独立性 顺序相关法 $c(l)=\dfrac{\langle x_n x_{n+1}\rangle-\langle x_n\rangle^2}{\langle x_n^2\rangle-\langle x_n\rangle^2}$ (线性) $\sim O(\frac{1}{\sqrt{N}})$ ＞ K阶矩 $(\langle x^k\rangle-\langle x^k\rangle_{理论})\sim O(\frac{1}{\sqrt{N}})$

二维情况

多维频率 $\chi^2=\sum_{i,j}^{k_0}\dfrac{(n_{ij}-\frac{N}{k_0^2})^2}{N/k_0^2}$ 自由度 $K-1$ $(k_0\times k_0)$

均匀性 $\chi^2=\sum_{k=1}^{K}\dfrac{(n_k-m_k)^2}{m_k}$ ← 理论频数 自由度 $K-1$

$var\{x+y\}=var(x)+var(y)+2cov(x,y)$

抽样 $p(x)=\frac{1}{\lambda}e^{-\frac{x}{\lambda}}$, $x>0$; $x=-\lambda\ln\xi$

$\frac{1}{\pi}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ $-1<x\le 1$; $x=\sin 2\pi\xi$ or $\cos 2\pi\xi$

$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}$; $x=\sqrt{-2\ln u}\cos 2\pi v$, $y=\sqrt{-2\ln u}\sin 2\pi v$ $\Rightarrow \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}=p(x,y)$

三维球面 $r^2=u^2+v^2$; $x=2u\sqrt{1-r^2}$ $y=2v\sqrt{1-r^2}$ $z=1-2r^2$

$\xi\in[0,1]$, $\eta\in[-1,1]$

$x=\frac{\xi^2-\eta^2}{\xi^2+\eta^2}$, $y=\xi^2+\eta^2$ $g(x,y)=\frac{1}{4\sqrt{1-x^2}}$ $P(x)=\frac{4}{\pi}\int_0^1 g(x,y)dy$ 判断 $y\le 1$

舍选法 已知抽样 $F(x)>f(x)$ (二维 $g(x,y)$ 抽样). e.g 抽 $\sqrt{\frac{2}{\pi}}x^{\frac{1}{2}}e^{-x}$ 乘分布

抽 x, 令 $y=\xi_2F(x)$ 若 $y<f(x)$ 取 $F(x)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}$

积分 → 平均值法 $P\left(\frac{\langle f\rangle-\mu}{\sigma_f/\sqrt{N}}<\beta\right)\to\Phi(\beta)$ → $\frac{\langle x\rangle-p}{\sqrt{p(1-p)/N}}$ $var=Np(1-p)$ $\sigma_f=\sqrt{\langle f^2\rangle-\langle f\rangle^2}$

积分标准偏差 $\sigma_s=|\langle f\rangle-\mu|\propto\frac{\sigma_f}{\sqrt{N}}$ $N\to\infty$

① $(f(x)-g(x))\sim\varepsilon$ 平坦化

② $\int\frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx$ 抽样分布 平坦化 $\frac{f(x)}{g(x)}\sim 1$

布朗运动 $x^2=(\sum_i\Delta x_i)^2=\sum_i\Delta x_i^2+\sum_{i\ne j}\Delta x_i\Delta x_j$ $\langle x^2\rangle=4pqNl^2+Nl^2(q-p)^2$

$(r_{rms})_d=l\sqrt{N}$ 径向分布函数

$p(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{2\sigma^2}}$ $\sigma=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle}=\sqrt{2Dt}$ $(RDF)_d=C_dr^{d-1}e^{-\frac{dr^2}{2l^2N}}$

熵 $S=-\sum_i p_i\ln p_i$, $p_i=\frac{n_i}{N}$ 粗粒平均

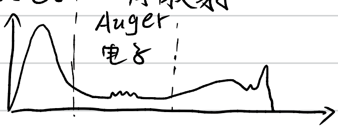
指数 $\nu(N)=\frac{1}{2}\frac{\ln[\langle r^2(N+i)\rangle/\langle r^2(N-i)\rangle]}{\ln[(N+i)/(N-i)]}$ 平均场理论 $U=u_0N\cdot\frac{N}{R^d}$

P(回到原点) $\propto N^{-\frac{d}{2}}$ $d^*=4$, $\nu=\frac{1}{2}$ $Z=(RDF)_d\langle e^{-\beta U}\rangle$ 排斥作用

高分子 — 游蛇, 构型变化 $\llcorner\to\urcorner$ $R=N^\nu$ 忽略涨落 $Z(R)_{max}\longrightarrow R_{most\ prob}$

生长 (与历史有关) — 聚集 Model; — 凝胶 model $\frac{1}{\nu}$ 为分形维数 $\nu>\frac{1}{2}\longrightarrow\nu_d=\frac{3}{d+2}$

$\nabla^2\varphi=q(x,y)\Rightarrow\varphi_{ij}=\frac{\varphi_{i-1,j}+\varphi_{i+1,j}+\varphi_{i,j-1}+\varphi_{i,j+1}-h^2q_{ij}}{4}$ $\Rightarrow\phi_0=\Phi(s)-\frac{h^2}{4}\sum_{k=1}^{K-1}q_k\Rightarrow\langle\phi_0\rangle$



$\frac{1}{\lambda}=N\sigma$ $I=I_0e^{-\frac{s}{\lambda}}$ → 步长指数分布 → 散射类型判断

弹性 θ — 截面公式; φ — $(0,2\pi)$ 均匀分布 连续慢化近似

非弹性 ΔE ← 截面公式 → 二次电子 忽略二次电子及方向改变 → $\Delta E=S(\frac{dE}{ds})$ Bethe

弹性散射 +

键逾渗 easier 二级相变 $d^*=6$

$n_s(p)=\frac{大小为S集团数}{格点总数}$ 序参量, 导数不连续 Ising

$w_s=\frac{sn_s}{\sum sn_s}$ ∈ 大小S集团概率(排除 $s=\infty$ 集团) $P_\infty(p)\sim(p-p_c)^\beta$ $\sim M$

$S=\sum_s sw_s$ 平均大小 $S(p)\sim|p-p_c|^{-\gamma}$ $\sim\chi(T)$

$\xi=\langle max\{|r_i-r_j|\}\rangle$ 平均跨跃长度 $\xi(p)\sim|p-p_c|^{-\nu}$ $\sim\xi(T)$

$R_s^2=\frac{1}{s}\sum_i(r_i-\bar r)^2=\frac{1}{2s^2}\sum_{i,j}(r_i-r_j)^2$ $2\beta+\gamma=\nu d$ $(d<d^*)$

有限尺度标度法 ($p\sim p_c$ 时) 重整化群 $p'=p$(联通, $a'=ba$)

$|p-p_c|\sim L^{-\frac{1}{\nu}}$ $\Rightarrow P_\infty(p=p_c)\sim L^{-\frac{\beta}{\nu}}$ $(L\to\infty)$ or $P_\infty^{\frac{1}{\beta}}\propto p$

$p^{*\prime}=p^*$ $\Rightarrow\nu=\frac{\ln b}{\ln(dp'/dp)|_{p=p^*}}$; $|p'-p^*|^{-\nu}=\frac{1}{b}|p-p^*|^{-\nu}$ b大较好

$\bar A=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T A(q,p)dt$ 分子动力学 平衡态 $\frac{\partial\rho}{\partial t}=0\Rightarrow[\rho,H]=0$

$\langle A\rangle=\frac{\int A(q,p)\rho(q,p;t)dq\,dp}{\int\rho(q,p;t)dq\,dp}=const$

$\rho=const$ 微正则 N,V,E $Z=\Omega'(E)$ $S=k\ln Z$

$\rho=\frac{e^{-\beta H}}{Z}$ 正则 N,V,T $F=-kT\ln Z$ $F=E-TS$ $E=-\frac{\partial\ln Z}{\partial\beta}$

$\frac{d\rho}{dt}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+[\rho,H]=0$ 等温等压 N,P,T $\langle A\rangle=\frac{1}{Z}\iint Ae^{-\beta[H+PV]}d\Omega\,dV$ $C_V=\frac{\partial E}{\partial T}=\frac{(\Delta E)^2}{kT^2}$

$dE=TdS-PdV+\mu dN$ $G=F+PV$ $G=-kT\ln Z$

巨正则 μ,V,T $\langle A\rangle=\frac{1}{Z}\sum_{N_i}\left(\prod_i\frac{e^{-\beta\mu_iN_i}}{N_i!}\right)\int Ae^{-\beta H}d\Omega$ $J=-kT\ln Z$

$J=F-\mu N=-PV$

Markov $PW = P$ 平衡 $\frac{\partial \rho}{\partial t} = \int dx' [\rho(x',t) W(x'\to x) - \rho(x,t) W(x\to x')]$ $\xrightarrow{平衡} \frac{\rho(x)}{\rho(x')} = \frac{W(x'\to x)}{W(x\to x')}$ $\Updownarrow$ $P = PW$

主方程

Metropolis $\begin{cases} W_{ij} = T_{ij}A_{ij} = T_{ij}\min\{1, \frac{P_j}{P_i}\} \ (i\neq j) \\ W_{ii} = 1 - \sum_{i\neq j} W_{ij} \end{cases}$ Barker $W_{ij} = T_{ij}\frac{P_j}{P_i + P_j}$ $(i \neq j)$

$T \to$ 任意对称分布

只关心点分布满足分布 等温等压抽样 $r_i = L s_i \Rightarrow \rho \propto V^N e^{-\beta[PV + U(S;L)]}$ L 为附加坐标

$A_{ij} = \min\{1, \frac{P_j T_{ji}}{P_i T_{ij}}\}$

序参数 $\to M = kT\frac{\partial \ln Z}{\partial H}$ $C = \frac{\partial U}{\partial T}$ $E = -\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \mu_B H\sum\sigma_i$

Ising $(M, H) \sim (P, V)$ $U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$ $\langle M\rangle = N\mu_B\langle\sigma\rangle$ $\chi = \frac{(\Delta M)^2}{kT}$ $\chi = \lim_{H\to 0}\frac{\partial M}{\partial H}$ 相变 $\sim \overset{E}{M}$涨落 ∞

平均场 $T_c = \frac{2J}{2k_B}$ $d \geq 4$ 无限大体系 $\to$ 相变点处无穷发散

相变 $\begin{cases} 一级 & 自由能导数不连续 \\ 连续 & G 高阶导数不连续 \end{cases}$ $H=0$ 二级 $0<H<\infty$ 一级 $T<T_c$ $M(H)$不连续 $T>T_c$ $M(H)$连续

Euler $\begin{cases} \phi_{n+1} = \phi_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(\phi, x)\,dx & \to x_n \text{ 显式}, \to x_{n+1} \text{ 隐式} \\ \phi_{n+1} = \phi_{n-1} + 2hf(\phi_n, x_n) \end{cases}$

多步法 $f(x,\phi) =$ 多项 L 插值 2步 Adams $\phi_{n+1} = \phi_n + h(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1})$

预估-校正 显式 $\to \phi^*_{n+1} \to$ 隐式

Verlet $\ddot{x} = f(x,t)$

$x(t+h) = 2x(t) - x(t-h) + h^2 f(x,t) + O(h^4)$

Runge-Kutta $\begin{cases} \phi_{n+1} = \frac{h}{2}(F_1 + F_2) \\ F_1 = f(\phi_n, x_n) \\ F_2 = f(\phi_n + hF_1, x_n + h) \end{cases}$ $\begin{cases} \phi_{n+1} = \frac{h}{6}(F_1 + 2F_1 + 2F_2 + F_4) \\ F_1 = f(\phi_n, x_n) \\ F_2 = f(\phi_n + \frac{h}{2}F_1, x_n + \frac{h}{2}) \\ F_3 = f(\phi_n + \frac{h}{2}F_2, x_n + \frac{h}{2}) \\ F_4 = f(\phi_n + hF_3, x_n + h) \end{cases}$

Numerov $\ddot{x} = f(t)x(t)$ $\begin{cases} y(t) = [1 - \frac{h^2 f(t)}{12}]x(t) \\ y(t+h) = 2y(t) - y(t-h) + h^2 f(x,t) + O(h^6) \end{cases}$ 量子 $e^{-i\tau\hat{H}/\hbar} \approx \frac{1 - i\hat{H}\tau/2\hbar}{1 + i\hat{H}\tau/2\hbar}$

定态: $V(x) = V(-x)$ 打靶法 奇宇称 $\psi(0) = 0, \psi'(0) \overset{任}{=} 1 \Rightarrow \psi_0 = 0, \psi_1 = 1$ $V(x)$不对称 匹配法

偶宇称 $\psi(0) \overset{任}{=} 1, \psi'(0) = 0 \Rightarrow \psi_0 = 1, \psi_1 = 1$

调整 E 使满足 $\psi(x = \pm(L + \Delta L)) = 0$ 方势阱

保证各态历经性✓ $\to$ 失稳性 $\to$ 高阶算法无益处

分子动力学 $\to$ 局域性质(无各态历经性) 初始动量 — 平均动量

①找下一次碰撞 Δt ②所有粒子位置 $\to t + \Delta t$ ③计算新速度、新碰撞表 ④是否平衡

平衡态判据: ①速度 Boltzman's $H = \langle \ln f\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(v_x)\ln f(v_x)\,dv_x$ 平衡态达到最小值

②原子位置无序度 平移序参数 $\lambda \to 0$ $(\Delta\lambda)^2 \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ $\lambda_i = \frac{\sum\cos(4\pi x_i/a)}{N}$

均方位移 $\langle \Delta r^2(t)\rangle = \frac{1}{N}\sum_i^N[r_i(t) - r_i(0)]^2$ 固体 不变 液体 $\propto t$

初始位置可重叠

软球 截断势 移位 $u_c(r) = \begin{cases} u(r) - u(r_c) - u'(r_c)(r - r_c) & r \leq r_c \\ 0 & r \geq r_c \end{cases}$ 力、势能均连续

周期性边界 — 最小映像判据(作用力范围 $< L$)

平衡态: ① $\overset{动能}{\Delta K} = -\overset{势能}{\Delta U}$ 涨落 ②每个速度分量 $\in$ Boltzman 分布 $f(v_i)\Delta v_i = f(v_j)\Delta v_j$ $\langle v_i^2\rangle = \langle v_j^2\rangle$

③Δ热力学量 $\sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ ④热力学量对小微扰稳定(退火后不受扰动) ⑤每一小体系下平均值同

迭代 Newton $x_{n+1} = x_n - \frac{g(x_n)}{g'(x_n)}$ 混合输入 $f(x_{n+1}) = f(\alpha x_n + (1-\alpha)x_{n-1}) = x_{n+2}$

混沌 Feigenbaum 常数 $\delta = \frac{\lambda_m - \lambda_{m-1}}{\lambda_{m+1} - \lambda_m}$ $\alpha = \lim_{m\to\infty}\frac{d_m}{d_{m+1}}$ ①分维性质 ②内随机性 ③普适性 δ 常数

奇异吸引子 ①初值敏感性 ②无限嵌套的自相似结构 $\to$ 有分数维 ③几何结构不随参数连续变化

Lyapunov 指数 $\lambda = \lim_{n\to\infty}\frac{\ln(\Delta x_n/\Delta x_0)}{n}$ 发散速率 >0 混沌 个数 = 维数

Julia 集 $z_{n+1} = z_n^2 + c$ Mandelbrot 集 固定 c 判断 $|z_n| < \infty$ ($z_0 = 0$) c的集合 Sierpinski Vicsek 挖图形

分形 维数 $D = \ln N(\varepsilon)/\ln(\frac{1}{\varepsilon})$ $(\varepsilon \to 0)$ ε为测量单元 cantor 不断挖直线 Koch 不断增加折线

①处处不连续或不可微 ②标度不变性 ③ $D >$ 拓扑维数, 且一般为分数

布朗运动$(\Delta r_i = b)$ $N = (\frac{R}{b})^2$ $D = 2$ 访问格点数 一维 $N' \sim N^{\frac{1}{2}}$ 二维 $N' \sim \frac{N}{\log N}$ 三维 $N' \sim N$

1. 周规维数 2. $\underset{周长}{P^{\frac{1}{D}}} = a_0\varepsilon^{\frac{1}{D}}\varepsilon^{-1}\underset{面积}{A^{\frac{1}{2}}} \Rightarrow (\frac{P}{\varepsilon})^{\frac{1}{D}} = a_0\frac{A^{\frac{1}{2}}}{\varepsilon}$ 面积 $\downarrow$ 6 回转半径法 $N \sim R_g^D$

3. $A^{\frac{1}{D}} = a_0\varepsilon^{\frac{2-D}{D}}V^{\frac{1}{3}}$ 4. 盒计数法 $\underset{有目标的格子数}{N} \sim (\frac{1}{\varepsilon})^D$ 5. Sandbox $\underset{单分形}{N} \sim \underset{象素数}{r^D}$

7. 变换法　$N = S/R^2$ ← 曲线 → $\ln N \sim \ln\frac{1}{R}$ 曲线斜率
S：方框面积　R：← 框宽度

8. 密度-密度相关函数法　$c(\vec{r}) = \left\langle \frac{\rho(\vec{r}')\rho(\vec{r}+\vec{r}')}{N} \right\rangle$

$\vec{r}'=0$ 时　$c(\vec{r}) = \langle \rho(0)\rho(\vec{r}) \rangle$

$c(\vec{r}) \sim r^{-\alpha}$　　$D = d-\alpha$

标度不变性　$f(r) \sim r^m$

林氏系统　Koch 曲线　$F+F--F+F$（左转 右转）　三角毯　$FXF-FF-FF$　$F=FF$　$X=--FXF++FXF++FXF--$

Hilbert 曲线　X　$X = -YF+XFX+FY-$　$Y = +XF-YFY-FX+$

仿射变换　$R\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & \tan\alpha \\ \tan\alpha & 1 \end{pmatrix}}_{\text{扭曲}}\underbrace{\begin{pmatrix} l_1 & 0 \\ 0 & l_2 \end{pmatrix}}_{\text{伸缩}}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix}$　三个点

IFS　规则 R_i — 几率 p_i

元胞自动机　$K^{K^{2r+1}}$　状态 K，邻座 $2r+1$　编码　$\underset{D_7}{111}$　$\underset{D_6}{110}$　……　$\underset{D_0}{000}$

二维　① 服从多数 → 成核，渝滲　服从少数 → 退火　② Ising Q_2　局部能量守恒

③ HPP　格位信息 $s(r,t) = (a,b,c,d)$　正方网格，各向异性　动力学模型　E_c

④ FHP　三角网络　满足各向同性　⑤ 沙堆规则　⑥ Langton 蚂蚁规则　⑦ 森林火灾模型

⑧ 管虫礁模型

测量　同一种方法 N 次　$\sigma = \frac{\sigma_x}{\sqrt{N}}$　　不同种方法　$\sigma \approx \frac{\sigma_{x\,max}}{N}$

布朗运动　$\langle x \rangle = \frac{\sum_i R_i}{N} = \frac{\sum_i\sum_j X_{ij}}{N}$　　$Var(X_i) = \langle X_i^2 \rangle - \langle X_i \rangle^2 = l^2$　$Var(R_i) = Nl^2$

$cov\{x,y\} = \langle xy \rangle - \langle x \rangle\langle y \rangle$　　涨落　$\delta A(t) = A(t) - \langle A \rangle$

自相关函数　$C(t) = cov\{A(t), A(0)\} = \langle \delta A(t)\,\delta A(0) \rangle = C(-t) = \begin{cases} \langle A^2 \rangle & t=0 \\ \langle A \rangle^2 & t\to\infty \end{cases}$

自发涨落回归假说　非平衡扰动的弛豫　平衡系统自发涨落回归

相同规律　e.g. 接近平衡态的极低浓度溶质

$c(\vec{r},t) = \langle \delta\rho(\vec{r},t)\,\delta\rho(0,0) \rangle$　回归律 $\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c$　　$\begin{cases} \langle V_x^2 \rangle = \frac{kT}{m} \\ \langle V_x \rangle^2 = V_x(0)^2 e^{-\frac{t}{\tau}} \end{cases}$

$\downarrow$ $p(\vec{r},t)$ 概率 → Green 函数

$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \langle V \rangle$　　$\frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = 2\langle XV \rangle$　　$\frac{d}{dt}Var(x) = 2cov(x,V)$　　$\frac{d}{dt}var(\vec{r}(t),\vec{r}(0)) = 2\int_0^t \langle V(t')V(0) \rangle dt'$

$\Rightarrow$　$D = \frac{1}{d}\int_0^\infty \langle V(t)V(0) \rangle dt = \int_0^\infty C(t)dt$ → 微观速度自相关函数 $\xrightarrow{t\infty} 2dD$（$d$ 为维数）

$= \int_0^\infty c(0)e^{-\frac{t}{\tau}}dt = \frac{kT}{m}\tau = \frac{kT}{6\pi\eta a}$

Langevin　$m\dot{V} = -\frac{V}{B} + F(t)$　　$\langle F(t) \rangle = 0$　　$\langle F(t)F(0) \rangle = D\,\delta(t)$　　$C(t) = C(0)e^{-\frac{t}{\tau}}$

$\downarrow$ $V(t) = V(0)e^{-\frac{t}{\tau}} + e^{-\frac{t}{\tau}}\int_0^t e^{-\frac{t'}{\tau}}A(t')dt'$　　$\langle V(t) \rangle = \langle V(0) \rangle e^{-\frac{t}{\tau}} = \int Vp\,dV$

$\langle V^2(t) \rangle = \langle V^2(0) \rangle e^{-\frac{2t}{\tau}} + D\tau(1-e^{-\frac{2t}{\tau}})/2$

$\Rightarrow$　$p(V) = Gauss \xrightarrow{t\to\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{mV^2}{2}\frac{B}{D}}$　　$= \int V^2 p\,dp$

涨落耗散定理：摩擦↓，涨落力↑　　$\langle r^2 \rangle = \frac{2dkT}{m}\tau^2\left\{\frac{t}{\tau} - 1 + e^{-\frac{t}{\tau}}\right\}$

$= \begin{cases} \langle V^2 \rangle t^2 & (t \ll \tau) & \text{直线行走} \\ 2dt & (t \gg \tau) & \text{随机行走} \end{cases}$

例　$I = \int_0^\infty (x-\alpha\beta)^2 f(x)dx$　　$f(x) = \frac{1}{\beta\Gamma(\alpha)}\left(\frac{x}{\alpha}\right)^{\alpha-1}e^{-\frac{x}{\beta}}$　　$I = \alpha\beta^2$ 为 $f(x)$ 方差

设 $T(x\to x') = \frac{1}{2}e^{-\frac{x'}{2}}$　　$\frac{p_j T_{ji}}{p_i T_{ij}} = r$　　$x_{i+1} = \begin{cases} x' & \xi < \min(1,r) \\ x_i & \xi > \min(1,r) \end{cases}$

Ising 平均场　$E \overset{-\sum\varepsilon\sigma_i}{=} -\frac{1}{2}\sum \gamma J \langle\sigma\rangle\sigma_i - \mu_B H\sum\sigma_i$　　$Z = \left(\sum_{\sigma=\pm1} e^{\varepsilon\sigma/k_BT}\right)^N = \left[2\cosh\left(\frac{\varepsilon}{k_BT}\right)\right]^N$

$M = kT\frac{\partial \ln Z}{\partial H} = N\mu_B\tanh\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)$　　$\langle\sigma\rangle = \lim_{N\to\infty}\frac{M}{N\mu_B} = \tanh\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)$

$H=0 \Rightarrow \langle\sigma\rangle = \tanh\left[\frac{\gamma J\langle\sigma\rangle}{2kT}\right] \Rightarrow T_c = \frac{\gamma J}{2k}$　　$H\neq0$ 时　$\langle\sigma\rangle \overset{T=T_c^-}{=} \sqrt{3\frac{T^2}{T_c^3}(T_c-T)} \sim (T_c-T)^\beta$　$\beta = \frac{1}{2}$

$\chi \xrightarrow{H\to0} \frac{T_c/T}{\cosh^2(\langle\sigma\rangle T_c/T) - T_c/T}$　　$T>T_c$，$\langle\sigma\rangle\approx0$，$\chi \sim (T-T_c)^{-1}$　$\gamma=-1$　　$T<T_c$ 时　$\chi \sim (T_c-T)^{-1}$

$\begin{cases} \xi \sim L \sim |T-T_c|^{-\nu} \\ M \sim (T_c-T)^\beta \to L^{-\frac{\beta}{\nu}} \\ C \sim |T-T_c|^{-\alpha} \to L^{\alpha/\nu} \\ \chi \sim |T-T_c|^{-\gamma} \to L^{\gamma/\nu} \end{cases}$　　临界指数与格子形式无关

球面抽样 $\begin{cases} \cos\theta = 2\xi - 1 \\ \phi = 2\pi\eta \end{cases}$

变换抽样 $f(u,v)\,du\,dv = g(x,y)\left|\frac{\partial(x,y)}{\partial(u,v)}\right| du\,dv$

差分法解 Poisson $\phi_j = \begin{pmatrix} \phi_{1,j} \\ \phi_{2,j} \\ \vdots \\ \phi_{N-1,j} \end{pmatrix}$ $b_j = -\frac{1}{4}\begin{pmatrix} h^2 q_{1,j} \\ \vdots \\ h^2 q_{N-1,j} \end{pmatrix}$

$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_{N-1} \end{pmatrix}$ $B = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_{N-1} \end{pmatrix}$

$\Rightarrow \begin{pmatrix} G & -\frac{I}{4} & & \\ -\frac{I}{4} & G & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & & G \end{pmatrix} \Phi = B$ $G = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{4} & & \\ -\frac{1}{4} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$

MPi

```
#include "mpi"
main(int argc, char ** argV){
  int Numpros, MyID, i, j, k
  MPI_Status status;
  char msg[20];
  MPI_Init(&argc, &argv);
  MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &NumProcs);
  MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &MyID);
  if ...        MPI_Send(" ", strlen()+1, MPI_CHAR, 1, 99, MPI_COMM_WORLD);
                MPI_Recv(" ", 长度, MPI_CHAR, 0, 99, MPI_COMM_WORLD, &status);
  MPI_Finalize();
```

进程号 tag

临界慢化 成键几率 $p = 1 - e^{-\left|\frac{J}{kT}\right|\delta_{\sigma_i\sigma_j}}$ → 集团标识、 随机数 → 整个集团赋值.

主方程描述 粗粒平均，随机动力学变量代替略去的微观细节，产生相关较慢自由度的随机跃迁（不同尺度下，将 Liouvill 方程改写为主方程

一级相变终止于临界点.

Monte carlo 借助概率模型解决不直接具有随机性的确定性问题 ⇄ 大数定则 中心极限定理

减小方差，增加点数 or 重要抽样.