计算物理 Date

蒙特卡洛方法

- 布丰投针实验：一组平行线相距 S，投掷针长度 $l=S$

相交概率 $\frac{l\cdot|\cos\alpha|}{S}=|\cos\alpha|$　　α：针与平行线垂直方向夹角

$\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}|\cos\alpha|d\alpha=\frac{2}{\pi}$　　在 N 次投针中，有 M 次与平行线相交

$\pi\approx\frac{2N}{M}$

- 线性同余法（产生伪随机数）

运算 $A=B(\mathrm{mod}\,M)$ 表示 A 等于 B 被 M 整除后的余数

$$\begin{cases} x_{n+1}=(ax_n+c)(\mathrm{mod}\,m) \\ \xi_n=x_n/m \end{cases}$$

a, c, x_0, m 为大于 0 的整数，分别叫作乘子、增量、初值、模。

一般 x_0 任选

$a=4q+1$，$c=2p+1$（p, q 正整数）

$\begin{cases} \text{混合同余法 } c\neq 0 \\ \text{乘同余法 } c=0 \end{cases}$

- 伪随机数统计检验

(a) 均匀性检验：每个子区间内个数 N_i，期望 $\frac{N}{K}$，统计误差 $\sqrt{\frac{N}{K}}$　服从泊松分布

构造卡方统计量 $\chi^2=\sum_{i=1}^{K}\frac{(N_i-\frac{N}{K})^2}{\frac{N}{K}}$ 检验均匀性

服从 $\chi^2(k-1)$ 分布

(b) 独立性检验：分为两列 $\{\xi_1,\xi_3,\cdots,\xi_{2n-1}\}\{\xi_2,\xi_4,\cdots,\xi_{2n}\}$

分别设为二维散点的 x-y 坐标值，将二维区域划分成 K^2 小格子

$$\chi^2=\sum_{i,j=1}^{K}\frac{(N_{ij}-\frac{N}{K^2})^2}{\frac{N}{K^2}}$$

服从 $\chi^2((k-1)^2)$ 分布

- 随机抽样　　• 离散变量的直接抽样（例：光子与物质相互作用）

• 连续变量的直接抽样

★ 例：指数分布　　$F(x)=\int_{-\infty}^{x}f(x)dx=1-e^{-\lambda x}$

$$f(x)=\begin{cases}\lambda e^{-\lambda x} & x>0,\ \lambda>0 \\ 0 & \text{其他}\end{cases}$$

$\xi=F(y)=1-e^{-\lambda y}$　　ξ 为 $[0,1]$ 随机数

$\Rightarrow y=-\frac{1}{\lambda}\ln\xi$　$\left(-\frac{1}{\lambda}\ln(1-\xi)\right)$　　（$1-\xi$ 同上）

同理

- 变换抽样法：对 $f(x,y)$ 的随机变量 η,δ 抽样，如果已掌握 $g(u,v)$ 的随机变量 $\eta'\ \delta'$ 的抽样方法，则寻找变换：

$$\begin{cases} x = g_1(u,v) \\ y = g_2(u,v) \end{cases} \quad g_1\ g_2 \text{ 反函数存在} \Rightarrow \begin{cases} u = h_1(x,y) \\ v = h_2(x,y) \end{cases}$$

则 $f(x,y) = g(h_1(x,y), h_2(x,y))|J|$ 　　 $|J| = \begin{vmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial x} & \frac{\partial h_1}{\partial y} \\ \frac{\partial h_2}{\partial x} & \frac{\partial h_2}{\partial y} \end{vmatrix}$ Jacobi 行列式

★ 例：正态分布 $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\}$

只考虑标准正态分布即可 $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\{-\frac{x^2}{2}\}$ 则 $t = \sigma x + \mu$ 满足任意正态分布

$$\begin{cases} x = \sqrt{-2\ln u}\cos(2\pi v) \\ y = \sqrt{-2\ln u}\sin(2\pi v) \end{cases}$$

u, v 在 $[0,1]$ 独立均匀分布

$\therefore g(u,v) = 1$

$$\begin{cases} u = \exp\{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)\} = h_1(x,y) \\ v = \frac{1}{2\pi}\tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) = h_2(x,y) \end{cases} \Rightarrow f(x,y) = |J| = \frac{1}{2\pi}\exp\{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)\}$$

$$= f(x) f(y)$$

★ 正态分布的 Maraglia 方法

(a) 产生 $[0,1]$ 上随机数 u 和 v

(b) 计算 $w = (2u-1)^2 + (2v-1)^2$

(c) 若 $w>1$ 则返回 (a)，否则继续

(d) 计算 $z = \sqrt{-2\ln w / w}$

取 $x = uz \quad y = vz$

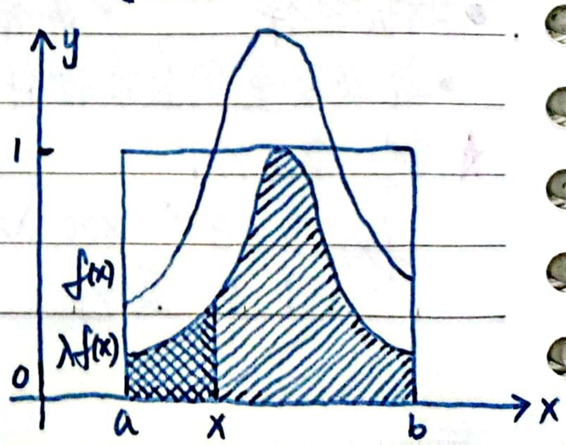
- 第一类舍选法：η 在 $[a,b]$ 上分布 $f(x)$，$L = \max\limits_{x\in[a,b]} f(x) = \frac{1}{\lambda}$

(a) 产生 $[0,1]$ 上随机数 ξ_1，并构造出 $[a,b]$ 区间随机数 $\delta = a + (b-a)\xi_1$

(b) 产生 $[0,1]$ 上随机数 ξ_2，若 $\xi_2 \le \lambda f(\delta)$ 则继续，否则返回 (a)

(c) 选取 $\eta = \delta$ 作为一个抽样值

抽样效率 $E = \frac{\int_a^b f(x)dx}{L(b-a)} = \frac{1}{L(b-a)}$



★例：$y \sim f(x)=2x\ (0\le x\le 1)$　　$L=\max\limits_{x\in[0,1]} f(x)=2$

(a) 产生[0.1]随机数 ξ_1, ξ_2

(b) 若 $\xi_2 \le \frac{1}{2} f(\xi_1)=\xi_1$，则 $y=\xi_1$ (效率50%)

(c) ξ_1, ξ_2 可交换位置，则 $y=\max\{\xi_1, \xi_2\}$ (效率100%)

同理推广到高次 $f(x)=nx^{n-1}\ (0\le x\le 1)$　　$y=\max\{\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n\}$

• 第二类舍选法：设 $h(x)$ 与 $f(x)$ 同为[0.1]

且 $f(x)=L\dfrac{f(x)}{L\,h(x)}h(x)=L\,g(x)h(x)$　　$g(x)<1$，$L>1$

(a) 产生[0.1]随机数 ξ 并由 $h(x)$ 抽样得到 y_h

(b) 若 $\xi \le g(y_h)$ 成立，则 $y=y_h$　　效率 $\frac{1}{L}$

★例：标准正态分布 $f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\{-\frac{x^2}{2}\}$

$L=\sqrt{\frac{2e}{\pi}}$　　$h(x)=e^{-x}$，$g(x)=\exp\{-\frac{(x-1)^2}{2}\}$　　$0<x<+\infty$

(a) 对 $h(x)$ 直接抽样　$y_h=-\ln\xi_1$　　效率 $\sqrt{\frac{\pi}{2e}}$

(b) 若 $\xi_2\le g(y_h)$ 即 $(y_h-1)^2\le -2\ln\xi_2 \Rightarrow y=y_h$

• 第三类舍选法：$f(x)=L\int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y)\,dy$

$L=1\Big/\int_{-\infty}^{+\infty}dx\int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y)\,dy>1$

(a) 由 $g(x,y)$ 抽取随机向量 (y_x, y_y)　　效率 $\frac{1}{L}$

(b) 判别 $y_x\le h(y_x)$ 成立，则 $y=y_x$

★例：各项同性方位角余弦的抽样，即 $x=\cos\theta$，$\theta\in[0,2\pi]$，$y=\sin\theta$

$f(x)=\frac{1}{\pi}\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，$|x|<1$

$$\begin{cases} x=\dfrac{\xi_1^2-\xi_2^2}{\xi_1^2+\xi_2^2} \\ y=\xi_1^2+\xi_2^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \xi_1=\sqrt{\frac{1}{2}y(1+x)} \\ \xi_2=\sqrt{\frac{1}{2}y(1-x)} \end{cases} \Rightarrow \begin{aligned} g(x,y)&=f(\xi_1,\xi_2)|J| \\ &=\frac{1}{4\sqrt{1-x^2}} \end{aligned}$$

$|x|<1$　　$0<y<1$

- 加分布抽样：$f(x)=\sum_n p_n h_n(x) \quad 0<p_n<1,\ \sum_n p_n=1$

  (a) 产生[0,1]随机数 ξ，由 $\sum_{i=1}^{n-1} p_i < \xi \le \sum_{i=1}^{n} p_i$ 解得 n

  (b) 找到对应 $h_n(x)$，抽样得 $\eta=\eta_{h_n}$

- 减分布抽样：$f(x)=A_1 g_1(x)-A_2 g_2(x) \quad x\in[a,b] \quad A_{1,2}\ge 0$

  令 m 为 $g_2(x)/g_1(x)$ 的下边界

  $0<f(x)=g_1(x)\left[A_1-\frac{A_2 g_2(x)}{g_1(x)}\right]\le g_1(x)(A_1-A_2 m)$

  令 $h_1(x)=f(x)/[g_1(x)(A_1-A_2m)] \quad 0<h_1(x)\le 1$

  $\Rightarrow f(x)=(A_1-A_2m)h_1(x)g_1(x)$ 采用第二类舍选法 效率 $\frac{1}{A_1-A_2m}$

- 乘加分布抽样：$f(x)=H_1(x)g_1(x)+H_2(x)g_2(x) \quad x\in[a,b] \quad H_{1,2}\ge 0$

  (1) 若 $p_{1,2}=\int_a^b H_{1,2}(x)g_{1,2}(x)$，直接转为加分布抽样

  (2) 若 M_1 M_2 分别为 H_1 H_2 上界，令 $p_1=\frac{M_1}{M_1+M_2}$ $p_2=\frac{M_2}{M_1+M_2}$

  $L=M_1+M_2 \quad H_{1,2}(x)=M_{1,2}h_{1,2}(x)$

  $f(x)=p_1[Lh_1(x)g_1(x)]+p_2[Lh_2(x)g_2(x)]$ 加分布抽样 + 第二类舍选法

- 乘减分布抽样

  $f(x)=H_1(x)g_1(x)-H_2(x)g_2(x) \quad x\in[a,b]$

  令 m 为 $\frac{H_2(x)g_2(x)}{H_1(x)g_1(x)}$ 最小值，M_1 为 H_1 最大值

  $0<f(x)\le H_1(x)g_1(x)[1-m]\le M_1(1-m)g_1(x)$

  $\Rightarrow f(x)=M_1(1-m)h_1(x)g_1(x) \quad 0<h_1(x)\le 1 \quad M_1(1-m)>1$

  第二类舍选法 效率 $\frac{1}{M_1(1-m)}$

- 直方图抽样　　一共N个道址

  令 n_j 为第j道址的频数，则 $F(x_j)=\frac{\sum_{i=0}^{j} n_i}{\sum_{i=0}^{N} n_i}$

  (1) 产生[0,1]均匀分布随机数 ξ

  (2) 若 $F(x_{j-1})\le\xi<F(x_j)$，则 $\eta=x_j$ 　　$\{\eta=x_j\}$

  每个道址有宽度，可以通过插值法得到连续抽样值

● 高维随机向量的抽样

(1) 舍选法 抽样 $y=(y_1\ y_2\cdots y_n)^T \sim f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$

取值范围 $\{a_1\le x_1\le b_1,\ a_2\le x_2\le b_2, \cdots, a_n\le x_n\le b_n\}$

令 $L=\max f(x_1\ x_2\cdots x_n)$ 产生 $n+1$ 的 $[0,1]$ 上独立分布随机数 $\xi_1\ \xi_2\cdots\xi_{n+1}$

若 $\xi_{n+1}<\frac{1}{L}f(a_1+(b_1-a_1)\xi_1, a_2+(b_2-a_2)\xi_2, \cdots, a_n+(b_n-a_n)\xi_n)$

则 $y_i=a_i+(b_i-a_i)\xi_i \quad i=1,2,\cdots,n$

效率 $\frac{1}{L\prod_{i=1}^n(b_i-a_i)}$

(2) 条件密度法.

$f(x_1\ x_2\cdots x_n)=f_1(x_1)f_2(x_2|x_1)f_3(x_3|x_1,x_2)\cdots f_n(x_n|x_1,\cdots,x_{n-1})$

且 $f_1(x_1)=\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int_{-\infty}^{+\infty}f(x_1\cdots x_n)\,dx_2\cdots dx_n$

$f_2(x_2|x_1)=\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int_{-\infty}^{+\infty}f(x_1\cdots x_n)\,dx_3\cdots dx_n/f_1(x_1)$

$\Rightarrow$ 由 $f_1(x_1)$ 抽样得 $y_1=x_1$ 在 $y_1=x_1$ 下由 $f_2(x_2|x_1)$ 抽 $y_2=x_2$

依次抽得 y_3 直至 y_n

• n维正态分布随机抽样

1° 每个分量独立分布 $f(x_1\ x_2\cdots x_n)=\prod_{i=1}^n\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\{-\frac{x_i^2}{2}\}$

利用一维方法分别抽样

2° 各分量一般不独立

$$f=(2\pi)^{-\frac{n}{2}}|M|^{-\frac{1}{2}}\exp\{-\frac{1}{2}(\vec{x}-\vec{\mu})^T M(\vec{x}-\vec{\mu})\}$$

M为协方差矩阵. 矩阵元 σ_{ij}

$$\sigma_{ij}=E\{(y_i-\mu_i)(y_j-\mu_j)\}=\sigma_{ji}$$

M为正定对阵矩阵. 存在非奇异下三角阵使 $M=AA^T$

则 $\vec{y}_x=\vec{\mu}+A\vec{y}_y$ $\vec{y}_y$ 为独立n维正态分布

★ 二维正态分布抽样

$$M=\begin{bmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12}\\ \sigma_{21} & \sigma_{22}\end{bmatrix}\quad \vec{\mu}=\begin{pmatrix}\mu_1\\ \mu_2\end{pmatrix}$$

$$A=\begin{bmatrix}\sqrt{\sigma_{11}} & 0\\ \frac{\sigma_{12}}{\sqrt{\sigma_{11}}} & \sqrt{\frac{\sigma_{11}\sigma_{22}-\sigma_{12}^2}{\sigma_{11}}}\end{bmatrix}\quad \vec{y}_y=\begin{pmatrix}y_{y1}\\ y_{y2}\end{pmatrix}$$

- 蒙特卡罗方法计算中减少方差的技巧
  - 分层抽样法

    如 $\frac{P_j}{n_j}=\frac{1}{N}$ 即按比例的分层抽样

    又如，采用均匀分层抽样，分成J个子区间，每个子区间抽 $n_j=\frac{N}{J}$

    并且点也是均匀的，$P_j=\frac{1}{J}$

  - 重要抽样法

    $I=\int_0^1 f(x)\,dx=\int_0^1 \frac{f(x)}{g(x)}g(x)\,dx$ $\frac{f(x)}{g(x)}$相对平坦，$g(x)$越接近$f(x)$越好

    $y\sim g(x)$随机抽样

    y带入$f(x)/g(x)$求均值 得 I 的蒙特卡罗估计

    $$\bar{I}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{f(y_i)}{g(y_i)}$$

  - 控制变量法 $I=\int_0^1 f(x)\,dx=\int_0^1[f(x)-g(x)]\,dx+\int_0^1 g(x)\,dx$

  - 对偶变量法 $I=\int_0^1 f(x)\,dx$ $I\approx\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}[f(x_i)+f(1-x_i)]/2$

- 随机游走

★ 例：求解泊松型微分方程

$$\begin{cases}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}=q(x,y)\\ \phi|_\Gamma=F(s)\end{cases}$$

Γ为考察区域D的边界

s为边界上的点

格点阵中，0点上下左右四点为1, 2, 3, 4

差分公式 $\frac{(\phi_1-\phi_0)-(\phi_0-\phi_2)}{h^2}+\frac{(\phi_3-\phi_0)-(\phi_0-\phi_4)}{h^2}=q_0$

$\Rightarrow \phi_0=\frac{1}{4}(\phi_1+\phi_2+\phi_3+\phi_4-h^2q_0)$

产生[0,1]上随机数√，判断走哪个点，记为m，则 $\phi_0\sim\phi_m-\frac{h^2}{4}q_0$

ϕ_m亦未知，同理进行二维游走到n点

$$\phi_m\sim\phi_n-\frac{h^2}{4}q_m \Rightarrow \phi_0\sim\phi_n-\frac{h^2}{4}(q_0+q_m)$$

直至走到边界Γ上某点S，得到估计值 $y_0 = F(S) - \frac{h^2}{4}\sum_{j=0}^{J} g_j$

J为游走到边界前总步数　反复游走得 ϕ_0 估计序列 $\{y_0^{(1)}, y_0^{(2)}, \dots, y_0^{(n)}\}$

ϕ_0 期望 $\overline{\phi_0} = \frac{\sum_{n=1}^{N} y_0^{(n)}}{N} = \frac{\sum_{n=1}^{N}\left[F(S^{(n)}) - \frac{h^2}{4}\sum_{j=0}^{J^{(n)}} g_j^{(n)}\right]}{N}$

ϕ_0 方差 $\sigma^2 = \frac{1}{N}\sigma_y^2 = \frac{1}{N}\left[\overline{y_0^2} - \overline{y_0}^2\right]$

- 考虑 $\nabla^2\varphi = 0$　$\varphi(x,0) = \varphi(x,1) = 0$　$\varphi(0,y) = \varphi(1,y) = 1$

  $0 \le x \le 1$　$0 \le y \le 1$

对正方形中任意一点，则 $y_0^{(n)} = F(S^{(n)}) - \frac{h^2}{4}\sum_{j=0}^{J^{(n)}} g_j^{(n)} = F(S^{(n)})$

$\overline{\phi_i} \sim \frac{\sum_{n=1}^{N} y_i^{(n)}}{N} = \frac{\sum_{n=1}^{N} F(S^{(n)})}{N}$ 为区域内数值解

- Metropolis方法　从X取值区间内选择一个初始点 x_0，如下游走

(1) 选取试探位置 $x_{try} = x_n + \eta_n$，η_n 为 $[-\delta, \delta]$ 随机数

(2) 计算 $r = f(x_{try}) / f(x_n)$

(3) 若 $r \ge 1$，步进成功，$x_{n+1} = x_{try}$

(4) 若 $r < 1$，产生 $[0,1]$ 随机数 ξ，若 $\xi \le r$，步进成功，$x_{n+1} = x_{try}$

若 $\xi > r$ 则拒绝 x_{try}，重新试探 x_{n+1}

讨论：(a) 只有游走足够多步才能收敛到 $f(x)$ 的分布

(b) 参数 δ 的选择：δ 太小，可能使绝大多数步子被接受，难达平衡

δ 太大，大多步子被拒绝，出现效率问题

(c) 初始位置 x_0：尽快到达平衡，一般取 $f(x)$ 最大区域

伊辛模型 —— 简单. 忽略与格点相关的原子的能动

仅包括了最相邻原子间作用能

$$S_i = \begin{cases} 1 & \text{自旋} \uparrow \\ -1 & \text{自旋} \downarrow \end{cases}$$

体系

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{i=1}^{N} S_i \sum_{\langle i,j\rangle} S_j - \mu B \sum_{i=1}^{N} S_i$$

μ 单个自旋的磁矩.

$J>0$ 铁磁体模型，自旋倾向同方向排列

$J<0$ 反铁体模型　　　　反方向.

配分函数 $Z = \sum_{s} e^{-\beta H(s)}$

$\beta = \frac{1}{kT}$　　$\vec{s} = \{S_i\}$ 自旋态位形

磁化强度 $M = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \sum_{s} M(\vec{s})\, e^{-\beta H(\vec{s})}$

$$M(\vec{s}) = \sum_{i=1}^{N} S_i$$

$\boxed{\text{怎么抽样？}}$

玻尔兹曼分布

$$p(\vec{x},T)\,dx = (Z)^{-1} f(H(\vec{s}))\,d\vec{x}$$

$$= (Z)^{-1} e^{-\beta H(\vec{s})}\,d\vec{x}$$

● 有限差分法　　与计算方法中相似

考虑 $\begin{cases} \nabla^2\phi = q(x,y) & \text{在}D\text{内} \\ \phi|_G = g(p) & \text{在}D\text{的边界}G\text{上} \end{cases}$

直接迭代式：$\phi_{ij}^{(k+1)} = \frac{1}{4}\left[\phi_{i+1,j}^{(k)} + \phi_{i-1,j}^{(k)} + \phi_{i,j+1}^{(k)} + \phi_{i,j-1}^{(k)} - h^2 q_{ij}\right]$

高斯-赛德尔迭代：$\phi_{ij}^{(k+1)} = \frac{1}{4}\left[\phi_{i+1,j}^{(k)} + \phi_{i,j+1}^{(k)} + \phi_{i-1,j}^{(k+1)} + \phi_{i,j-1}^{(k+1)} - h^2 q_{ij}\right]$

超松弛迭代：　将上式作为一个中间结果 $\overline{\phi}_{ij}^{(k+1)}$

$$\Rightarrow \phi_{ij}^{(k+1)} = w\overline{\phi}_{ij}^{(k+1)} + (1-w)\phi_{ij}^{(k)}$$

$$= (1-w)\phi_{ij}^{(k)} + \frac{w}{4}\left(\phi_{i+1,j}^{(k)} + \phi_{i,j+1}^{(k)} + \phi_{i-1,j}^{(k+1)} + \phi_{i,j-1}^{(k+1)} - h^2 q_{ij}\right)$$

$1 \le w \le 2$ 时收敛速度好　　$w=1$ 时就是高斯赛德尔迭代

第一类边值问题

最佳 $w_0 = \dfrac{2}{1+\sin(\frac{\pi}{L})}$（正方形） or $w_0 = 2-\pi\sqrt{2\left(\frac{1}{L^2}+\frac{1}{m^2}\right)}$（矩形）

● 有限元素法　（详见讲义）

• 有限差分法和有限元素法的比较

(1) 处理问题的数学方法上：

有限差分法：从物理模型出发，列出偏微分方程及定解条件，通过网络划分将问题离散化对差分方程组的数值求解

有限元素法：将物理问题化为对泛函求极值的变分方程，利用差分法的区域划分的离散化方法，并通过元素划分所构造的插值函数，把求解连续的变分方程问题离散化为求解线性方程组（问题在离散化的整个过程中始终具有明确物理意义）

(2) 对区域的离散化方法：

有限差分法：矩形网络区域划分，很难实现网络节点在区域中的、配置与边界的良好逼近。

有限元素法：三角形划分，对节点在区域中的配置方式比较随意，可以根据边界条件来选择。

(3) 有限差分法：孤立地对微分方程及定解条件分别列差分方程，因而各节点精度总体上不够一致。 适用范围十分广泛（特别是当边界形状比较规则时）

有限元素法：用统一的观点对区域内的节点和边界列出计算格式，使各节点的计算精度总体上比较协调
要求的计算机内存量大，需要准备输入的数据量也比较大。 很多物理还不能求解

● 分子动力学方法

周期性边界条件：消除引入元胞后的表面效应，构建一个准无穷大的体积来更精确地代表宏观效应。

$$A(\vec{x}) = A(\vec{x}+\vec{n}L) \quad \vec{n}=(n_1\ n_2\ n_3)$$

最小像力约定：在由无穷重复的分子动力学元胞中，每一个粒子只同它所在的基本元胞内的另外 N-1 个中每个粒子或其最邻近的影像粒子发生相互作用

$$r_{ij} = \min(|\vec{r_i}-\vec{r_j}+nL|) \quad 对一切 n$$

Lennard-Jones 位势： $V(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$

$-\varepsilon$ 是位势最小值（ε 可确定能量的单位）

这个最小值出现在 $r=2^{\frac{1}{6}}\sigma$ 的地方 [σ 可确定长度的单位]

[时间标度单位用 $\sqrt{\frac{m\sigma^2}{48\varepsilon}}$] $r=\sigma$ 时 位势为零

在L-J势下，第i个粒子与元胞内其他N-1个粒子或其最邻近的影像粒子的相互作用力在X方向的分量为

$$F_{i,x}=48\left(\frac{\varepsilon}{\sigma^2}\right)\sum_{j=1,j\neq i}^{N}(x_i-x_j)\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{14}-\frac{1}{2}\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{8}\right]$$

- 微正则系综的分子动力学模拟

(1) 给定初始空间位置 $\{\vec{r}_i^{(1)}\}$ 初始速度 $\{\vec{v}_i^{(1)}\}$ $i=1,2,\cdots,N$

(2) 利用公式 $\vec{r}_i^{(n+1)}=\vec{r}_i^{(n)}+h\vec{v}_i^{(n)}+\vec{F}_i^{(n)}h^2/2m$ 计算所有粒子在第n+1步的空间位置，h为时间步长

(3) 计算第n+1步所有粒子的速度 $\vec{v}_i^{(n+1)}=\vec{v}_i^{(n)}+h(\vec{F}_i^{(n+1)}+\vec{F}_i^{(n)})/2m$

(4) 返回(2)开始第n+2步模拟

★假如总能量不等于给定恒定值，则通过对速度的调整来实现能量守恒，即将速度乘以一个标度因子 $\beta=\left[\frac{T^*(N-1)}{16\sum_i V_i^2}\right]^{\frac{1}{2}}$

- 正则系综的分子动力学模拟

(1) 给定初始空间位置 $\{\vec{r}_i^{(1)}\}$ 初始速度 $\{\vec{v}_i^{(1)}\}$ $i=1,2,\cdots,N$

(2) 计算所有粒子在第n+1步的空间位置 $\vec{r}_i^{(n+1)}=\vec{r}_i^{(n)}+h\vec{v}_i^{(n)}+\vec{F}_i^{(n)}h^2/2m$

(3) 计算所有粒子在第n+1步的速度 $\vec{v}_i^{(n+1)}=\vec{v}_i^{(n)}+h(\vec{F}_i^{(n+1)}+\vec{F}_i^{(n)})/2m$

动能 $E_k=\frac{1}{2}\sum_i m(v_i^{(n+1)})^2$

速度标度因子 $\beta=\left[\frac{(3N-4)kT}{\sum_i m(v_i^{(n+1)})^2}\right]^{\frac{1}{2}}$

(4) 将速度 $\{\vec{v}_i^{(n+1)}\}$ 乘以标度因子β，并令 $\{\vec{v}_i^{(n+1)}\beta\}\to\{\vec{v}_i^{(n+1)}\}$ 返回(2)开始第n+2步模拟.

- Mathematica的应用

机器学习

机器学习类型

(1) 监督学习：通过学习确定操作FUN，用作预言

OUT = FUN(IN)　分类/回归算法

(2) 非监督学习：通过学习确定数据集的(隐藏)结构.

仅IN　归类和聚合算法.

(3) 强化学习：通过在仔细选择的反馈下学习如何达到目标

仅IN和环境反馈　游戏算法.

$p \gg n$ 稀疏情形 结果不可靠

测试和训练的统计误差 $Var. \sim \frac{\sigma^2 p}{n}$

引入 Ridge 正则化 $w_{Ridge}(t) = \underset{w \in R^p,\ \|w\|_2^2 \le t}{\arg\min} \|\vec{X}\vec{w} - \vec{y}\|_2^2$

LASSO 正则化 $w_{LASSO}(t) = \underset{w \in R^p,\ \|w\|_1 \le t}{\arg\min} \|\vec{X}\vec{w} - \vec{y}\|_2^2$

使模型参数受约束（取值范围）→ 减小统计方差 但增大偏差

交叉熵 $l(w) = \sum_{i=1}^{n} y_i \log \sigma(x_i^T w) + (1-y_i) \log[1-\sigma(x_i^T w)]$

逻辑回归代价函数的一般形式 $S = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$

softmax 交叉熵代价函数

$$C(w) = -\sum_{i=1}^{n} \sum_{m=0}^{M-1} y_{im} \log P(y_{im}=1 | x_i, w_m) + (1-y_{im}) \log[1-P(y_{im}=1 | x_i, w_m)]$$

集成学习 $\underbrace{g_L^A(x_i \{\theta\})}_{\text{集成模型}} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \underbrace{\hat{g}_L(x_i \theta_m)}_{\text{单个模型}}$

合并多个较弱统计模型提高学习效用，增强预言力。

尽可能在偏差可控下减小统计方差

① 手段：装袋算法（等权平均单个模型）
- 优：统计弱关联，减小方差（经验集抽样法）
- 缺：产生随机集都来自观测数据，可导致偏差变大。

② 但可以给 good 模型更高权重，提高效率（增强算法）

③ 决策树（根据点→叶子（决策）的映射 $y=f(x)$

PPT！ 用特征划分数据子集"分叉"
最末端叶子对应类别

越高（复杂）越好，但易出现过拟合（统计什么意思大
分类效果

"二叉树" $\text{Gini Impurity} = 1-\sum_{i=1}^{n} p_i^2$ 其值越低，分类效果越好

④ 随机森林　　随机生成基于经验集成算法
↓ 采用随机生成的特征子集

效果依赖：装袋、增强算法、树木多少及每棵树的深度等超参的设置与优化

梯度增强树（增强算法、梯度下降法）

神经元网络　基本结构（映射关系＋网络结构）

深度神经元网络	DNN	深度学习
卷积	CNN	图像学习
循环		自然语言处理

输入层　隐藏层　输出层

$$a^{l+1}=\sigma\Big[\sum(\underbrace{w_i}_{\text{权重因子}} a_i^{l}+\underbrace{b_i}_{\text{阈值}})\Big]$$

反向传播算法（BP）
1. 正向传播 得到当前网络下各神经元取值
2. 从最末端输出层 计算代价函数误差 Δ
3. 利用式子反向推导，得到代价函数关于所有参数的偏微分
4. 进行步进 → 梯度下降

线性回归
决定系数

$$R^2 = 1-\frac{\sum_{i=1}^{n}\left|y_i^{true}-y_i^{pred}\right|^2}{\sum_{i=1}^{n}\left|y_i^{true}-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i^{true}\right|^2}$$