

随机数:

- 分为真随机、伪随机
- 好的随机性(独立性、均匀性)、速度快.
- Lehmer 线性同余法:

$$I_{n+1} = (aI_n + b) \bmod m \quad ; \quad x_n = I_n / m$$

强烈依赖于 a, b, m 的选择

- 16807 产生器: 32 位机上很有效的产生器.

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

* Schrage 方法:

① 设 $m = aq + r$, $q = \lfloor m/a \rfloor$, $r = m \bmod a$

$$\begin{aligned} \text{② } aI_n \bmod m &= \left(\frac{I_n}{q}(aq+r) - \frac{rI_n}{q} \right) \bmod m \\ &= \left\{ \left[\frac{I_n}{q} \right] (aq+r) + \frac{I_n \bmod q}{q} (aq+r) - r \left[\frac{I_n}{q} \right] - r \frac{I_n \bmod q}{q} \right\} \bmod m \\ &= \left\{ a(I_n \bmod q) - r \left[\frac{I_n}{q} \right] \right\} \bmod m \end{aligned}$$

③ $a(I_n \bmod q)$ 和 $r \lfloor I_n/q \rfloor$ 均在 $[0, m-1]$ 之间, 不会越界.

$$\text{则 } I_{n+1} = \left\{ a(I_n \bmod q) - r \left[\frac{I_n}{q} \right] \right\} \bmod m.$$

0 伪随机数的检验:

① 独立性: 自相关函数 $\langle 1 \rangle$ $C(l) = \frac{\langle X_i X_{i+l} \rangle - \langle X_i \rangle^2}{\langle X_i^2 \rangle - \langle X_i \rangle^2}$

$$\langle 1 \rangle C(l) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-l} X_i X_{i+l} - \langle X \rangle^2 \quad |C(l)| \sim O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

② 均匀性: $\langle 1 \rangle X^2$ 检验: $J^2 = \sum_{k=1}^K \frac{(n_k - m_k)^2}{m_k}$: 自由度 $\nu = k-1$ 的 χ^2 分布.

$$\langle 2 \rangle \langle X^k \rangle: \langle X^k \rangle = \frac{1}{N} \sum X_i^k, \quad \langle X^k \rangle \sim \frac{1}{k+1}; \quad |\langle X^k \rangle - \frac{1}{k+1}| \sim O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

* Fibonacci 延迟产生器:

$$I_n = I_{n-p} \oplus I_{n-q} \bmod m \quad \text{其中 } \oplus \text{ 表示加、减、乘、XOR.}$$

优势: 周期很长

抽样:

* 平均: $\langle x \rangle$

方差: $\text{Var}(x) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

矩: $\langle x^k \rangle$

标准差: $\sigma = \sqrt{\text{Var}(x)}$

① 直接抽样:

(1) 离散型: (2) 连续型: 累积分布函数

② 变换抽样: $\int_a^b f(x) dx = \int_A^B g(y) dy$ 多变量情况类似

例1: 指数分布, $p(x) = \lambda^{-1} e^{-x/\lambda} (x > 0)$

直接抽样: $f = \int_0^x p(t) dt = 1 - e^{-x/\lambda} \Rightarrow x = -\lambda \ln(1-f) \sim -\lambda \ln f$

例2: Gauss分布: $p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2} \xrightarrow{x \rightarrow \sigma x + \mu} p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$

$x = \sqrt{-2 \ln u} \cos 2\pi v$

$u = \exp[-(x^2+y^2)/c]$

$\left| \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)} \right| = \frac{1}{2\pi} e^{-(x^2+y^2)/2} = p(x) \cdot p(y)$

$y = \sqrt{-2 \ln u} \sin 2\pi v$

$v = (2\pi)^{-1} \arctan(x/y)$

* 2位 Gauss 分布: $f(x,y) = (2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-\rho^2})^{-1} \exp[-\frac{1}{2(1-\rho^2)} (\frac{(x-\mu_1)^2}{\sigma_1^2} - \frac{2\rho(x-\mu_1)(y-\mu_2)}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{(y-\mu_2)^2}{\sigma_2^2})]$


* $u = \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} (\frac{x_1-\mu_1}{\sigma_1})$ $v = \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} (\frac{x_2-\mu_2}{\sigma_2})$

$t_1 = u - \rho v$

$t_2 = \sqrt{1-\rho^2} v$

$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x,y) dx dy = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\sqrt{1-\rho^2}} e^{-\frac{1}{2}(t_1^2+t_2^2)} dt_1 dt_2$

③ 盒选抽样:

(1) 离散分布的图形盒选: 

(2) 盒选抽样: $f(x)$ 为待抽分布, $g(x)$ 为包络 ($g(x) > f(x)$)

① 抽一个满足 $\frac{g(x)}{\int g(x) dx}$ 分布的 g_1

② 盒选: 取一个均匀分布的 $g_2 \rightarrow g_2 > \frac{f(g_1)}{g(g_1)} \Rightarrow$ 重抽 g_1, g_2

$g_2 \leq \frac{f(g_1)}{g(g_1)} \Rightarrow$ 则 g_1 为最终抽得的数




* 面积为抽样效率.

* 拓展: 上述为: 先抽 g , 再用 f/g 盒选, 得到 $g \cdot g_1 \sim f$.

则对于乘分布 $h = g \cdot f$, 可以先抽 g , 再用 f 盒选, 得到 $g \cdot f \sim h$

MC 计算定积分:

① 投石法: 

② 平均值法: $\int_a^b f(x) dx \approx (b-a) \langle f \rangle$

高维: $\int f dV \approx V \cdot \langle f \rangle$

* 大数定律: $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum f}{N} = \mu$.

* 中心极限定理: $\frac{\langle f \rangle - \mu}{\sigma_f / \sqrt{N}} \rightarrow N(0, 1)$ 或 $\langle f \rangle - \mu \sim N(0, \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}})$

$\therefore f$ 的测量误差为 $\sigma_s = \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}}$.

因此平均值法中 $\int f dV = V (\langle f \rangle \pm \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}})$

③ 重要抽样法.

$$I = \int f(x) dx = \int \frac{f(x)}{g(x)} g(x) dx.$$

若 X 在 V 内的分布为 $g(x)$, 即 $P(x \sim x+dx) = g(x) dx$,

$$\text{则 } I = \sum \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \frac{1}{N} \cdot V,$$

布朗运动:

结论1: 一维随机: $\langle x^2 \rangle = 2Dt$, n 维随机 $\langle x^2 \rangle = 2nDt$. ($D = \frac{kT}{6\pi\eta a}$ a: 球半径)

结论2: 概率密度 $P(x,t)$ 满足: $\frac{\partial P}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$ (扩散方程/热传导方程)

$$\text{则 } P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} = N(0, \sigma^2) \quad (\sigma = \sqrt{2Dt})$$

结论3: 定义“涨落”: $\delta A(t) = A(t) - \langle A \rangle$

$$\text{方差 } \text{Var}(x) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

$$\text{协方差 } \text{Cov}(x,y) = \langle (x - \langle x \rangle)(y - \langle y \rangle) \rangle = \langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle$$

$$\text{相关系数 } \text{Cor}(x,y) = \frac{\text{Cov}(x,y)}{\sqrt{\text{Var}(x)\text{Var}(y)}} \quad \langle A(t) \rangle = 0$$

$$\text{自相关函数 } C(t) = \text{Cov}(A(t), A(0)) = \langle \delta A(t) \delta A(0) \rangle = \langle A(t)A(0) \rangle - \langle A \rangle^2$$

$$* C(t) = C(-t); C(0) = \text{Var}(A)$$

$$\text{则, 对于 } \nabla \text{ 来说, } C(t) = \frac{1}{2} \langle \nabla(t) \nabla(0) \rangle = C(0) e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (3 \text{ 维})$$

计算过程:

1. Smoluchowski 方法: 一维运动, 向右/左概率相同, 向右 $\frac{1}{2}(n+m)$ 次, 向左 $\frac{1}{2}(n-m)$ 次.

$$\text{由二项式公式得 } P_n(m) = \dots \Rightarrow \langle m \rangle = 0, \langle m^2 \rangle = n \cdot \xrightarrow{\text{连续化}} \langle x \rangle = 0, \langle x^2 \rangle = \langle m^2 \rangle l^2 = n \cdot l^2 = l^2 \cdot \frac{t}{\tau} = 2Dt$$

$$\text{实际上由 } n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \text{ 可得 } P_n(m) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} e^{-\frac{m^2}{2n}}$$

$$\text{由 } m = x/l, n = t/\tau \text{ 得 } P_n(m), \text{ 再用 } P_n(m) = P(x,t) dx = p(x,t) \cdot l \cdot \Delta m = P(x,t) \cdot 2l,$$

$$\text{得 } P(x,t) = N(0, \sigma^2) \quad (\sigma = \sqrt{2Dt})$$

2. Einstein 的理论:

粒子在 L 内在 x 方向移动 Δ 的概率密度为 $P(\Delta)$, 有 $P(\Delta) = P(-\Delta)$, $\int P(\Delta) d\Delta = 1$

设粒子数密度: $f(x,t)$, 则 $f(x, t+\tau) dx = dx \int_{-\infty}^{+\infty} f(x+\Delta, t) P(\Delta) d\Delta$

$$\downarrow \quad \downarrow$$

$$f + \tau \frac{\partial f}{\partial t} + \dots \quad f + \Delta \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \dots$$

$$\Rightarrow \dots \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2\tau} P(\Delta) d\Delta \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = D \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (D = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2\tau} P(\Delta) d\Delta)$$

3. 由方差推导:

$$\mu = \langle x_i \rangle = 0 \quad \sigma^2 = \text{Var}(x_i) = \langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2 = \frac{1}{2} l^2 + \frac{1}{2} (-l)^2 = l^2$$

$$\text{走了 } N \text{ 步之后, } \text{Var}(2N x_i) = N \cdot l^2$$

4. 用递推函数描写:

$$P_{n+1}(m) \pm \frac{1}{2} [P_n(m+1) + P_n(m-1)] \Rightarrow P(x, t+\tau) = \frac{1}{2} [P(x+\tau, t) + P(x-\tau, t)]$$

由 $\frac{1}{\tau} [P(x, t+\tau) - P(x, t)]$ 作 $\tau \rightarrow 0$, 可得 $\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$.

5. Feynman: $\vec{r}_n = \vec{r}_{n-1} + \vec{L} \Rightarrow r_n^2 = r_{n-1}^2 + L^2 + 2\vec{r}_{n-1} \cdot \vec{L} \Rightarrow \langle r_n^2 \rangle = \langle r_{n-1}^2 \rangle + L^2 = nL^2$.

$$\therefore \langle r_n^2 \rangle = \frac{L^2}{\tau} \cdot (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) = 3L^2 \frac{t}{\tau} = 6Dt$$

6. Langevin 理论 (Brownian 动力学).

① 粘滞阻力: $-\frac{\gamma}{B} \vec{v}$ (B 迁移率).

② 快速涨落力: $\vec{F}(t)$ (系统特征时间 $\tau \gg$ 碰撞时间)

Langevin 方程: $m \frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\gamma}{B} \vec{v} + \vec{F}(t)$ ($\langle \vec{F} \rangle = 0$, $\frac{\gamma}{B} = 6\pi\eta a$)

解方程得: $\vec{v}(t) = \vec{v}(0) e^{-\frac{t}{\tau}} + e^{-\frac{t}{\tau}} \int_0^t e^{\frac{t'}{\tau}} \cdot \frac{\vec{F}(t')}{m} \cdot dt'$

$$\Rightarrow \langle \vec{v}(t) \cdot \vec{v}(0) \rangle = \langle v^2(0) \rangle e^{-\frac{t}{\tau}}$$

即 $C(t) = \frac{1}{3} \langle \vec{v}(t) \cdot \vec{v}(0) \rangle = C(0) e^{-\frac{t}{\tau}}$.

* 第一涨落耗散定理: $D = \frac{1}{3} \int_0^\infty \langle \vec{v}(t) \cdot \vec{v}(0) \rangle dt = \int_0^\infty C(t) dt$

推导: $\text{Var}(\vec{r}(t)) = 6Dt \Rightarrow \frac{d}{dt} \text{Var} \vec{r}(t) = 6D \quad (t \rightarrow \infty)$

左式 = $2 \cdot \text{cov} \{ \vec{r}(t), \vec{v}(t) \} = 2 \langle \vec{r} \cdot \vec{v} \rangle - 2 \langle \vec{r} \rangle \langle \vec{v} \rangle$

由于 $\vec{r} = \int_0^t \vec{v}(t') dt'$, 代入左式 = $2 \cdot \int_0^t \langle \vec{v}(t') \cdot \vec{v}(t) \rangle dt' = 2 \cdot 3 \int_0^t C(t-t') dt' = 2 \cdot 3 \int_0^t C(t) dt'$

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

则 $D = \int_0^\infty C(t) dt = \frac{1}{3} \int_0^\infty \langle v^2 \rangle e^{-t/\tau} dt = \frac{1}{3} \langle v^2 \rangle \tau = \frac{kT}{m} \tau = kTB$

$\Rightarrow D = kTB = \frac{kT}{6\pi\eta a}$ (Einstein 关系)

* 由 $m \frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{\gamma}{B} \vec{v} + \vec{F}(t)$ 及 $\vec{r} = \int_0^t \vec{v}(t') dt'$ 可得: $\langle r^2 \rangle = \frac{6kT}{m} \tau^2 \left[\frac{t}{\tau} - [1 - \exp(-t/\tau)] \right]$ ($\frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{3}{2} kT$, $\langle v^2 \rangle = \frac{3kT}{m}$)

$t \ll \tau$ 时, $\langle r^2 \rangle \sim t^2$

$t \gg \tau$ 时, $\langle r^2 \rangle \sim 6Dt \sim t$

随机运动及模拟

RW: 随机行走

SAW: 自规避: 与之前轨迹交叉即死之.

GSAW: 生长自规避: 避免与之前轨迹交叉(但若走到死胡同, 则无路可走, 必死)

* 标度指数的对数算法:

(同朗之理论, $\langle r^2 \rangle$ 并不严格为 $\propto N$, 而是 $\langle r^2 \rangle = aN^{2\nu} (1 + bN^{-d} + \dots)$)

取对数, $\ln \langle r^2 \rangle \sim 2\nu \ln N$

$$\Rightarrow \nu(N) = \frac{1}{2} \frac{\ln \langle r^2(N+i) \rangle - \ln \langle r^2(N-i) \rangle}{\ln(N+i) - \ln(N-i)}$$

(对 SAW, $\nu = 3/4$ ($d=2$) $\nu \approx 0.588$ ($d=3$) $\nu = 1/2$ ($d \geq 4$))

SAW 主要用于计算 高分子的物理构型.

生长模型 (非平衡生长)

1. Eden 模型: 在生长点周围未占据的点中随机选一个占据.

(生长图案是紧凑的, 多为圆形, 表面粗糙)

变种: 有竞争, 例如癌细胞的生长.

A 为生长点, 周围癌细胞带权重 k , 正常细胞带权重 1.

先选择 A 周围的细胞 B 作为生长权利点.

再从 B 周围选一个细胞 C 作为 B 的同化对象.

2. 弹道聚集模型: 粒子从各处飞来粘在原有的集团上 (直线飞行)

变种: 弹道沉积模型: 接触到原集团后, 不马上停止而是由热运动

沉积在高集团更近的位置.

(用来模拟表面上原子沉积镀膜, 相比聚集模型, 形成的层更致密)

3. DLA (扩散受限聚集模型).

粒子从各处作无规运动撞在集团上 (并粘连)

特点: 集团的尖端生长很快, 粒子很难进入沟槽中.

4. Laplace生长.

在区域V内有电荷分布, 满足Poisson方程: $\nabla^2 \phi(x,y) = \rho(x,y)$, 边界给定 $\phi|_{\partial V} = \Phi$

则可以用随机游走求解任一点的电势 $\phi_0(x,y)$

① 网格化.

② 将Poisson方程化为离散形式: $\phi_{i,j} = (\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} + \phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - h^2 \rho_{i,j}) / 4$

③ 化为几率表达式: $\phi_0 = \frac{1}{4} \phi_1 + \frac{1}{4} \phi_2 + \frac{1}{4} \phi_3 + \frac{1}{4} \phi_4 - h^2 \rho_0 / 4$.

④ 从 (x,y) 处随机游走, 当从 $k \rightarrow k+1$ 步时, 有 $\phi_k = \phi_{k+1} - h^2 \rho_k / 4$.

⑤ 则 $\phi_0 = \Phi(1) - \frac{h^2}{4} \sum \rho_k$ (s 为最后游走到边界的点)

⑥ 多次取平均, 即为 $\phi_0(x,y)$ 的值.

粒子输运问题

以电子为例: ① 产生时, 并运动 S , S 满足指数分布 $P(s) = \lambda^{-1} \exp(-s/\lambda)$

② 然后电子发生散射.



2.1 确定电子作用对象 2.2 确定是各异性还是非弹性散射.

③ 3.1 弹性: 则 $\Delta E = 0$, $\Delta \theta$ 由微分截面抽样.

3.2 非弹性: 则 ΔE 与 $\Delta \theta$ 均由相互的微分截面确定.

逾渗问题

点阵上的通道被随机地闭合或打开 (打开的概率为 p), 可能形成大的通路.

① 分类:
 { 座逾渗: 顶点,  (配位数: 4) ...
 键逾渗: 边,  (配位数: 6) ...

* 配位数: 单个通道周围有多少个通道, 配位数越大, 逾渗阈值 p_c 倾向于越小.

* 若一个座有 k 个近邻座, 则一条键必有 $2(k-1)$ 个近邻键.

* 逾渗阈值 p_c .

当 $p < p_c$ 时, 不出现无限连通.

当 $p > p_c$ 时, 迅速出现无限连通.

(3). 边缘维数.

当 $d > d^*$ 时, 各个临界指数是某个常数.

这一点, 进一步加强了逾渗与二级相变理论的相似性.

④ 计算机模拟:

以座逾渗为例: 描述方式: 二维数组

集团标识的算法:

(1) 先逐点扫描一次, 规则为: 下, 左均无占据格子, 则标识符加 1.

(2) 由于(1)中扫的结果有重复错误, 所以要作一次修正, 方法为:

如果某一格子下, 左均占据且数字不同, 则此格子所属集团号

等于较小的数, 且令较大的数字标记集团与较小标记集团为同一集团.

⑤ 逾渗模型的应用:

局部的相变导致整体行为的变化 (参见“果树染病”的例子)

数值重整化

逾渗问题中, 各格点被占据的概率是 p , 则可以将格点进行粗粒化平均, 得到每个粗粒被占据的概率 p' . 此时, 粗粒化将多个格点变成一些尺寸较大的集合 (每个集合含有 b^d 个格点, 其中 b 为线性度, d 为维数) 对这些较大的集合再不断地粗粒平均, 可以得到无限大格点的被占据概率.

* 上述过程中, 若初始 p 很小, 接近于 0, 则 p' 可能也不断变小, 最终趋于 0.

若初始 p 很大, 接近于 1, 则 p' 可能不断变大, 最终趋于 1.

若 p 刚好为 p_c , 则 p' 基本也为 p_c . p' 不会随迭代变为 0 或 1.

* 用数学语言描述: 设 $p' = R(p)$. 则 $R(p) = p$ 的解对应于 p_c .

* 物理上, $p = p_c$ 是不稳定的, $p = 0$ / $p = 1$ 是稳定点.

② 物理描述:

(1) 平均集团大小分布: $n_s(p) = \frac{\text{大小为 } s \text{ 的集团数}}{\text{格点总数}}$

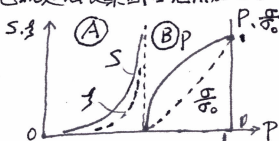
集团大小: $s = \text{一个集团中的格点个数}$

平均集团大小: $S = \sum_s s \cdot \omega_s = \sum_s \frac{s \cdot s n_s}{\sum_s s_0 n_{s_0}}$
↑
概率

(2) 集团的平均跨越长度: ξ ; 有多种定义方式. 例如 $\xi = \langle \max\{|r_i - r_j| \} \rangle$
 ξ 表示集团的尺度.

(3) 渗透概率: P : $P = P_\infty(p)$ 当发生无限连通 ($p > p_c$) 时, 点阵中任一点, 属于无限集团的概率. 也就是无限集团占总点数的比例.

(4) 电导率: σ .



③ 相关规律:

(1) 临界行为:

A区域: $S(p) \sim |p - p_c|^{-\delta}$
 $\xi(p) \sim |p - p_c|^{-\nu}$

B区域: $P(p) \sim (p - p_c)^\beta$ ($\beta < 1$)
 $\sigma(p) \sim (p - p_c)^t$ ($t > 1$)

ν, δ, β, t 称为临界指数值.

* 体现了渗透与二阶相变的相似性.

(2) 有限尺度标度法:

MC模拟渗透时, 不能取无限大系统, 因此计算有误差.

我们认为主要原因是边界效应: MC点阵长度 $\sim L$.

若 $\xi \sim L$, 则无法得到正确的 S, P 变化.

解决方案: 认为 $\xi(p) \sim L \sim |p - p_c|^{-\nu} \Rightarrow |p - p_c| \sim L^{-1/\nu}$

则 $P \sim L^{-\beta/\nu}$ 可得 β/ν 及 σ/ν , 再通过标度律解 β, t, ν .

$S \sim L^{-\delta/\nu}$

(标度律: $2\beta + \delta = \nu d$, d : 空间维数)

* 标度变换求临界指数

设 p^* 为计算 $P=R(p)$ 得到的 P_c , p 为 P_c 附近的一个点.

$$\text{设 } p' = R(p) \quad p^* = R(p^*) = p^* .$$

则: 对于倍数为 b 的标度变换, 由于 $\xi \propto |p - p_c|^{-\nu}$

$$\text{所以由 } \xi \sim \xi/b \text{ 得 } |p' - p^*|^{-\nu} = b^{-1} |p - p^*|^{-\nu}$$

$$\text{而 } p' - p^* = R(p) - R(p^*) \approx \lambda (p - p^*) \quad \text{其中 } \lambda = R'(p)|_{p=p^*}$$

$$\text{所以 } \lambda^{-\nu} = b^{-1} \Rightarrow \nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda} = \frac{\ln b}{\ln R'(p)|_{p=p^*}}$$

混沌

1. 非线性方程求根:

① 迭代法: ~~$x_{k+1} = f(x_k)$~~ $x_{k+1} = f(x_k)$

② 多步迭代法: $x_{k+1} = f(x_k) = f(\alpha x_{k-1} + (1-\alpha)x_{k-2})$ (两步混合)

③ Newton迭代: $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ (④ 弦截法, 即将③中的 $f'(x_k)$ 换为差分)

2. 混沌.

① 迭代方程: 如 Logistic 方程: $x_{n+1} = \lambda x_n(1-x_n)$ ($0 \leq x \leq 1, 0 \leq \lambda \leq 4$)

用于模拟生物种群数量每年值的变化.

再如 $x_{n+1} = \lambda \sin(\pi x_n)$

② 状态图.

迭代方程中 λ 是个关键参量.

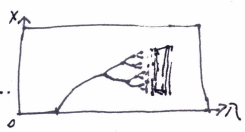
λ 取不同值时系统的行为不同.

系统的行为可以是: "0" (迭代后稳态为 0), "定态" (迭代后稳态为某一个 x_c)

"倍周期分叉" (迭代后稳态为周期性的 x_1, \dots, x_k)

"混沌" (无规).

将状态 x 与 λ 的值画出来, 即为状态图.



* 自相似性: 一些细小分叉放大后与整个图形相似.

* 初值的敏感性: 对于混沌态, x_k 与 x_0 十分相关.

③ Feigenbaum 常数 (δ 与 α)

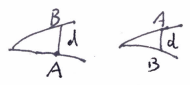
设 $1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 4, 4 \rightarrow 8, \dots$ 的 λ 为 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$.

则 $\frac{\lambda_m - \lambda_{m-1}}{\lambda_{m+1} - \lambda_m}$ 随 m 增大而趋向一个常数, 定义为 δ .

设 $x=0.5$ 的线与状态图交点为 $A_1, A_2, \dots, A_k, \dots$.

而 A_i 所在的二分叉中, 垂直对应的点为 B_i .

设 $d_m = |A_m B_m|$ 则 $d_m/d_{m+1} \rightarrow \alpha$ ($m \rightarrow \infty$)



* α 与 δ 是不依赖于迭代函数的普适常数

④ Lyapunov 指数

当初值不同时, $x_0 \neq x_0'$, 即 $dx_0 = |x_0 - x_0'| \neq 0$

迭代后的结果也不同, $x_1 \neq x_1', x_2 \neq x_2' \dots$ 即 $dx_1 \neq 0, dx_2 \neq 0, \dots$

为了定量描述这种快速发散的过程, 设 $dx_n = dx_0 e^{n\lambda}$.

$$\text{即 } \lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln(dx_n/dx_0)}{n}$$

对于混沌态, $\lambda > 0$, 对于 $\lambda < 0$, 对应于不动点和周期分叉.

分形和分维

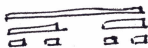
1. 维数的定义.

① 欧几里德维数 (经典维数): “有多少坐标数因”.


② 拓扑维数: 经连续变换后, 拓扑维数不变.

③ Hausdorff 维数: $D = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln(1/\varepsilon)}$

分形图形自相似性中, 单元长度为 ε 时, 整图所含单元数为 $N(\varepsilon)$

例如:  $\begin{matrix} \varepsilon = 1 & N = 1 \\ \varepsilon = 1/3 & N = 2 \\ \varepsilon = 1/9 & N = 4 \end{matrix} \Rightarrow D = \frac{\ln 2^4}{\ln 3^4} = \frac{\ln 2}{\ln 3}$

注: ε 是长度! 对于高维图形来说也是如此.

例:  $\begin{matrix} \varepsilon & N \\ 1 & 1 \\ 1/3 & 3 \\ 1/9 & 9 \end{matrix} \Rightarrow D = \frac{\ln 3}{\ln 3}$

* 规则分形的 Hausdorff 维数 (分形维数) 总大于拓扑维数.

这是由于发生了分形, 符合分形维数的定义.

* 可以用放大图形并自相似得到分形图.

也可以用自相似的办法延伸, 缩小得到分形图.

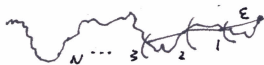
* 如果不完全自相似, 称为不规则分形.

2. 不规则分形维数的测定

A. 不规则(粗糙)曲线 B. 小岛气泡 C. 树叉, 分叉.

① 粗糙曲线的分形维数 (A)

$$N \sim \varepsilon^{-D} \Rightarrow D = -\frac{\ln N}{\ln \varepsilon}$$



② 周长-面积关系求分维 (小岛法) (B)

规则图形: $\begin{cases} \square: \text{周长 } P=4a & \text{面积 } A=a^2 \\ \bigcirc: & P=2\pi a & A=\pi a^2 \end{cases} \Rightarrow P \propto A^{\frac{1}{2}}$

不规则图形: $[P(\varepsilon)]^{1/D} = a_0 \varepsilon^{(1-D)/D} [A(\varepsilon)]^{1/2} = a_0 \varepsilon^{1/D} \varepsilon^{-1} [A(\varepsilon)]^{1/2}$

$$\frac{\log [P(\varepsilon)/\varepsilon]}{D} = \log a_0 + \log \left[\frac{A(\varepsilon)^{1/2}}{\varepsilon} \right]$$

③ 表面积-体积关系 (B)

规则图形: $A^{1/2} \propto V^{1/3}$

不规则图形: $[A(\varepsilon)]^{1/D} = a_0 \varepsilon^{(2-D)/D} [V(\varepsilon)]^{1/3}$

$$\frac{\log [A(\varepsilon)/\varepsilon^2]}{D} = \log a_0 + \log [V(\varepsilon)^{1/3}/\varepsilon]$$

④ 盒计数法: (C)



$$\varepsilon = 1$$

$$N = ?$$



$$\varepsilon = 1/2$$

$$N = ?$$



$$\varepsilon = 1/3$$

$$N = ?$$

... 直到足够小的单元.

数出所占格子数 N , 则 $N(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-D}$.

⑤ Sandbox 法 (C).

从中心开始, 以不同边长 r 的正方形作为计数单元, 数出正方形中占据格点数 N .

作双对数图 $\lg N - \lg r$, 则斜率为 D .

⑥ 面积(N) 回转半径(R_g)法.

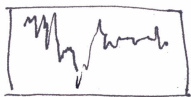
$$N \sim R_g^D \Rightarrow \ln N \sim D \ln R_g.$$

(1) 已知分形中心或质心时, $R_g^2 = \frac{\sum r_i^2}{N}$ ($i=1,2,\dots,N$).

(2) 无明确中心或质心时, $R_g^2 = \frac{\sum (\bar{r}_i - \bar{r}_j)^2}{2N(N-1)}$ ($i, j=1,2,\dots,N$)

(式中的主是由于 ij 被计算了2次)

⑦ 变换法: (A)



(1) 固定矩形宽度 R , 高度由最高、最低点决定.

(2) 每次移动一个像素, 求总面积. $S = \sum_{i=0}^{N-R} S_i$

(3) 改变 R , 求 S , 定义 $N = S/R^2$

$$\text{则 } N \sim R^{-D}, \text{ 即 } \ln N \sim \ln(1/R) \cdot D$$

※ 此方法也可以计算粗糙曲面(只不过不是矩形而是长方体柱).

⑧ 密度-密度相关函数法:

将原图形进行平移, 数出平移前后重叠区域的重叠点数,

并除以重叠区域的面积, 即 $p = \frac{\sum P(x,y)P(x',y')}{\Delta x \cdot \Delta y}$

其中 $P(r)$ 为图形的密度函数, 其值取 0 或 1; 当 r 为占据点, 取 1.

P 是 $\Delta r = \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}$ 的函数.

$\ln p \sim \ln \Delta r$ 的双对数图中, 斜率为 $\alpha = d-1$ (d 为欧式空间维数)

林氏系统和迭代函数系统

1. 林氏系统:

- V: 初始结构
- w: 公理, 迭代中遵循的基本规则
- P: 生成规则 (迭代规则)

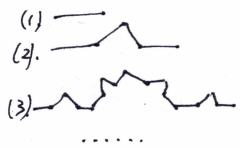
} → 组合之后, 用各种字符来描述分形的图样生成.

- * 符号规定:
- ① F: 向前走一步并画线
 - ② (可省略): 角度不变
 - + : 逆时针转 Angle
 - ③ [: 保存当前状态点

- G: 向前走一步, 不画线
- | : 转 180°
- : 顺时针转 Angle
-]: 画笔回到 "[" 的位置

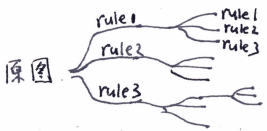
* 伪码示意:

Koch 曲线: { Angle 60 ;
 Axiom F ; // 初始图形
 F = F+F-+F ;
 }



- * L 系统特点: ① 简单, 易于实现 ② 适合模拟生成元比较明确的图形.
 ③ 有效地模拟植物结构, 绘制优美的图.

2. 迭代函数系统 (IFS)



为了便于程序实现, 给每一步 ^{采用} ~~生成~~ rule 1/2/3 设定了概率 P_i .
 P_i 的一种取法是: $P_i \propto$ 变换后图形的大小.

* 数学描述:

① 仿射变换及其系数:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + B$$

或者写为迭代形式:
$$\begin{cases} x' = ax + by + e \\ y' = cx + dy + f \end{cases}$$

② A的性质:

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \text{translation} \\ \text{translation} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 & 0 \\ 0 & t_2 \end{pmatrix}$$

旋转 扭曲 伸缩

$$\det A = \frac{S(D)}{S(D)} = \text{图形变换前后面积倍数 (变换后: 变换前)}$$

元胞自动机

1. 一维元胞自动机 (Wolfram)

- ① 设演化规则的半径为 r , 则包括自身共 $2r+1$ 个邻居。
 每个位置有 k 种可能状态, 即 $2r+1$ 个邻座有 k^{2r+1} 种排列。
 对于每种排列, 下一个时刻有 k 个不同取值, 即演化规则有 k^k 种。

② 一维元胞自动机的编码: (以 $r=1, k=2$ 为例)

第一行: 写出所有可能状态: 111 110 101 100 011 010 001 000

第二行: 写出规则: 0 1 0 1 1 0 1 0

最后, 转换 k 进制至 10 进制: $(01011010)_2 = 90$.

③ 长期行为:

定性地分为四类:

- <1> 全部是 0 或全部是 1 (均匀状态)
- <2> 定态, 或周期性的循环状态.
- <3> 混沌状态.
- <4> 更复杂的结构.

定值: 永远为初始.

镜面: 时刻等相邻的
 两个元胞.

周期: 只 

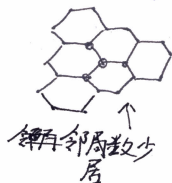
④ 边界条件: 有两个边界格点, 不参加演化规则, 则定义边界条件规则.

★ 无胞自动机对假定的机理进行模拟

分形对现象与结构进行模拟。

2. 二维元胞自动机:

① 常用网格: 六角网格, 四方网格, 三角网格



模拟简单



可适用各向同性介质

② 常用邻居层



Von Neumann 型



Moore 型



扩展的 Moore 型

③ 应用:

- <1> 表决模型: "多数决定"规则, Moore型, 形成了一些相当"粗糙"的畴域
- <2> 退火模型: "少数决定"规则, Moore型, 形成更大的畴域, 像退火过程
- <3> Ising 自旋动力学模型: Von Neumann型, 个知相邻时自旋翻转 (能量最低原则)
- <4> 格子气自动机: HPP模型, 可以用来研究粒子传播动力学。

演化规则: 单-粒子: 直线运动 \rightarrow \rightarrow

(完全可逆) 迎头相撞: 沿垂直方向转向 \leftarrow \downarrow

其它场合: 粒子各自直线运动, 互不影响。

FHP模型: 三角格点: 规则: 单-粒子: 直线

2粒子迎头碰撞: 偏转 60° \leftarrow \rightarrow

3粒子迎头碰撞, 各自反向。

其余: 互相穿透。



<5> 沙堆模型



可以模拟沙一样颗粒的堆积和到土崩。

<6> 森林火灾模型:

$k=3$: 2: 绿树 1: 正在燃烧 0: 空地.

规则: (1) $1 \rightarrow 0$

(2) $2 \rightarrow 1$, 若树周围有 1.

(3) $0 \rightarrow 2$, 概率为 P . (P 与环境有关)

(4) $2 \rightarrow 1$, 概率为 f . (f 一般很小)

有限差分方法

1. 有限差分思想:

用差分代替微分, 进行迭代, 求解微分方程中的未知函数.

* 两类问题:

① 初始值问题: 给定 $\phi(t_0)$, $\phi'(t_0)$

② 边界值问题: 给定 $\phi(t_0)$, $\phi(t_1)$

2. 在差分化, 迭代方程.

① (a) 一阶: $\phi'(x_n) \rightarrow \begin{cases} (\phi_{n+1} - \phi_n)/h \\ (\phi_n - \phi_{n-1})/h \\ (\phi_{n+1} - \phi_{n-1})/2h \end{cases}$

(b) 二阶: $\phi''(x_n) = (\phi_{n+1} + \phi_{n-1} - 2\phi_n)/h^2$

(c) 偏微分: $\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}$

$$= \frac{\phi_{m+1,n} + \phi_{m-1,n} - 2\phi_{m,n}}{h^2} + \frac{\phi_{m,n+1} + \phi_{m,n-1} - 2\phi_{m,n}}{h^2}$$

② 迭代方程.

(1) 利用①的格式直接代换.

(2) 线性多步法: $y_{n+1} = y_{n-p} + \int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} y' dx = \dots$

(3) Runge-Kutta方法.

(4) Verlet方法: 适用于 $\phi'' = f(\phi(t), t)$.

推导: Taylor展开: $\phi_{n+1} = \phi_n + h\phi'(t_n) + \frac{h^2}{2}\phi'' + \frac{h^3}{3!}\phi''' + \dots$

$$\phi_{n-1} = \phi_n - h\phi' + \frac{h^2}{2}\phi'' - \frac{h^3}{3!}\phi''' + \dots$$

$$\Rightarrow \phi_{n+1} + \phi_{n-1} = 2\phi_n + h^2\phi'' + O(h^4)$$

$$\phi_{n+1} = 2\phi_n - \phi_{n-1} + h^2 f_n(\phi_n, t_n) + O(h^4)$$

(5) Numerov法: 适用于 $\phi'' = f(x) \cdot \phi(x)$

作变量代换: $y(x) = \left[1 - \frac{h^2 f(x)}{12} \right] \psi(x)$,

可得: $y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + h^2 f_n y_n + O(h^6)$

3. 边界值问题.

* 打靶法: 从一个边界开始, 不断改变参数, 直到刚好满足边界条件.

分子动力学方法

Born-Oppenheimer 近似:

由于 $M_n \gg m_e$, $v_n \ll v_e$, 所以电子的运动和原子的运动可以互相分离.

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{R}) \cdot \phi(\mathbf{r}; \mathbf{R})$$

分子动力学: 只考虑核的运动 (牛顿定律近似), 电子的贡献由原子间

(MD) 相互作用势能 $U(\mathbf{R})$ 描述.

$$\nabla^2 \psi \left(\sum \frac{p_i^2}{2M} + U(\mathbf{R}) \right) \psi(\mathbf{R}) = E \psi(\mathbf{R})$$

局域电子密度泛函理论: 只考虑电子的动力学问题.

(DFT) $H \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = U(\mathbf{R}) \cdot \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$

1. MD 简介:

研究对象: 大量粒子 ($N \times 10^3$) 集合体系 (固、液、气; 原子、分子)

模拟方式: 确定地计算体系演化, 模拟拟相空间演化.

优点: 不依赖格子模型; 只能计算平衡态.

但收敛速度慢, 计算量大.

粒子分类: 硬球: 只有碰撞时才改变速度.

软球: 势能是连续函数.

2. 硬球模拟:

① 假设: (1) 弹性碰撞

(2) 碰撞时刻 t_c 对应于两球距离等于直径: $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2 = \sigma^2$

* 一维运动的模拟不能达到各态历经性, 得到的平衡态

性质不对.

② 二维或三维模拟的流程.

<1> 初始化:

① 计算相对长度和 相对密度

$$L^* = L/\sigma = (\pi N/6\eta)^{1/3}$$

$$\rho^* = N/V^* = \rho\sigma^3 = 6\eta/\pi$$

(其中 $\eta = N V_{\text{sphere}}/V = \pi\rho\sigma^3/6 = \pi N(\sigma/L)^3/6$ 为堆积分数)
(σ 为粒子直径)

② 以 KT 作为能量单位, 将时间和速度约化:

$$E = \frac{3}{2} NKT \Rightarrow \begin{cases} V^* = \sqrt{m/kT} \\ t^* = \frac{t}{\sigma\sqrt{m/kT}} \end{cases}$$

③ 给定初始坐标:

通常不用随机数(太慢了), 而是按规则的晶格排布(如面心立)

给定初始速度:

速度分布无所谓, 但需保证 $\bar{v} \sim$ 热动能.

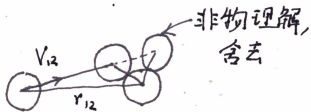
<2> MD模拟迭代.

① 构建 $\frac{N(N-1)}{2}$ 对球的碰撞时间表.

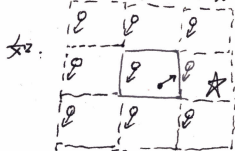
$$t_c - t_0 = \frac{-\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12} - \sqrt{(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12})^2 - v_{12}^2 (r_{12}^2 - \sigma^2)}}{v_{12}^2}$$

其中 $\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12} < 0$, $(\vec{v}_{12} \cdot \vec{r}_{12})^2 - v_{12}^2 (r_{12}^2 - \sigma^2) \geq 0$

注意:



*注意: 为了减少边缘效应, 需要对模拟区域进行周期性扩展.



打“*”号的是满足 $v_x \cdot v_x < 0$
且相对来说 $t_c - t_0$ 最小的.

① 在时间表中选择最小的, 作为下一步迭代的时间间隔.

② 更新粒子坐标, 若粒子飞出边界, 则利用周期性边界条件.

计算两碰撞粒子对的新速度矢量.

计算新的时间表.

*平衡态的判断:

3. 软王求模拟

(1) 势能的种类:

(a) 两体势: Lennard-Jones : $u = 4 \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$

Kihara : $u = 4 \epsilon \left[\left(\frac{\sigma-a}{r_{ij}-a} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma-a}{r_{ij}-a} \right)^6 \right]$

Morse : $u = A \left[e^{-2b(r_{ij}-a)} - 2e^{-b(r_{ij}-a)} \right]$

[适用于惰性气体和简单金属]

(b) 原子内嵌势:

$$u = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) - \sum_{j \neq i} F(p_j)$$

↑

带电原子空间的相互作用(排斥)

← 嵌到电子气中原子受力(吸引)

[适用于简单金属和过渡金属]

(c) 紧束缚势: [过渡金属, 合金]

(d) Tersoff & Brenner 势 [半导体]

* 一般来说, 势有吸引、排斥两项

* 为了节省计算资源, 对势能作截断。

(a) 只在 $r \leq r_c$ 内有 $u_c(r) = u(r)$: u, F 不连续。

(b) 只在 $r \leq r_c$ 内有 $u_c(r) = u(r) - u(r_c)$, u 连续, F 不连续。

(可以作势能尾部修正使 F 也连续)

(c) 只在 $r \leq r_c$ 内有 $u_c(r) = u(r) - u(r_c) - u'(r_c)(r-r_c)$: u, F 都连续。

(2) 求解牛顿方程的技术:

① 列表技术:

(a) 元胞列表法:

(计算量 $\propto N$ 而不是 N^2)

只考虑某一范围内的粒子作用



r_c (r_c = 势能截断半径)

(b) ~~元胞列表法~~下的最小映像判据.

周期性边界条件下, 不仅真实粒子, 而且映像粒子也会施加作用力.

(c) Verlet 列表法:

不是每步都全部更新列表, 节省时间.

(d) Beeker 列表法:

周期性边界条件下的 Verlet 列表法.

② 计算位置和速度的技术:

(a) Verlet 法: [时间反演 ($t \rightarrow -t$), 不变]

$$x(t+\tau) = 2x(t) - x(t-\tau) + \tau^2 \frac{F(t)}{m}$$

$$v(t) = \frac{x(t+\tau) - x(t-\tau)}{2\tau}$$

(b) Verlet 法: [同时计算速度和位置]

速度

$$x(t+\tau) = x(t) + \tau v(t) + \frac{\tau^2 F(t)}{2m}$$

$$v(t+\tau) = v(t) + \frac{\tau [F(t+\tau) + F(t)]}{2m}$$

求导

(c) Beeman 法:

$$x(t+\tau) = x(t) + \tau v(t) + \tau^2 \frac{4F(t) - F(t-\tau)}{6m}$$

$$v(t+\tau) = v(t) + \frac{\tau [2F(t+\tau) + 5F(t) - F(t-\tau)]}{6m}$$

* Beeman 法则算出的 x 与 Verlet 一样, v 更准确.

因此最终的总能量守恒较好.

但速度的表达式没有时间可逆对称性.

* 速度校正的 Verlet 算法:

$$v(t) = \frac{2}{3} [x(t+\tau) - x(t-\tau)] - \frac{1}{12\tau} [x(t+2\tau) - x(t-2\tau)]$$

(3) 模拟步骤:

① 初始化.

② 动力学模拟.

* 应用: 薄膜生长, 晶向断裂, 原子团簇的稳定性.

离子轰击表面形成坑, 水分子渗透

重要抽样法:

Metropolis 抽样:

对于概率密度起伏大, 系统维数多的抽样问题, 传统舍选法难以给出高精度, 高速度的结果, 因此用 Metropolis 方法:

Metropolis 方法的过程如下:

- (1) 在定义域内随意抽一个点 x_0 .
- (2) 以 x_0 为输入, 通过抽样得 x_1 .
- (3) 如此往复, 以 x_{t-1} 为参数, 得 x_t .

其中第(2)步的抽样规则为:

(2.1) 抽 y 满足均匀分布 $[x_0-d, x_0+d]$.

(2.2) 若 $p(y) > p(x)$ 则 $x_1 = y$.

(2.3) 若 $p(y) < p(x)$ 则再抽一个 η ($0-1$ 均匀分布).

$$\text{然后: } x_1 = \begin{cases} y & \text{若 } \eta < \frac{p(y)}{p(x)} \\ x_0 & \text{若 } \eta > \frac{p(y)}{p(x)}. \end{cases}$$

* 原理:

1. Markov 链: x_n 只依赖于 x_{n-1} .
2. 转移矩阵 W 和细致平衡原理.

$$\frac{p(x)}{p(x')} = \frac{W(x' \rightarrow x)}{W(x \rightarrow x')}$$

平衡态时, $p = pW$, 分布和概率密度 p 越大, 说明别处向这里的转移概率 (W) 越大, 而这里向别处的转移概率 (W) 较小.

系统综述:

1. 正则系统综述 (N, V, T 固定)

Boltzmann 分布: $p(x) \propto \exp(-\beta H)$

2. 微正则系统综述 (N, V, E 固定)

3. 巨正则系统综述 (μ, V, T 固定)

4. 等温等压系统综述 (N, P, T 固定)

Ising 模型 (铁磁性)

① 物理:

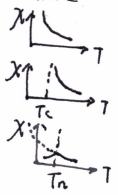
① 磁化强度 $\vec{M} = \chi \vec{H}$ (χ : 磁化率)

② 磁性分类: <1> 抗磁性: $\chi < 0$, 且 χ 很小, 基本为常数

<2> 顺磁性: $\chi > 0$, $\chi = \frac{C}{T}$, 较小.

<3> 铁磁性: $\chi = \frac{C}{T - \theta_c}$ ($T > \theta_c$)

<4> 反铁磁性: $\chi = \frac{C}{T + \theta_n}$ ($T > \theta_n$)



③ 自旋及能量计算

$$E = - \sum J_{ij} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \mu_B \vec{H} \cdot \sum \vec{\sigma}_i$$

↑
交换积分常数

↑ Bohr 磁子

度量了自旋-自旋相互作用的强弱

* g 因子已被吸收入 μ_B 中.

* 统计力学分布:


$$P_\alpha \propto e^{-E_\alpha / k_B T}$$


$$P_\alpha = \frac{e^{-E_\alpha / k_B T}}{\sum_\alpha e^{-E_\alpha / k_B T}}$$

② 不同模型的假设:

<1> Ising 模型:

自旋只有上、下。

(a) 一维, 只考虑邻近。 

(b) 二维, 只考虑四周。 

<2> XY 模型 (平面转子模型)

自旋在平面上可任意旋转

$$E = -J \sum_i \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + E_B = -J \sum_i (\sigma_{ix} \sigma_{jx} + \sigma_{iy} \sigma_{jy}) + E_B$$
$$= -J \sum_i G_s (\phi_i - \phi_j) + E_B$$

其中 $\sigma_{ix} = G_s \phi_i$

$\sigma_{iy} = S \phi_i$

↑ 与磁场有关的, 即 $\mu \cdot H \cdot O$

<3> Heisenberg 模型:

自旋可取 3 维空间任意方向。

<4> q 态 Potts 模型: [可以模拟以固溶]

自旋有 1, 2, ..., q, 共 q 个取值。

只有 $i=j$ 时, 才对能量有贡献 ($E = -J \sum_i \delta_{\sigma_i \sigma_j} + E_B$)

<5> 时钟模型:

自旋可以取 2 维平面上 q 个角度。 ($E = -J \sum_i \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + E_B$)

<6> 自旋玻璃:

设 J_{ij} 不是定值, 而是随机选取的, 满足 Gauss 分布, 或随机为 J 或 $-J$ 。

相关方法:

① 模拟退火法:

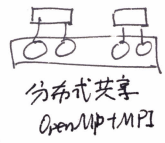
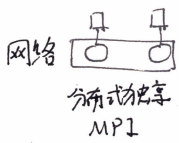
由于亚稳态的温度低,因此很难越过势垒走向另一个亚稳态.
因此设计了“交换温度”.

首先同时模拟多个系统,然后适时交换其温度,使亚稳态跳出势垒,不断寻找最小值.

② 临界慢化:

③ Swendsen-Wang 加速抽样法.

并行计算



1. MPI: 消息传递函数库 (接口标准)

- 6个基本函数:
- MPI_INIT 启动环境
 - MPI_COMM_SIZE 确定进程数
 - MPI_COMM_RANK 确定自己的进程标识符
 - MPI_SEND 发送一条消息
 - MPI_RECV 接收一条消息
 - MPI_FINALIZE 结束环境

头文件: C: #include "mpi.h"

F77: include 'mpif.h'

F90及之后: use mpi 或 include 'mpif.h'