(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}}$ $(-1,1)$ $\quad \xi = \frac{1}{\pi}\arcsin x + \frac{1}{2}$ $\quad x = \sin(\pi\xi - \frac{\pi}{2})$

$\xi = \int_0^x \lambda^{-1} e^{-t/\lambda}dt = 1-e^{-x/\lambda}$ $\qquad x=\sin(2\pi\xi)$ $\quad x = \cos\pi\xi$

$x = -\lambda\ln\xi$

《第三讲》

变换抽样法 $p(x)dx = g(y)dy$

$(p(\varphi)d\varphi = g(x)dx$ $\quad p(\varphi)=1$ $\quad x=\cos\varphi$ $\quad \to g(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}}$)

$x=x(u,v)$ $\quad y=y(u,v)$ $\quad p(x,y)\to g(u,v)$

$p(x,y)\,dxdy = g(u,v)\left|\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}\right| dxdy$

$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} = N(\mu,\sigma)$ $\xrightarrow{x\to\sigma x+\mu} N(0,1)$: $p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}$ $\quad p(x)p(y)$

$\varphi = 2\pi v$ $\quad r^2 = -2\ln u$ $\quad (u,v)\in[0,1]\times[0,1]$

$x = r\cos\varphi = \sqrt{-2\ln u}\,\cos 2\pi v$, $\quad y = r\sin\varphi$

证 $u = e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}$ $\quad v = \frac{1}{2\pi}\arctan\frac{y}{x}$

$\left|\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}\right| = p(x)p(y)$

2维圆环

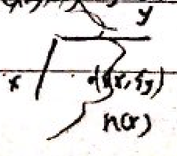
A $x=\cos\varphi$ $\quad y=\sin\varphi$ $\quad \varphi=2\pi\xi \in[0,2\pi]$ $\quad$ B $(u,v)\in[-1,1]$ $\quad r^2=u^2+v^2\le 1$ 时..

3、舍选抽样法

$p(x) = \frac{\int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y)\,dy}{\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y)\,dy}$ $\quad g(x,y)\to(\xi_x,\xi_y)$ $\quad \cancel{(\xi_x,\xi_y)\in(0,1)^2}$

$\xi_x = \int_{-\infty}^{\xi_x} dx\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, g(x,y)$

$\xi_y = \int_{-\infty}^{\xi_y} dy\int_{-\infty}^{\xi_x} dx\, g(x,y)$



$\xi_y < h(\xi_x)$?

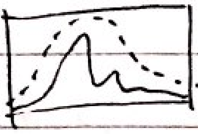
18K 182X257

$\xi_x \sim p(x)$

No.

Date . .

9.21 抽样效率

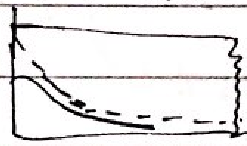


$F(x) > P(x)$ （拟合线 $F(x)$ 下的均匀分布）

$\xi_1 = \int_a^{\xi_x} F(x)dx / \int_a^b F(x)dx \Rightarrow \xi_x = \xi_x(\xi_1)$ $\quad \xi_y = \xi_2 F(\xi_y)$ $\quad \xi_y < p(\xi_x)$?

常见 $F(x)$

例 $p(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$ $(0,+\infty)$ $\quad F(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{\frac{1}{2}} e^{-x}$



$\xi_1 = \int_a^{\xi_x} F(x)dx / \int_a^b F(x)dx$

$= 1 - \exp(\xi_x)$

$\xi_y = \xi_2 F(\xi_1) = \sqrt{\frac{2e}{\pi}} \xi_1 \xi_2$ $\quad \xi_x = -\ln \xi_1$

乘分布 $p(x) = h(x) q(x)$ $\quad h < M$ $\quad \int_{-\infty}^{+\infty} q(x) = 1$

$g(x,y) = \begin{cases} q(x)/M & 0<y<M \\ 0 & \end{cases}$

$p(x) = \frac{\int_0^{h(x)} g(x,y)\, dy}{\cdots} = \frac{h(x)\, q(x)}{\cdots} = p(x)$

$\int_{-\infty}^{\xi_x} q(x)dx = \xi_1$ $\quad \xi_y = M \xi_2$ $\quad \xi_y < h(x)$?

定积分计算

$\sigma_f = \sqrt{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}$ $\quad \int f dv = V\left[\langle f \rangle \pm \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}}\right)$ $\quad \frac{\Delta I}{I} \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$ 投点法 平均值法

大数定律 中心极限定理

$Var\{X\} = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$ $\quad cov\{X,Y\} = \langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle$

$cor\{X,Y\} = \frac{cov\{X,Y\}}{\sqrt{var(X) var(Y)}}$

$var(X+Y) = var(X) + var(Y) + 2cov\{X,Y\}$

独立变量 $var \sum X_i = \sum var\{X_i\}$

同一分布 n 次 $\quad \sigma_{\langle X \rangle} = \sqrt{var\{\langle X \rangle\}} = \frac{\sigma_X}{\sqrt{N}}$

特征函数 $(p+qx)^N$

$P(Y_n < z) = \lim P\left(\frac{\langle X \rangle - \mu}{\sigma/\sqrt{N}} < z \right) = \Phi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{z} e^{-\frac{t^2}{2}}$

$\langle X \rangle \sim N(\mu, \frac{\sigma^2}{N})$

$\lim P(|\langle X \rangle - \mu| < \varepsilon) = \lim P\left\{ \frac{|\langle X \rangle - \mu|}{\sigma/\sqrt{N}} < \frac{\sqrt{N}\varepsilon}{\sigma} \right\} = \lim_{N\to\infty} \Phi\left(\frac{\sqrt{N}\varepsilon}{\sigma}\right) \to 1$ $\quad \Delta N \sim N^{\frac{1}{2}}$

$\sigma = \frac{1}{\sqrt{n}} \sqrt{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}$ 减小方差的技术

提取法 $f(x)$ $\quad g(x) - f(x)$ 小 $\quad \int g = J$

$$\int f(x) = \int f(x) - g(x) + J$$

重要抽样法  $\int f\,dx = \int \frac{f}{g}\, g\,dx = \langle f/g \rangle$ 

$\approx \frac{1}{n} \sum \frac{f}{g}$ 按照 g 抽样

原理 $dy = g(x)dx \quad y = \int_0^x g(x')dx' \in [0,1]$

$$\int_a^b f(x)dx = \int \frac{f(x)}{g(x)} g(x)dx = \int \frac{f(y)}{g(y)} dy = \frac{1}{n} \sum \frac{f(y)}{g(y)}$$

<第4讲>

布朗运动 Smoluchowski 理论

$\boxed{9.28}$ $\quad P_n(m) = \frac{1}{2^n} \frac{n!}{\left(\frac{n+m}{2}\right)!\left(\frac{n-m}{2}\right)!}$

$\langle m \rangle = 0 \qquad \langle m^2 \rangle = n$

$$\langle x^2(t) \rangle = \langle m^2 \rangle l^2 = n l^2 = l^2 \frac{t}{\tau} = 2Dt \qquad \left(D \doteq \frac{l^2}{2\tau}\right)$$

扩散度指数 $\sqrt{\langle x^2(t) \rangle} \propto t^{\frac{1}{2}}$

$n! \simeq \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \qquad \log P_n(m) \approx -\frac{1}{2}\ln n + \ln 2 - \frac{1}{2}\ln(2\pi) - \frac{m^2}{n} + (n+1)\frac{m^2}{2n^2}$

$$\approx \ln \frac{2}{\sqrt{2\pi n}} - \frac{m^2}{2n} \qquad P_n(m) \approx \frac{2}{\sqrt{2\pi n}} e^{-\frac{m^2}{2n}}$$

$m = \frac{x}{l} \quad n = \frac{t}{\tau} \qquad P_{n\gg 1}(m) = \frac{2l}{\sqrt{4\pi D t}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$

$\Delta m = 2 \qquad dx = l\Delta m = 2l \qquad P_n(m) = p(x,t)dx$

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \sim N(0, 2Dt) \qquad \mu_x = 0,\ \sigma_x = \sqrt{2Dt}$$

$\Rightarrow \frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$ 扩散方程 $\quad \vec{J} = -D\nabla \rho \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}$

$\rho(x,t) = N_0 p(x,t)$

No.
Date . .

~~$\bar{x}=\sum_i^n \dots$ (i.i.d.)~~

$p(\Delta)=p(-\Delta) \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} p(\Delta)d\Delta=1$

$f(x,t+\tau)\,dx = dx\int_{-\infty}^{+\infty} f(x+\Delta,t)p(\Delta)dx$

展开 $f(x,t+\tau) = f(x,t)+\tau\frac{\partial f(x,t)}{\partial t}$

$f(x+\Delta,t) = f(x,t) \quad \frac{\partial f(x,t)}{\partial x}\Delta+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2}\Delta^2$

代入 $\quad D=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\Delta^2}{2\tau}p(\Delta)d\Delta \to \frac{l^2}{2\tau} \qquad D=\frac{KT}{6\pi\eta a}$

~~一一 $\bar{x}$ … $\mathrm{Var}(\Sigma x)=\mathrm{var}(x_1)$ … $\delta^2=l^2$~~

$p(x,t+\tau) = \frac{1}{2}[p(x+l,t)+p(x-l,t)]$

$\downarrow$

$\frac{1}{\tau}[p(x,t+\tau)-p(x,t)] = \frac{D}{\tau}\frac{(p(x+l,t)-p(x,t))-(p(x,t)-p(x-l,t))}{l^2}$

$\downarrow$

扩散方程

三维 $6D\tau$

涨落 $\delta A(t)=A(t)-\langle A\rangle \qquad \langle A(t)\rangle=\langle A(0)\rangle=\langle A\rangle$

自相关函数 $\langle\delta A(t),\delta A(0)\rangle =$ … $\langle A(t)A(0)\rangle-\langle A\rangle^2$

$C(0)=\langle A^2\rangle-\langle A\rangle^2 \qquad \langle A(t)A(0)\rangle = \begin{cases}\langle A^2\rangle & t=0\\ \langle A\rangle^2 & t\to\infty\end{cases}$

$dX=Vdt \qquad \frac{d\langle x\rangle}{dt}=\langle v\rangle \qquad \frac{d\langle x^2\rangle}{dt}=2\langle xV\rangle$

$\frac{d}{dt}\mathrm{var}\{X\} = \frac{d}{dt}(\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2) = 2\langle xv\rangle-2\langle x\rangle\langle v\rangle = 2\mathrm{cov}\{X,V\}$

$r(t)-r_0 = \int_0^t v(t')dt'$

$\frac{d}{dt}\mathrm{var}\{r(t)\} = \frac{d}{dt}\langle(r(t)-r(0))^2\rangle = 2\langle(r_t-r_0)\cdot v(t)\rangle$

$= 2\int_0^t\langle v(t')\cdot v(t)\rangle dt' \overset{原点平移}{=} 2\int_{-t}^{0}\langle v(t')\cdot v(0)\rangle dt' \overset{t'\to -t'}{=} 2\int_0^t\langle v(-t')\cdot v(0)\rangle dt'$

$= 2\int_0^t\langle v(t')\cdot v(0)\rangle dt' \to 6D$

$D=\frac{1}{3}\int_0^\infty\langle v(t)\cdot v(0)\rangle dt=\int_0^\infty C(t)dt$

No.

Date

phy sun 16

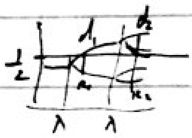
10.12 迭代法

牛顿迭代法 $x = x_n - \frac{g(x_n)}{g'(x_n)}$ $g(x)=f(x)-x$

一维 Logistic 方程 $x_{n+1} = \lambda x_n(x_n+1)$ x 0～1 λ 0～4

10.19 倍周期分岔

Feigenbaum 常数 $\lambda_\infty - \lambda_m = A\delta^{-m}$ $\frac{d_m}{d_{m+1}} \to \alpha$



内随机性 分维性质 普适性和 Feigenbaum 常数

二维 Hénon 方程 $x_{n+1} = 1 - a x_n^2 + y_n$ a=1.4

$y_{n+1} = b x_n$ b=0.3

奇异吸引子

三维常微分 Lorenz 方程 $\frac{dx}{dt} = \sigma(y-x)$ $\frac{dy}{dt} = rx - xz - y$ $\frac{dz}{dt} = xy - bz$

Rössler 吸引子

双摆 蔡氏电路

$\lambda = \lim_{n\to\infty} \frac{\ln|dx_n/dx_0|}{n}$ Lyapunov 指数 20流法 4周期

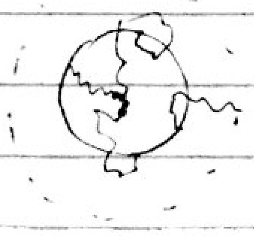
Julia 集 ▫ -0.12375+0.56508i i 0.11+0.65i z^2+c z

Mandelbrot 集 z^2+c c

10.27 分形 分维

Hausdorff 维数 $D = \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln\frac{1}{\varepsilon}}$ $\varepsilon\to 0$ ε为测量单元尺寸

11.2 DLA 分形生长 RLA 反应限制聚集



沉积率下 台阶 V_c 岛 d $\frac{V_d}{V_{dc}}$

L 系统：字符串重写系统 (V, ω, P) (初始结构, 公理生成规则, 生长规则)

No.
Date . .

F G + − | [ ] X
前 前 ↺ ↻ $\circlearrowleft^{180}$ 存位置方向 回到该状态

迭代函数系统

$\boxed{11.9}$

· 元胞自动机 Life game

一维： $2r+1$个近邻 k^{2r+1}种态 $k^{k^{2r+1}}$种可选

7	6	5	4	3	2	1	0
111	110	101	100	011	010	001	000

长期行为 ①均匀状态(恒0 / 恒1) ②定态或周期性的循环状态

③混沌状态 ④复杂的结构

(边界：周期 反射 定值 随机)

、二维 表决与退火模型 Moore型 多数决定规则 (少数决定规则)

自旋动力学 von Neumann 2-2 规则翻转

森林火灾模型

J 自规避随机行走 (模拟高分子)

$\sqrt{\langle R^2(N)\rangle} \propto N^{\nu}$

d	1	2	3	4
ν	1	3/4	0.588 ± 0.001	$\frac{1}{2}$

排体能 SAW模型 (边缘维度)

非平衡生长

Eden模型 弹道聚集模型 扩散受限聚集模型 DLA 自规避随机行走

$\boxed{11.16}$ Laplace生长 $\nabla^2\phi = 0$ $\phi_{ij} = \frac{1}{4}(\phi_{i+1,j}+\phi_{i-1,j}+\phi_{i,j+1}+\phi_{i,j-1}) \Leftrightarrow \frac{\phi_{xx} + \phi_{yy}}{h^2} = 0$

$$\begin{cases} \nabla^2\phi(x,y) = \frac{q(x,y)}{\varepsilon} \\ \phi(r) = \Phi \end{cases}$$

$\phi_{ij} = \frac{1}{4}\left(\cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot - \frac{h^2 q_{ij}}{\varepsilon}\right)$

$\phi_0 = \sum^{4} P_{0k}\,\phi_k - \frac{h^2 q_0}{\varepsilon}$ $P_{0k} = \frac{1}{4}$

$\frac{d\sigma}{d\Omega}\cdot e^{\cdots}$ $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R=\frac{Z^2e^4}{4E^2(1-\cos\theta+2\xi)^2}$ $\sigma_t=2\pi\int_0^\pi\frac{d\sigma}{d\Omega}\sin\theta d\theta$ ~~$\propto$~~ 平均自由程 $\propto 1/n\sigma_t$

~~微分 … 自由程~~

逾渗　　集团标号法

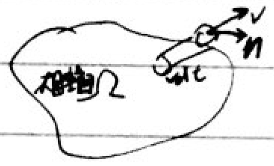
$\boxed{11.23}$ Monte Carlo 重整化群方法

1. 随机抽样与应用（概率密度分布、误差）
2. 中心极限定理（涨落、正态分布）
3. 布朗运动（随机行走、系综平均、方均根位移、正态分布、涨落）
4. 高分子链模型（自规避随机行走、平均场理论、高斯光滑链密度分布、方均根位移、标度指数）
5. 随机几何生长模型、电子输运与散射
6. 逾渗模型（标度、临界指数、几何相变、重整化群）

1. 系综理论（典型系统的概率密度分布）
2. 重要抽样（Markov链、主方程、细致平衡）
3. Ising模型（平均场理论、二级相变、临界指数、临界涨落）
4. 模拟退火法

系综平均 $\langle A\rangle=\frac{\int A(q,p)\,\rho(q,p,t)\,dq\,dp}{\int\rho(q,p,t)\,dq\,dp}$

Liouville定理 $\frac{d\rho}{dt}=0$



$\frac{\partial}{\partial t}\int\rho\,d\Omega$

$\int_S\rho\vec v\cdot\vec n\,ds=\int_S\rho\vec v\cdot d\vec\sigma=\int_\Omega\nabla\cdot(\rho v)\,d\Omega$

$\Rightarrow\frac{\partial}{\partial t}\int\rho\,d\Omega=-\int(\nabla\cdot\rho v)\,d\Omega\quad\Rightarrow\quad\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot J=0$

$0=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_i\left(\frac{\partial(\rho\dot q_i)}{\partial q_i}+\frac{\partial(\rho\dot p_i)}{\partial p_i}\right)=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_i\left(\frac{\partial\rho}{\partial q_i}\dot q_i+\frac{\partial\rho}{\partial p_i}\dot p_i\right)+0=\frac{d\rho}{dt}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\underbrace{[\rho,H]}_{\text{泊松括号}}$

$\left(\frac{\partial\dot q_i}{\partial q_i}=\frac{\partial H}{\partial p_i\partial q_i}=\frac{\partial H}{\partial q_i\partial p_i}=-\frac{\partial\dot p_i}{\partial p_i}\right)$

! 平衡态　$[\rho,H]=0$

No.
Date

假定 $\rho(q,p)=C$ 微正则系综

$$\langle A\rangle = \frac{1}{\Omega}\int A(q,p)\,d\Omega$$

ρ 是 H 显函数 $\rho=\rho[H(q,p)]$ 正则系综，广义概率为 Boltzmann分布

系综理论

正则系综 $F(N,V,T)$ 自由能 (Helmholtz) 微正则系综 $S(N,V,E)$ 熵

巨正则系综 $J(\mu,V,T)$ Massieu函数 等温等压系综 $G(N,P,T)$ Gibbs 自由能

微正则系综

$\Omega(E)=\int_{H\le E} d\Omega$ $d\Omega=\frac{d\vec{q}\,d\vec{p}}{h^{3N}N!}$ $\int_{\Delta E} d\Omega = \Omega(E+\Delta E)-\Omega(E)=\Omega'(E)\Delta E$ $g(E)=\Omega'(E)$

$$\rho(q,p)=\begin{cases}1/[g(E)\Delta E] & \text{if } E\le H(q,p)\le E+\Delta E\\ 0, & \end{cases}$$ $$\langle A\rangle=\frac{1}{g(E)}\lim_{\Delta E\to 0}\frac{1}{\Delta E}\int_{\Delta E} A(q,p)\,d\Omega$$

$\Delta E\to 0$ $\rho_{NVE}=\frac{\delta[H(q,p)-E]}{Z_{NVE}}$ ← 配分函数 配分函数 $Z_{NVE}=\int\delta[H(q,p)-E]\,d\Omega\equiv g(E)$

熵 $S(N,V,E)=k\ln Z_{NVE}$

……

正则系综

巨正则系综 $\frac{\partial\ln g_n}{\partial N_n}=\frac{\partial\ln g}{\partial N}=\beta\mu$

$\propto e^{-\beta E}$ $e^{-\beta H}$

No.
Date

11.30 密度泛函理论(DFT)简介

<A bird's eye view of density functional theory>

<The ABC of DFT>

<量子化学 一入门 …… >

材料分类及其原子键结构 维度 0维:纳米颗粒 量子点

1维 纳米线/管 高聚物 DNA 2维 表面 超晶格量子阱 3维 固体液体

长程序 短程序 晶 非晶 液体

键合方式 离子键(绝缘) 共价键(半导,绝) 金属键(导) 分子晶体 Van der Waals力 氢键(绝半导)

第一性原理方法 …… 依据于近似方法的选择

$\hat{H}\psi(x,\vec{r}) = E\psi(x,\vec{r})$ $x=(\vec{r},s)$

$\hat{H} = -\sum \frac{1}{2}\nabla_{r}^{2} + \sum_{i<j}\frac{1}{|r_i-r_j|} - \sum\frac{1}{2M_j}\nabla_{R_j}^{2} + \sum_{i<j}\frac{Z_iZ_j}{|R_i-R_j|} - \sum_{ij}\frac{Z_j}{|R_j-r_i|}$

绝热近似 $\hat{H} = \hat{H}_{n} + \hat{H}_e$ $\hat{H}_e = T_e + V_{e-e} + V_{e-N}$

Hartree近似 $\hat{H}_e$ $\psi_e = \psi_1\psi_2\psi_3\cdots\psi_n$ 问题:不具有交换反对称性

Fock近似 $\hat{H}_e = \sum \hat{h}(i) + \sum \hat{u}(i,j)$ $E_{HF} = \sum\langle i|\hat{h}|i\rangle + \frac{1}{2}\sum[ii|jj] - [ij|ji]$

LCAO-MO 计算量大 且不够精准

DFT $\rho(r)$ $E(\rho) = T(\rho) + \int V\rho\, dr + \frac{1}{2}\iint\frac{\rho\rho(r')}{|r-r'|}\,dr\,dr' + E_{xc}(\rho)$

WIEN 2k CRYSTAL VASP Gaussian

VASP: POSCAR 结构参数… POTCAR KPOINTS INCAR

12.7 ~~$exp^{-\beta H}$~~ $e^{-\beta H}$ $(e^{-\beta E})$

Markov链

12.14 $r = \frac{e^{-E_j/kT}}{e^{-E_i/kT}} = e^{-\Delta E/kT}$

$P = \frac{e^{-E_\alpha/k_BT}}{Z(T)}$ $Z(T) = \sum e^{-E_\alpha/k_BT}$

模拟退火法 $e^{-\frac{\Delta E}{T}}$

12.21 有限差分法 离散化变量

一阶 (向前 向后 中心 …… 欧拉折线法 显示 隐示 线性多步法