

计算物理

Ver. 4

(0302 试用讲义)

丁泽军 编著

中国科技大学
物理系

目录	i
概论	0-1
0.1 计算物理学概貌	0-1
0.1.1 计算物理学的意义	0-1
0.1.2 计算物理的形成历史	0-2
0.1.3 计算物理方法与作用	0-3
0.1.4 计算物理方法与尺度	0-5
0.1.5 计算技术的发展	0-6
0.1.6 科学计算和战略计算	0-7
0.2 学习方法	0-9
0.3 课程主要参考书目	0-10
参考文献	0-11
第一章 Monte Carlo 方法基础	1-1
§1.1 随机数产生器	1-1
1.1.1 均匀随机数产生器	1-1
1.1.1.1 伪随机数的要求	1-1
1.1.1.2 Lehmer 线性同余法	1-2
1.1.1.3 16807 产生器	1-3
1.1.1.4 种子值	1-4
1.1.1.5 Tausworthe 位移计数器法	1-4
1.1.1.6 Fibonacci 延迟产生器	1-5
1.1.1.7 Marsaglia 产生器	1-5
1.1.2 伪随机数的统计检验	1-6
1.1.2.1 独立性与相关系数	1-6
1.1.2.2 均匀性检验 - 频率检验	1-6
1.1.2.3 独立性检验 - 多维频率检验	1-8
参考文献	1-8
§1.2 由已知分布的随机抽样	1-9
1.2.1 直接抽样法	1-9
1.2.1.1 离散型变量分布	1-9
1.2.1.2 连续型变量分布	1-9
1.2.2 变换抽样法	1-11
1.2.2.1 一般方法	1-11
1.2.2.2 Box-Muller 法	1-12
1.2.2.3 球面上的均匀分布	1-12
1.2.3 舍选抽样法	1-13
1.2.3.2 简单分布	1-14
1.2.3.3 乘分布	1-16

参考文献	1-16
§1.3 定积分的计算	1-17
1.3.1 简单抽样	1-17
1.3.1.1 掷石法	1-17
1.3.1.2 平均值法	1-17
1.3.1.3 中心极限定理与误差	1-18
1.3.1.4 多重定积分	1-19
1.3.1.5 提取法	1-20
1.3.1.6 奇异积分	1-20
1.3.2 重要抽样	1-20
1.3.2.1 重要抽样方法	1-20
1.3.2.2 权重 Monte Carlo 积分	1-21
参考文献	1-22
§1.4 随机行走与生长问题	1-23
1.4.1 随机行走	1-23
1.4.1.1 Brown 运动	1-23
1.4.1.2 一维 RW 模型	1-25
1.4.1.3 标度指数	1-26
1.4.1.4 扩散的物理	1-26
1.4.1.5 熵	1-28
1.4.1.6 RW 模型的变形	1-29
1.4.2 自规避随机行走	1-30
1.4.2.1 SAW 模型	1-30
1.4.2.2 指数的计算	1-31
1.4.3 高分子结构	1-32
1.4.3.1 高分子链	1-32
1.4.3.2 径向分布函数	1-33
1.4.3.3 Flory-Fisher 平均场理论	1-34
1.4.3.4 边缘维数	1-35
1.4.3.5 有机玻璃	1-36
1.4.3.6 高分子链的模拟	1-37
1.4.4 非平衡生长	1-38
1.4.4.1 生长模型的概念	1-38
1.4.4.2 Eden 模型	1-40
1.4.4.3 弹道聚集模型	1-40
1.4.4.4 扩散受限聚集模型	1-42
1.4.4.5 Laplace 生长	1-44
1.4.4.6 其它生长模型	1-46

1.4.4.7 介电击穿模型	1-49
参考文献	1-50
§1.5 粒子输运问题	1-52
1.5.1 电子	1-52
1.5.1.1 应用领域	1-52
1.5.1.2 弹性散射模型	1-53
1.5.1.3 Bethe 阻止本领	1-56
1.5.1.4 内壳层电离	1-57
1.5.1.5 等离子体激元	1-58
1.5.1.6 介电函数模型	1-59
1.5.1.7 Monte Carlo 模型和步骤	1-62
1.5.1.8 背散射电子	1-65
1.5.2 中子和光子	1-xx
1.5.3 原子和离子	1-xx
参考文献	1-67
§1.6 逾渗问题	1-68
1.6.1 逾渗模型	1-68
1.6.1.1 何谓逾渗	1-68
1.6.1.2 逾渗的类型	1-69
1.6.1.3 逾渗阈值	1-70
1.6.2 逾渗与相变	1-73
1.6.2.1 逾渗集团的物理描述	1-73
1.6.2.2 集团的标识	1-74
1.6.2.3 相变和临界行为	1-75
1.6.2.4 有限尺度标度法	1-76
1.6.2.5 临界指数的普适性	1-77
1.6.2.6 标度律	1-78
1.6.2.7 边缘维数	1-79
1.6.2.8 逾渗模型的应用	1-80
1.6.3 数值重整化	1-81
1.6.3.1 重整化群概念	1-81
1.6.3.2 标度变换方法	1-82
1.6.3.3 临界指数的计算	1-84
1.6.3.4 Monte Carlo 重整化群方法	1-85
1.6.3.5 座一键逾渗的重整化群	1-87
1.6.3.6 不动点	1-89
参考文献	1-90
第二章 重要抽样的 Monte Carlo 模拟	2-1

§2.1 统计力学基础	2-1
2.1.1 相空间理论	2-1
2.1.1.1 相空间	2-1
2.1.1.2 统计系综	2-2
2.1.1.3 Liouville 定理	2-3
2.1.2 系综理论	2-5
2.1.2.1 微正则系综	2-5
2.1.2.2 正则系综	2-7
2.1.2.3 等温等压系综	2-9
2.1.2.4 巨正则系综	2-10
参考文献	2-12
§2.2 Monte Carlo 模拟与重要抽样	2-13
2.2.1 随机过程	2-13
2.2.1.1 条件概率	2-13
2.2.1.2 Markov 链	2-14
2.2.1.3 主方程	2-15
2.2.1.4 Markov 过程的物理应用	2-16
2.2.2 Metropolis 方法	2-17
2.2.2.1 抽样规则	2-17
2.2.2.2 证明	2-19
2.2.3 不同系综的 Monte Carlo 方法	2-20
2.2.3.1 正则系综	2-20
2.2.3.2 微正则系综	2-21
2.2.3.3 等温等压系综	2-22
2.2.3.4 巨正则系综	2-23
参考文献	2-24
§2.3 正则系综的统计力学模型	2-25
2.3.1 Ising 模型	2-25
2.3.1.1 自旋与磁性	2-25
2.3.1.2 统计力学分布	2-27
2.3.1.3 一维 Ising 解	2-28
2.3.1.4 Weiss 平均场理论	2-29
2.3.1.5 二维 Onsager 解	2-32
2.3.1.6 一维模拟: 热平衡	2-33
2.3.1.7 二维模拟: 二级相变	2-34
2.3.1.8 二维模拟: 一级相变	2-38
2.3.2 相关模型与模拟方法	2-41
2.3.2.1 XY 模型	2-41

2.3.2.2	Heisenberg 模型	2-42
2.3.2.3	q 态 Potts 模型	2-43
2.3.2.4	时钟模型	2-44
2.3.2.5	Ising 自旋玻璃	2-45
2.3.2.6	模拟退火法	2-46
2.3.2.7	临界慢化	2-48
2.3.2.8	Swendsen-Wang 加速重要抽样法	2-48
2.3.3	蛋白质折叠问题	2-49
2.3.3.1	蛋白质结构	2-49
2.3.3.2	构象的能量	2-51
2.3.3.3	模拟步骤	2-52
2.3.3.4	趋于热平衡	2-53
2.3.4	经典液体	2-56
2.3.4.1	势能函数	2-56
2.3.4.2	对关联函数	2-57
2.3.4.3	硬球体系	2-58
2.3.4.4	Lennard-Jones 流体	2-60
2.3.4.5	Verlet 列表	2-60
	参考文献	2-63
§2.4	量子 Monte Carlo 方法	2-64
2.4.1	路径积分	2-64
2.4.1.1	量子力学回顾	2-64
2.4.1.2	传播子	2-65
2.4.1.3	路径积分	2-67
2.4.1.4	Monte Carlo 路径积分	2-69
2.4.1.4	一维谐振子	2-70
2.4.2	变分法	2-73
2.4.2.1	变分原理	2-73
2.4.2.2	单粒子的模拟步骤	2-74
2.4.2.3	单粒子: 一维和二维	2-75
2.4.2.4	H_2 分子	2-77
2.4.3	扩散 Monte Carlo 法	2-xx
	参考文献	2-xx
第三章	有限差分法	3-1
§3.1	线性微分方程	3-1
3.1.1	微分方程的分类	3-1
3.1.1.1	偏微分方程的类型	3-1
3.1.1.2	初始值和边界值	3-1

3.1.2	初始值问题	3-2
3.1.2.1	有限差分	3-2
3.1.2.2	Euler 法	3-3
3.1.2.3	多步法	3-4
3.1.2.4	蛙跳法	3-4
3.1.2.5	预报-校正法	3-4
3.1.2.6	Crank-Nicholson 法	3-5
3.1.2.7	Runge-Kutta 法	3-5
3.1.2.8	Verlet 法	3-5
3.1.2.9	Numerov 法	3-5
3.1.3	Schrodinger 方程	3-7
3.1.3.1	量子力学的差分方程	3-7
3.1.3.2	Crank-Nicholson 法	3-9
3.1.3.3	波包的运动	3-10
3.1.4	边界值问题	3-12
3.1.4.1	打靶法	3-12
3.1.4.2	本征值与本征态	3-14
3.1.4.3	特殊的量子阱	3-15
3.1.4.4	匹配法	3-16
3.1.4.5	双量子阱	3-17
	参考文献	3-19
§3.2	非线性微分方程	3-xx
	参考文献	3-xx
第四章 分子动力学方法		4-1
§4.1	分子动力学方法	4-1
4.1.1	基本概念	4-1
4.1.1.1	分子动力学	4-1
4.1.1.1	MC与MD的差异	4-2
4.1.2	硬球的碰撞	4-3
4.1.2.1	碰撞的运动学	4-3
4.1.2.2	碰撞时间	4-4
4.1.2.3	模拟步骤	4-5
4.1.2.4	初始条件	4-6
4.1.2.5	趋于平衡	4-7
4.1.2.6	状态方程	4-9
4.1.3	微正则系综的分子动力学	4-10
4.1.3.1	运动方程	4-10
4.1.3.2	截断势	4-11

4.1.3.3	最小映像判据与元胞列表法	4-12
4.1.3.4	周期性边界条件下的 Verlet 列表法	4-13
4.1.3.5	模拟步骤	4-14
4.1.3.6	平衡态判定	4-15
4.1.4	运动方程积分算法	4-16
4.1.4.1	Verlet 型算法	4-16
4.1.4.2	Gear 预报 - 校正法	4-18
4.1.4.3	算法的优劣判据	4-18
4.1.4.4	算法的时间可逆性	4-19
4.1.4.5	Verlet 算法的 Liouville 公式	4-20
4.1.5	碰撞轨迹的失稳性	4-21
4.1.5.1	Lyapunov 失稳性	4-21
4.1.5.2	碰撞失稳性简例	4-22
4.1.6	原子间相互作用势模型	4-24
4.1.6.1	Born-Oppenheimer 近似	4-24
4.1.6.2	两体势与多体势模型	4-25
4.1.6.3	金属的多体势	4-26
4.1.6.4	半导体的多体势	4-27
4.1.7	长程相互作用	4-xx
4.1.7.1	Ewald 加和	4-xx
4.1.8	不同系综的分子动力学方法	4-xx
4.1.8.1	恒温系综	4-xx
4.1.8.2	恒压系综	4-xx
	参考文献	4-xx
§4.2	平衡态与动力学性质	4-xx
4.2.1	动力学系统	4-xx
4.2.1.1	动力学系统分类	4-xx
4.2.2	关联函数	4-xx
	参考文献	4-xx
第五章	非传统方法	5-xx