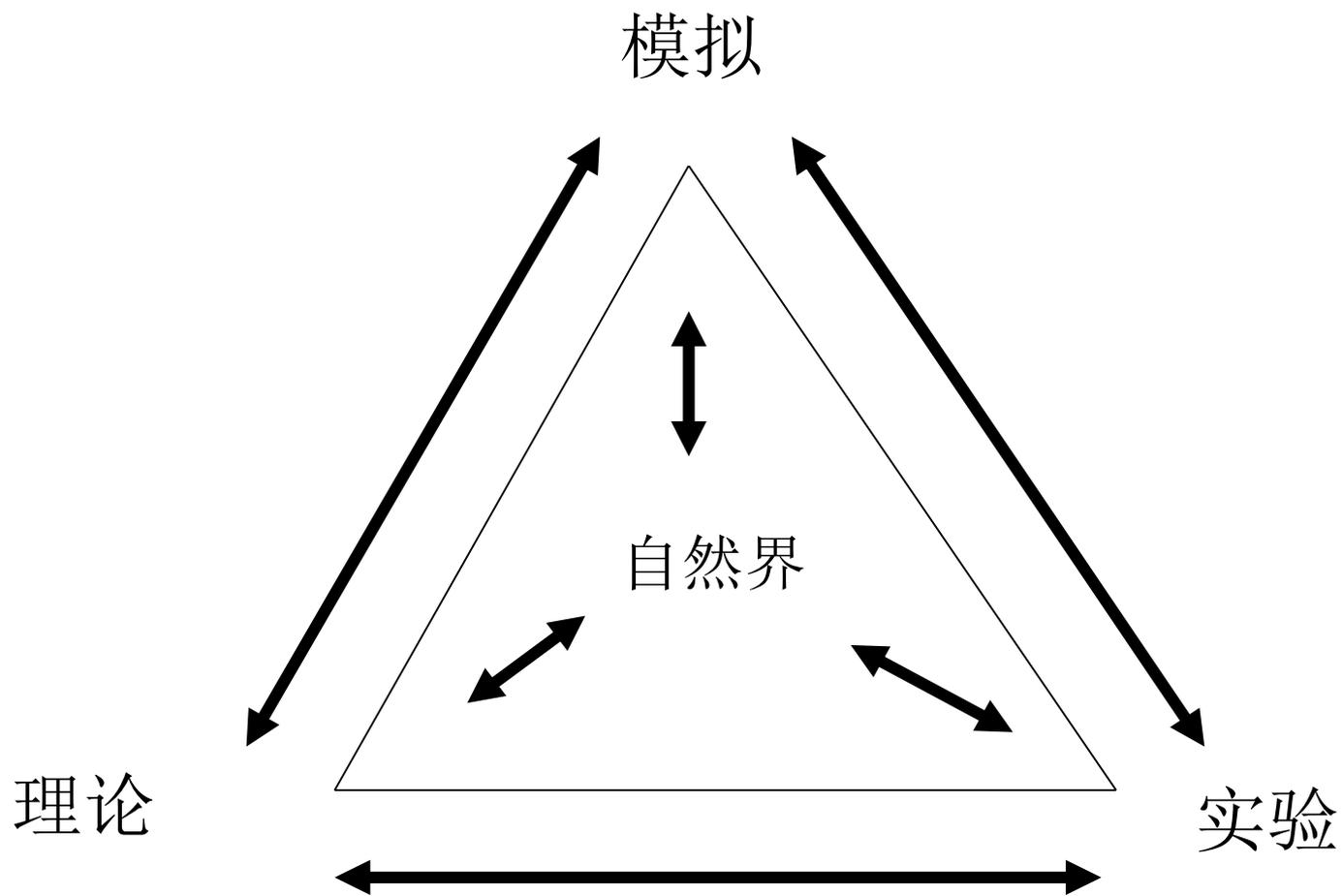


# 模拟物理导论

凝聚态物质的数值模拟方法

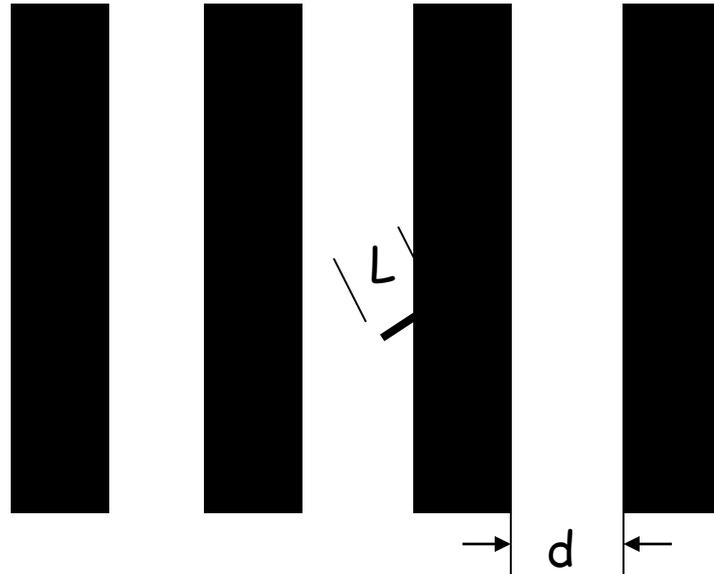
马红孺

<http://hongruma.net>



Landau 三角形

# A little history (the Comte de Buffon needle experiment, AD 1777)



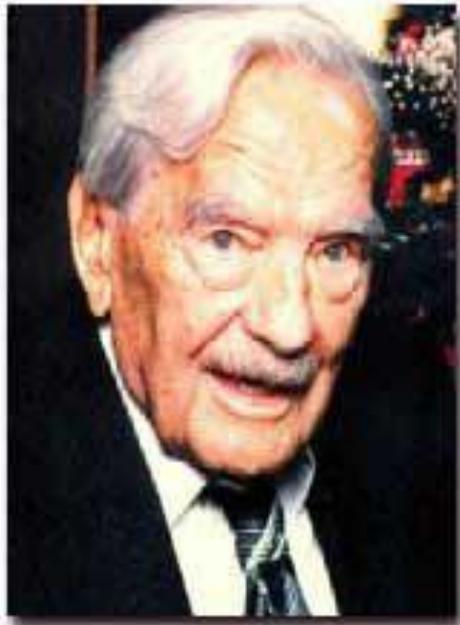
$$p = \frac{2L}{\pi d}$$

# Stanislaw Ulam (1909-1984)

S. Ulam is credited as the inventor of Monte Carlo method in 1940s, which solves mathematical problems using statistical sampling.



# Nicholas Metropolis (1915-1999)



The algorithm by Metropolis (and A Rosenbluth, M Rosenbluth, A Teller and E Teller, 1953) has been cited as among the top 10 algorithms having the "greatest influence on the development and practice of science and engineering in the 20th century."

# The Name of the Game

Metropolis  
coined the  
name  
“Monte  
Carlo”, from  
its gambling  
Casino.



Monte-Carlo, Monaco

# Summary of Monte Carlo Method

- Solving mathematical problems (numerical integrations, numerical partial differential equations) by random sampling
- Using random numbers in an essential way
- Simulation of stochastic processes

# 凝聚态物质的数值模拟方法

主要有三类:

- 1, Monte Carlo 方法,
  - a, 经典统计物理的Monte Carlo 方法,
  - b, 量子Monte Carlo 方法,
- 2, 分子动力学方法,
- 3, 布朗动力学方法.

## 数值模拟基础:

赝随机数的产生和检验, 微分方程的数值解法.

## 物理基础:

统计物理学, 凝聚态物理基础知识.

# 统计物理复习:

理论凝聚态物理的核心问题是:

- 1, 建立理论模型, 写出哈密顿量;
- 2, 利用统计物理计算凝聚态物质的各个物理量.

常用的凝聚态物理模型:

- 1, 格点模型: Ising 模型, Potts模型和Heisenberg 模型及其它们的各种变形(XY, 自旋玻璃,...), Hubbard 模型, 无规行走模型, 逾渗模型, 简谐固体 .....
- 2, 非格点类模型: 经典流体(硬球, LJ, Yukawa, .....); 量子流体(固体中的电子, 液氦, .....
- 3, 高分子模型.
- 4, 布朗运动模型.
- 5, ... ..

我们不讨论模型的建立, 只讨论如何计算!

经典统计物理：

给定系统的哈密顿量， $H(x_1, x_2, \dots, x_N)$

计算配分函数  $Q = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \exp[-\beta H(x_1, x_2, \dots, x_N)]$

自由能： $F = -\beta^{-1} \ln Q$

对自由能求导，得到各个物理量.

内能： $E = -T^2 \frac{\partial(\frac{F}{T})}{\partial T}$

熵： $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N}$

问题：配分函数求不出来!!! (除 1D 和  
2D Ising, 理想气体,  $\dots$ , 很少的几个模型  
外)

## 经典统计物理:

给定系统的哈密顿量  $H(x_1, x_2, \dots, x_N)$

计算配分函数  $Q = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \exp[-\beta H(x_1, x_2, \dots, x_N)]$

自由能:  $F = -\beta^{-1} \ln Q$

对自由能求导, 得到各个物理量.

内能:  $E = -T^2 \frac{\partial \left( \frac{F}{T} \right)}{\partial T}$

熵:  $S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V, N}$

**问题:** 配分函数求不出来!!! (除 1D 和 2D Ising, 理想气体, ..., 很少的几个模型外)

另一种表述方式:

概率分布:  $P(x) = \frac{1}{Q} \exp[-\beta H(x)] = \exp[\beta(F - H(x))]$  物理量是状态(用  $\{x\}$  表示)的函数:  
 $A(x)$

平均值:  $\bar{A} = \int dx A(x) P(x)$

涨落:  $\overline{(\Delta A)^2} \equiv \overline{(A - \bar{A})^2} = \overline{A^2} - \bar{A}^2$

对于能量:  $E = \overline{H(x)} = -T^2 \frac{\partial(\frac{F}{T})}{\partial T} = \frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta}$

注意到:  $\overline{(\Delta H)^2} = \overline{H^2} - \bar{H}^2 = -\frac{\partial E}{\partial \beta} =$

$k_B T^2 \frac{\partial E}{\partial T} = k_B T^2 C_V \bar{H}^2 \propto N^2, \quad C_V \propto N$

所以:  $\frac{\overline{(\Delta H)^2}}{\bar{H}^2} \propto \frac{1}{N}$  实际系统  $N \sim 10^{23}$  模拟系统  $N \sim 10^3$

另一种表述方式:

概率分布: 
$$P(x) = \frac{1}{Q} \exp[-\beta H(x)] = \exp[\beta(F - H(x))]$$

物理量是状态(用  $\{x\}$  表示)的函数:  $A(x)$

平均值: 
$$\bar{A} = \int dx A(x) P(x)$$

涨落: 
$$\overline{(\Delta A)^2} \equiv \overline{(A - \bar{A})^2} = \overline{A^2} - \bar{A}^2$$

对于能量: 
$$E = \overline{H(x)} = -T^2 \frac{\partial \left( \frac{F}{T} \right)}{\partial T} = \frac{\partial (\beta F)}{\partial \beta}$$

$$\overline{(\Delta H)^2} = \overline{H^2} - \bar{H}^2 = -\frac{\partial E}{\partial \beta} = k_B T^2 \frac{\partial E}{\partial T} = k_B T^2 C_V$$

注意到:  $\bar{H}^2 \propto N^2, \quad C_V \propto N$

必须考虑涨落效应!

所以: 
$$\frac{\overline{(\Delta H)^2}}{\bar{H}^2} \propto \frac{1}{N} \quad \text{实际系统 } N \sim 10^{23} \quad \text{模拟系统 } N \sim 10^3$$

## 多重积分的计算, Monte Carlo 方法:

由上述第二种表述, 物理量的平均值的计算归结为一个多重积分的计算, 设系统由100个粒子构成, 每个粒子有6个自由度, 所以需要计算600重积分. 现在考虑在每一维取10个点, 总共有 $10^{600}$ 个点. 假设计算机每秒可以计算 $10^{12}$ 个点, 计算这个积分需要 $10^{588}$ 秒!!!!

问题比这个更严重! 如果如上述方式取点, 则积分区域的内点数为 $8^{600}$ , 在总的点中所占比例为 $(8/10)^{600} = 0.714 \times 10^{-58}$ , 也就是说, 取的点基本上都在表面上!!!

解决这个问题的方法是Monte Carlo方法.

用Monte Carlo 方法计算积分, 最简单的办法就是在积分区域内随机均匀地取一系列点, 计算被积函数在这些点上的数值并取平均, 然后乘以积分区域的体积. 这种方法称为简单抽样法.

简单抽样法实现起来非常简单, 但有一个问题, 就是把被积函数很小和很大的地方同等对待. 改进这个问题的方法是在重要的区域多取几点. 这种方法称为重要性抽样法.

1. 令  $S = 0, N = 0$
2. 产生区间 $[0, 1]$ 上的随机数 $x_i$ ;
3. 计算 $f(x_i)$ ,  $S = S + f(x_i), N = N + 1$ ;

$$S = S/N$$

## 简单抽样方法：两个例题

例题一：计算积分  $I = \int_0^1 dx \frac{1}{1+x^4}$  这个积分的精确值是

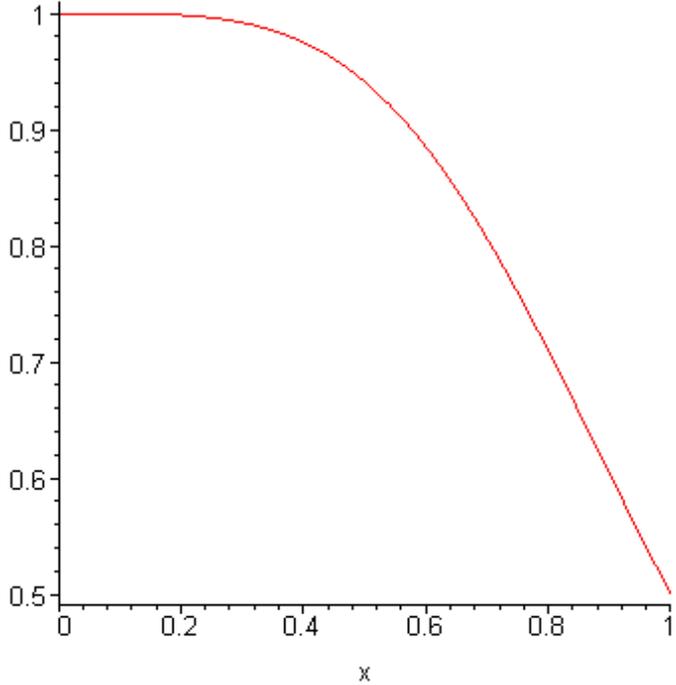
$$I^{\text{exact}} = 0.8669729873399110\dots$$

现在用简单抽样法计算此积分.  $I = \langle f \rangle$

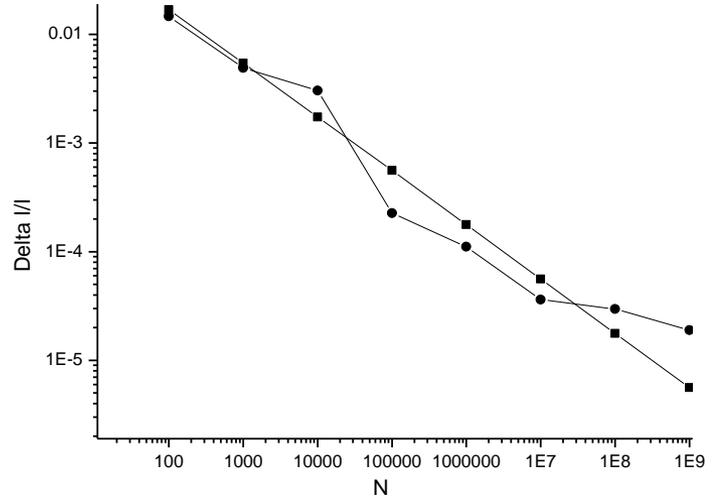
$N$	$I$	$\Delta I / I$	$\Delta' I / I$	$1/\sqrt{N}$	$\Delta' I \sqrt{N} / I$
$10^2$	0.879679	$1.47 \times 10^{-2}$	$1.69 \times 10^{-2}$	0.1	$1.69 \times 10^{-1}$
$10^3$	0.871238	$4.92 \times 10^{-3}$	$5.45 \times 10^{-3}$	$3.16 \times 10^{-2}$	$1.72 \times 10^{-1}$
$10^4$	0.869603	$3.03 \times 10^{-3}$	$1.74 \times 10^{-3}$	$10^{-2}$	$1.74 \times 10^{-1}$
$10^5$	0.866777	$2.26 \times 10^{-4}$	$5.61 \times 10^{-4}$	$3.16 \times 10^{-3}$	$1.77 \times 10^{-1}$
$10^6$	0.866876	$1.11 \times 10^{-4}$	$1.77 \times 10^{-4}$	0.001	$1.77 \times 10^{-1}$
$10^7$	0.867004	$3.63 \times 10^{-5}$	$5.60 \times 10^{-5}$	$3.16 \times 10^{-4}$	$1.77 \times 10^{-1}$
$10^8$	0.866947	$2.97 \times 10^{-5}$	$1.77 \times 10^{-5}$	$10^{-4}$	$1.77 \times 10^{-1}$
$10^9$	0.866956	$1.89 \times 10^{-5}$	$5.60 \times 10^{-6}$	$3.16 \times 10^{-5}$	$1.77 \times 10^{-1}$

$$\Delta I / I = \frac{|I - I^{\text{exact}}|}{I^{\text{exact}}}$$

$$\Delta' I / I = \frac{\sqrt{\langle f^2 \rangle - I^2}}{I}$$



被积函数



相对误差随样点的变化

$$\frac{\Delta' I}{I} \approx \frac{0.177}{\sqrt{N}}$$

例题二:

计算积分

$$I = \int_0^{10} dx x^{68} \exp(-25x)$$

精确结果为

$$I^{\text{exact}} = 0.8641662611747412416$$

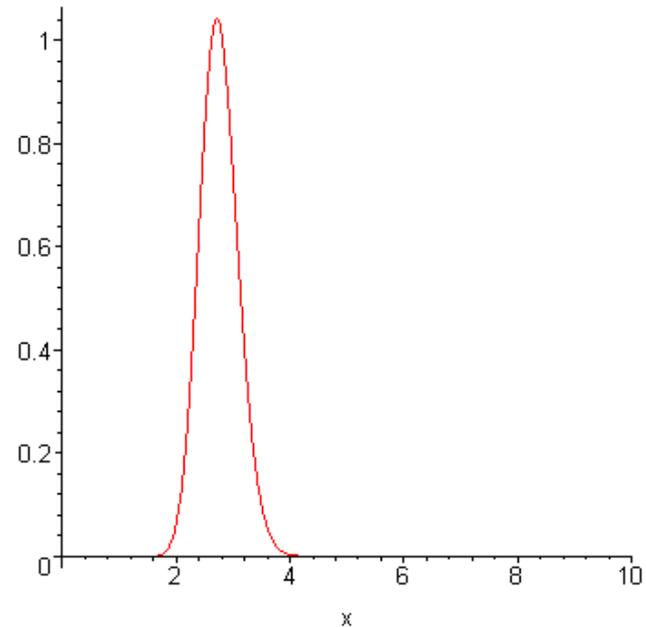
用简单抽样法计算得到:

$N$	$I$	$\Delta I / I$	$\Delta' I / I$	$1/\sqrt{N}$	$\Delta' I \sqrt{N} / I$
$10^2$	0.52577	0.392	0.287	0.100	2.87
$10^3$	0.79895	$0.755 \times 10^{-1}$	$0.900 \times 10^{-1}$	$0.316 \times 10^{-1}$	2.85
$10^4$	0.88543	$0.246 \times 10^{-1}$	$0.269 \times 10^{-1}$	$0.100 \times 10^{-1}$	2.69
$10^5$	0.87210	$0.919 \times 10^{-2}$	$0.864 \times 10^{-2}$	$0.316 \times 10^{-2}$	2.73
$10^6$	0.86581	$0.190 \times 10^{-2}$	$0.274 \times 10^{-2}$	$0.100 \times 10^{-2}$	2.74
$10^7$	0.86485	$0.798 \times 10^{-3}$	$0.868 \times 10^{-3}$	$0.316 \times 10^{-3}$	2.74
$10^8$	0.86377	$0.456 \times 10^{-3}$	$0.275 \times 10^{-3}$	$0.100 \times 10^{-3}$	2.75
$10^9$	0.86418	$0.218 \times 10^{-4}$	$0.868 \times 10^{-4}$	$0.316 \times 10^{-4}$	2.75

在这个例子中,  $\frac{\Delta'I}{I} \approx \frac{2.75}{\sqrt{N}}$

请看右边的函数图像并与例题一的函数图像比较.

由于被积函数主要在区间[2,4]显著,而在其它位置很小,所以在区间[0,10]上均匀取样显然不合适.



从例子可以看出:

$$I = \int_a^b dx f(x) = (b - a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = (b - a) \langle f \rangle$$
$$\sigma^2 = \frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{\langle f \rangle^2}$$
$$\Delta I = (b - a) \frac{\langle f \rangle \sigma}{\sqrt{N}}$$
$$\frac{\Delta I}{I} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

在例题一中，方差比较小，在例题二中，方差比较大！

减小方差：

现在考虑不用均匀取样，而是按照某个分布 $p(x)$ 取样（ $p(x)$ 归一化），积分成为：

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b dx f(x) = \int_a^b [f(x)/p(x)] p(x) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [f(x)/p(x)] = \langle f/p \rangle_p \end{aligned}$$

如果取 $p(x) = f(x)/I$ ，则方差为零！！

因 $I$ 待求，我们无法构造出 $p(x)$ 。但我们可以试图去逼近它，因为我们所不知道的是一个归一化常数，分布的形状是知道的。

例如，我们可以取一个接近于要求的 $p(x)$ ，例如，可以选

$$p(x) = 0.8920620583 \exp(-2.5(x - 2.8)^2)$$

以减小方差。

如何取样？

试考虑如下算法，构造一个随机过程并产生一系列点  $x_i$ ：

1, 任取  $x_0 \in [a, b]$ ,

2, 设已经得到  $x_i$ , 选  $y_i = x_i + \delta(\text{ran}() - 0.5)$ ,  
 $\text{ran}()$ 给出 $[0, 1]$ 之间均匀分布的随机数, ( $\delta$ 为一可调参数)并计算 $p(y)$ ,

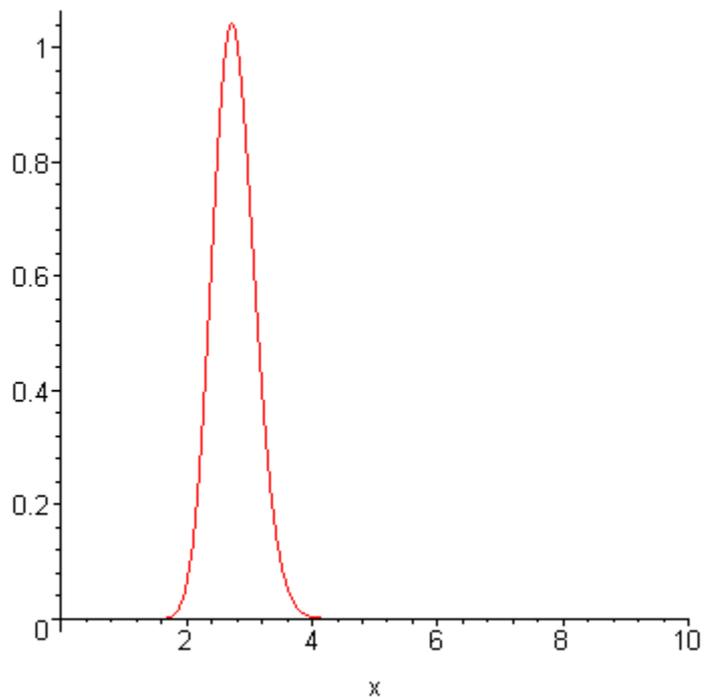
如果  $p(y)/p(x_i) \geq 1$ , 则令  $x_{i+1} = y$ ;

如果  $p(y)/p(x_i) = p < 1$ , 在 $[0, 1]$ 区间产生一个随机数 $\xi$ ,

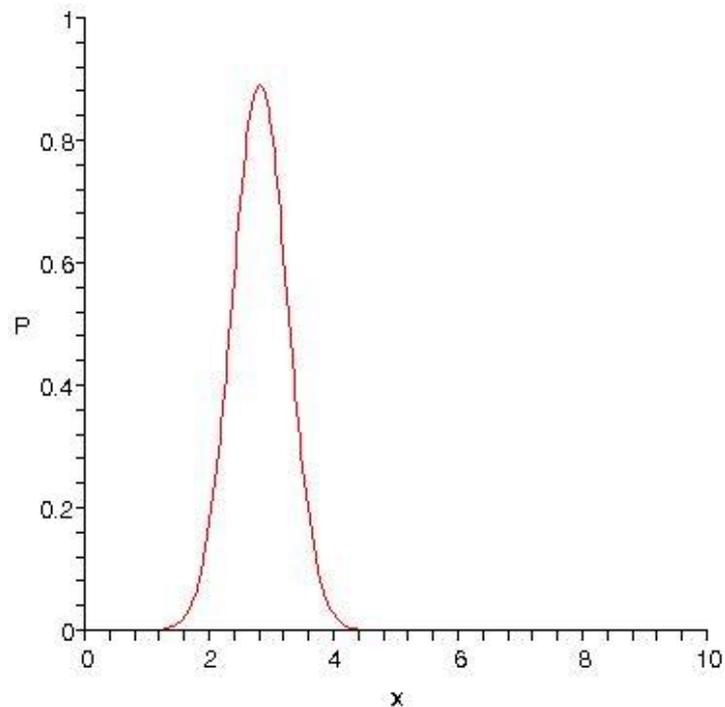
若 $\xi < p$ , 则令  $x_{i+1} = y$ ; 否则, 令  $x_{i+1} = x_i$ 由此可以得到一个序列  $x_i, i = 1, 2, 3, \dots$

利用这样的一系列 $\{x_i\}$ , 对于例题二, 计算 $f/P$ 平均值, 得到的结果是:

$$\sigma = 0.37$$



被积函数  $f(x)$



分布  $P(x)$

例题二:

计算积分  $I = \int_0^{10} dx x^{68} \exp(-25x)$  精确结果为

用重要性抽样法, 按分布  $I^{\text{exact}} = 0.8641662611747412416$

抽样, 计算得到:  $P(x) = 0.8920620583 \exp(-2.5(X - 2.8)^2)$

$N$	$I$	$\Delta I/I$	$\Delta' I/I$	$1/\sqrt{N}$	$\Delta' I \sqrt{N}/I$
$10^2$	0.8764372	$0.142 \times 10^{-1}$	$0.370 \times 10^{-1}$	0.100	0.37
$10^3$	0.8490170	$0.175 \times 10^{-1}$	$0.120 \times 10^{-1}$	$0.316 \times 10^{-1}$	0.38
$10^4$	0.8630828	$0.125 \times 10^{-2}$	$0.370 \times 10^{-2}$	$0.100 \times 10^{-1}$	0.37
$10^5$	0.8603117	$0.446 \times 10^{-2}$	$0.118 \times 10^{-2}$	$0.316 \times 10^{-2}$	0.37
$10^6$	0.8639793	$0.216 \times 10^{-3}$	$0.367 \times 10^{-3}$	$0.100 \times 10^{-2}$	0.37
$10^7$	0.8641426	$0.273 \times 10^{-4}$	$0.116 \times 10^{-3}$	$0.316 \times 10^{-3}$	0.37
$10^8$	0.8642354	$0.801 \times 10^{-4}$	$0.367 \times 10^{-4}$	$0.100 \times 10^{-3}$	0.37
$10^9$	0.8641638	$0.288 \times 10^{-5}$	$0.116 \times 10^{-4}$	$0.316 \times 10^{-4}$	0.37

## 随机数发生器:

Monte Carlo模拟离不开随机数, 研究, 寻找好的真随机数发生器是一个永远不会结束的工作.

对真随机数的要求: 随机; 可重复产生; 移植性好; 效率高.

# The Roulette and Dice



Mechanical random number generators

# What is a Random Number?

- Follow a definite distribution, usually uniform distribution
- Uncorrelated
- Unpredictable

3

7

0

1

4

# Pseudo-Random Numbers

- Truly random numbers can not be generated on a computer.
- Pseudo-random numbers follows a well-defined algorithm, thus predictable and repeatable.
- Have nearly all the properties of true random numbers.

# Linear Congruential Generator (LCG)

One of the earliest and fastest algorithms:

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \bmod m$$

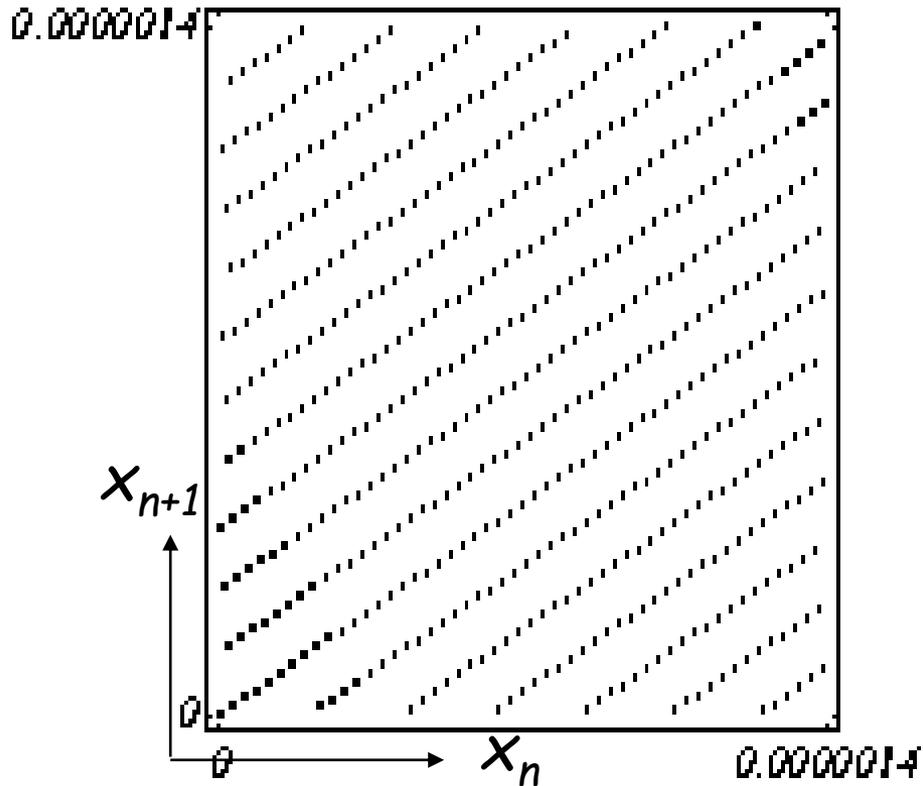
where  $0 \leq x_n < m$ ,  $m$  is the modulus,  $a$  is a multiplier,  $c$  is an increment. All of them are integers. Choice of  $a$ ,  $c$ ,  $m$  must be done with special care.

# Choice of Parameters

Name	$m$	$a$ (multiplier)	$c$	period
ANSIC [rand()]	$2^{31}$	1103515245	12345	$2^{31}$
Park-Miller NR ran0()	$2^{31}-1$	16807	0	$2^{31}-2$
drand48()	$2^{48}$	25214903917	11	$2^{48}$
Hayes 64-bit	$2^{64}$	6364136223846793005	1	$2^{64}$

$$(a x + c) \bmod m$$

# Short-Coming of LCG



When  $(x_n, x_{n+1})$  pairs are plotted for all  $n$ , a lattice structure is shown.

16807法,

$linux = linux * 16807$

$if(linux < 0) \quad linux = linux + 2147483647 + 1$

产生  $(1, 2^{31})$  之间的随机数。

## Kirkpatrick-Stoll (R250)

假定有250个随机整数. 第251个可以这样得到:

$$N(251) = \text{IEOR}(N(1), N(148))$$

或更一般的

$$N(K) = \text{IEOR}(N(K - 250), N(K - 103))$$

这里 250, 103 是一对特别的数字, 当然还有其它组合. **IEOR** 是 FORTRAN 中 **exclusive OR** 的记号.

实际上只需要存储250个整数, 不过为了计算简单, 用256个整数.

$$N(\text{IAND}(255, K)) = \text{IEOR}(N(\text{IAND}(255, K-250)), N(\text{IAND}(255, K-103)))$$

附加练习: 写出R250随机数发生器的程序.

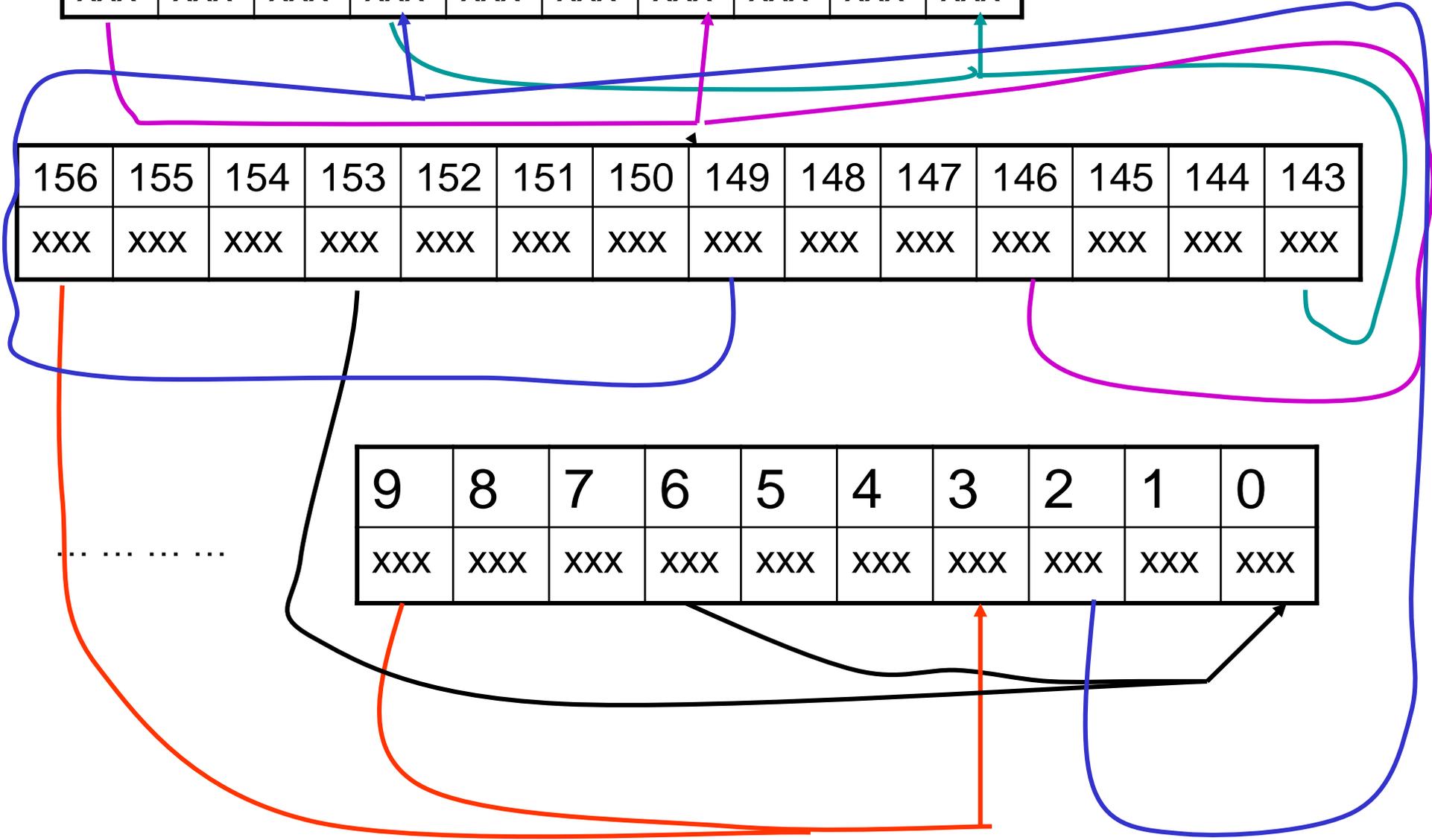
255	254	253	252	251	250	249	248	247	246
XXX									

.....

156	155	154	153	152	151	150	149	148	147	146	145	144	143
XXX													

9	8	7	6	5	4	3	2	1	0
XXX									

.....



1	... 000000001	$\text{IAND}(255, 0) = 0$
2	... 000000010	
3	... 000000011	$\text{IAND}(255, 250) = 250$
4	... 000000100	
8	... 000001000	$\text{IAND}(255, 255) = 255$
16	... 000010000	
32	... 000100000	
64	... 001000000	$\text{IAND}(255, 256) = 0$
128	... 010000000	
255	... 011111111	$\text{IAND}(255, 257) = 1$
256	... 010000001	$\text{IAND}(255, 258) = 2$

R250可以写为:

$$x_k = x_{k-250} \oplus x_{k-103}$$

这样一类随机数发生器都可以写为

$$x_k = x_{k-p} \oplus x_{k-q}$$

$(p, q)$  其它组合有:

(98, 27),	(1279, 216),	(1279, 418),	(2281, 715),
(2281, 915),	(2281, 1029),	(3217, 67),	(3217, 576),
(4423, 271),	(4423, 369),	(4423, 370),	(4423, 649),
(4423, 1393),	(4423, 1419),	(4423, 2098),	(9689, 84),
(9689, 471),	(9689, 1836),	(9689, 2444),	(9689, 4187)

```
#include <stdio.h>
#define AMOL .23283064365386962890625e-9
#define NBIT 32

static int ir[256];
Static int k;

double r250()

{
    int iran_ks;

    k=(k+1)&255;
    ir[k]=ir[(k-250 & 255)] ^ ir[(k-103 & 255)];
    iran_ks=ir[k];
    return iran_ks*AMOL+0.5;

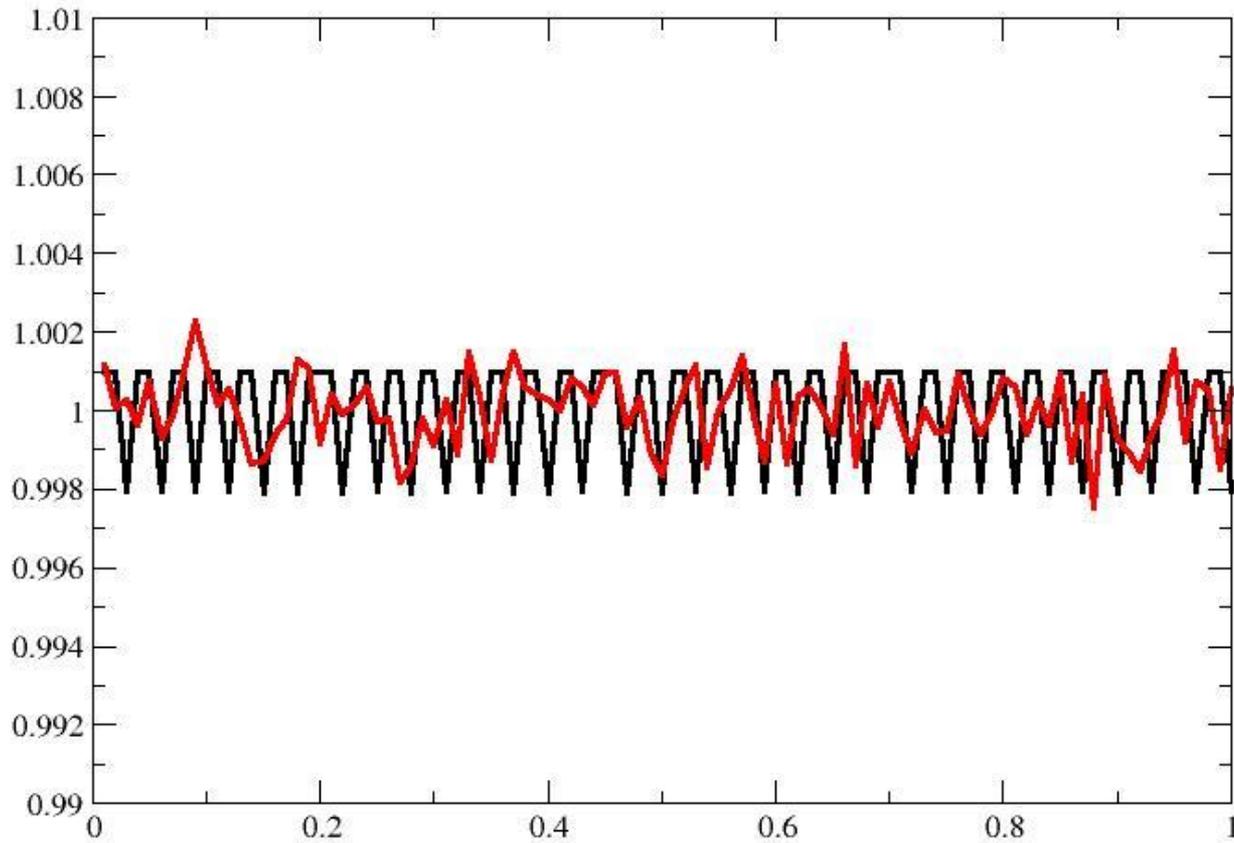
}
```

随机数的随机性检验：

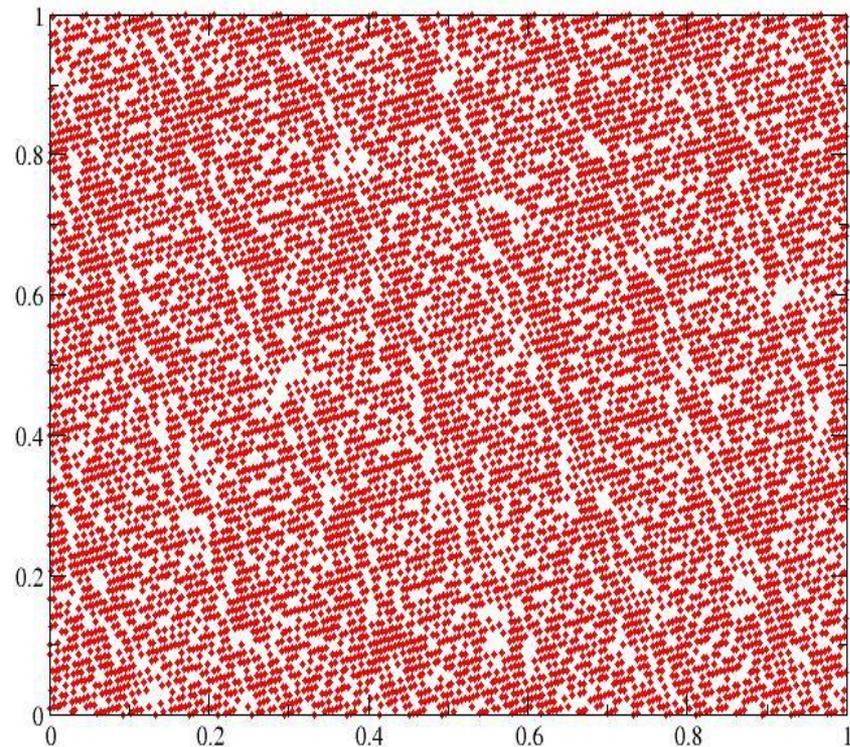
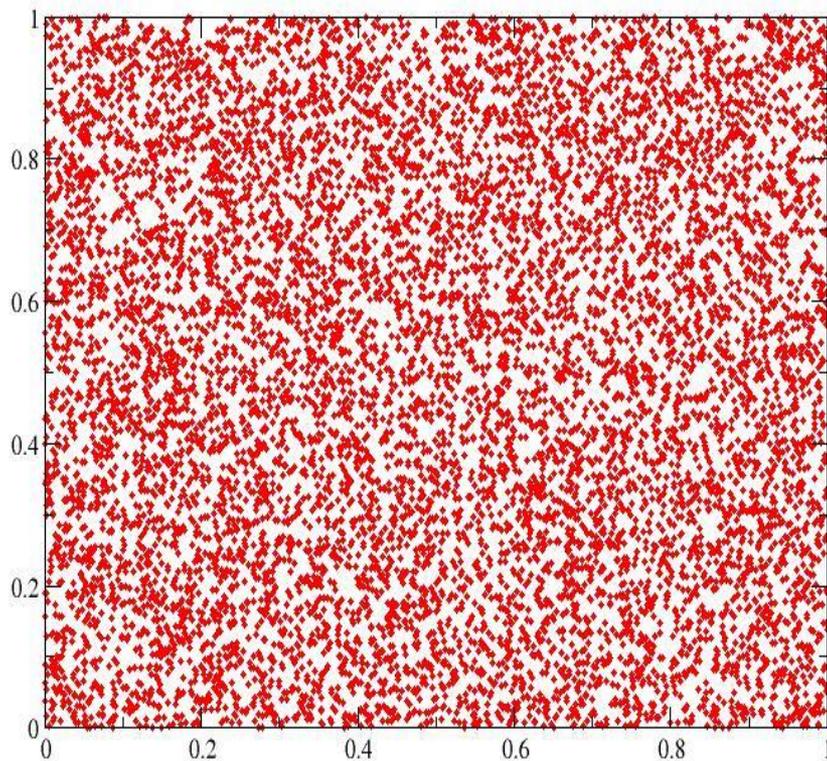
1, 均匀性检验 ([0, 1]区间上的直方图)

2, 相关性检验 (打点观察)

用严格可解的物理模型检验。 如无规行走。



均匀性检验：黑色为同余法的结果，红色为R250的结果。100点， $10^8$ 个随机数。



相关性检验，左边为R250结果，右边为同余法的结果。10000个点。

## 无规行走:

为简单起见, 以二维为例. 高分子链的物理模型.

简单无规行走(RW),  $N$  步, 配分函数

$$Q = z^N \quad z \text{ 是最近邻数.}$$

末端距的平均值:

$$\mathbf{R} = \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \quad \langle \mathbf{R}^2 \rangle = \sum_{i,j=1}^N \langle \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_i \rangle = Na^2$$

$a$  是单个链段的长度. 这个严格的结果非常有用.

不回头简单无规行走(NRRW), 不容许立即回头, 其余同简单无规行走.  
配分函数为

$$Q = (z - 1)^N$$

末端距平方的平均值也与 $N$ 成正比.

## 计算方法: RW

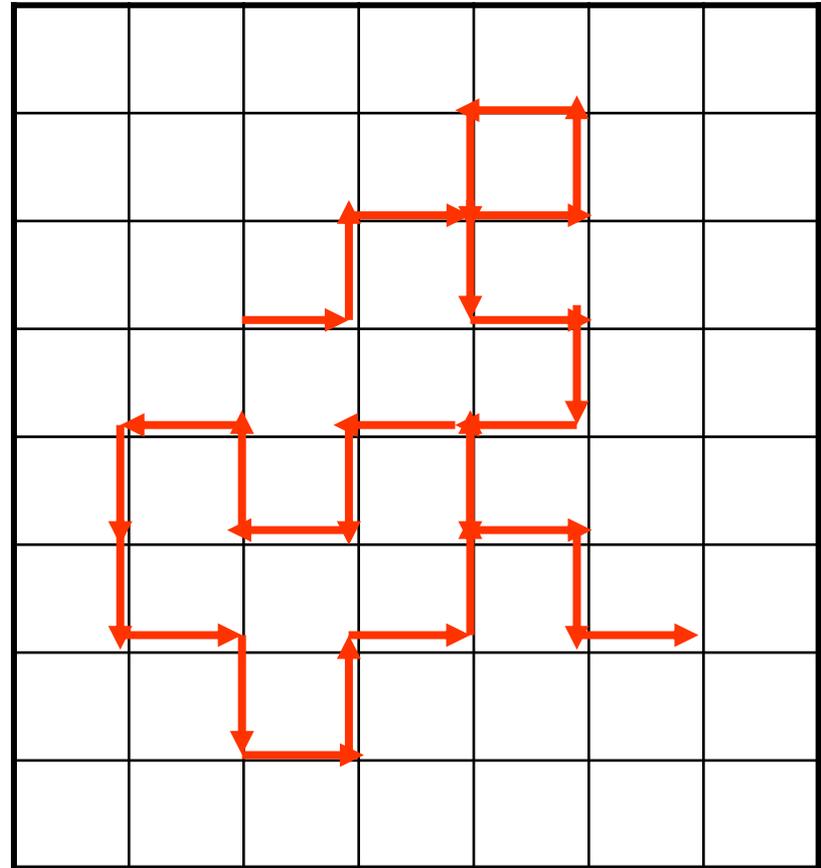
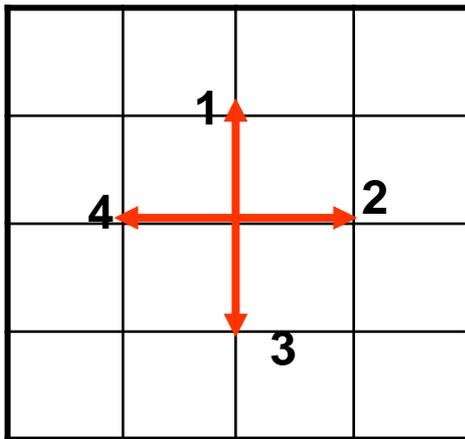
以二维正方格子为例

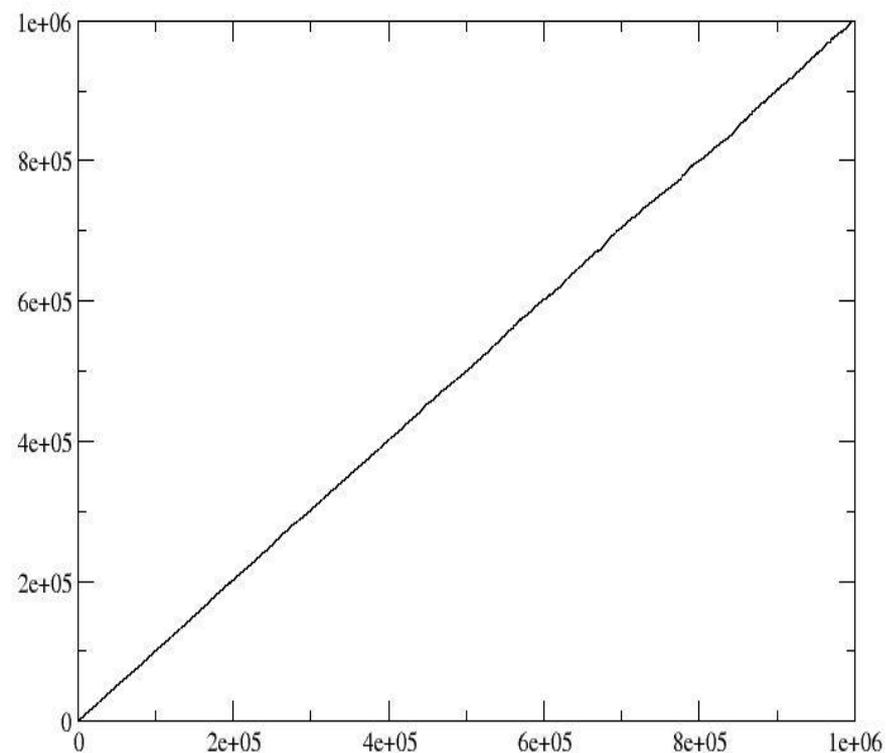
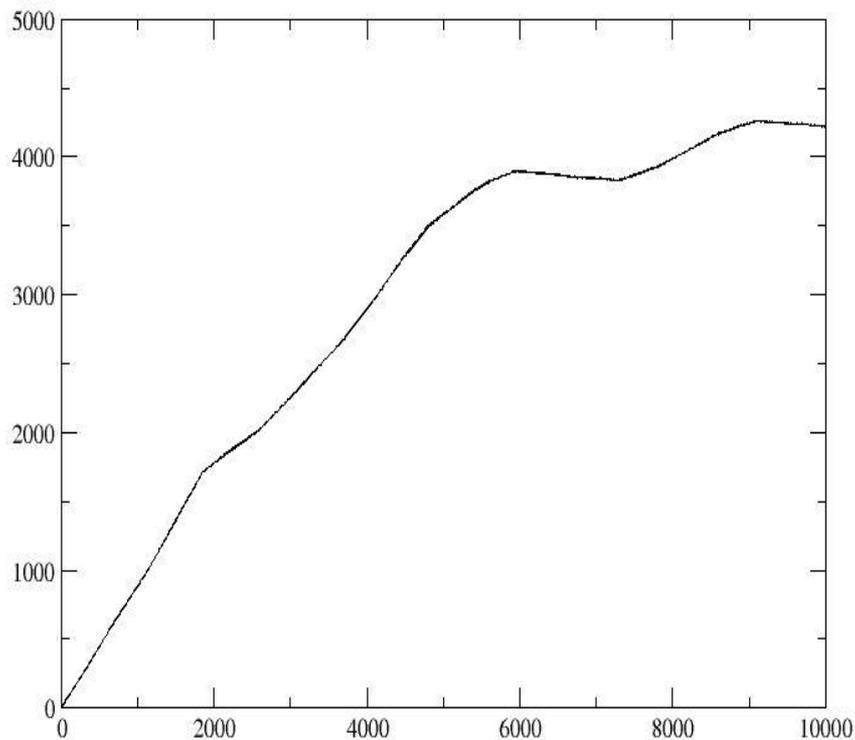
如图, 选定4个方向  
产生 $[0,1]$ 区间的随机数  $\xi$ ,

计算  $(int)x = \xi * 4 + 1$

按照  $x$  确定下一步的行走。

$$v(x) = x$$





无规行走的结果，左边为同余法，右边为R250。  
注意两个图的坐标！取10000个样本平均，同余法  
用到 $10^8$ 个随机数，R250用到 $10^{10}$ 个随机数。





### 自回避无规行走(SAW):

考虑到体积效应, 凡是访问过的格点不能再访问.

末端距的平方的平均:

$$\langle \mathbf{R}^2 \rangle \sim N^{2\nu} \quad N \rightarrow \infty$$

$$\nu \approx 0.59$$

这些结果是模拟得到的.

SAW的配分函数为:  $Q = N^{\gamma-1} z_{\text{eff}}^N$

$$\text{在NRRW中的比例: } P(N) = \frac{Q^{\text{SAW}}}{Q^{\text{NRRW}}} = N^{\gamma-1} \left( \frac{z_{\text{eff}}}{z-1} \right)^N$$

其中 $\gamma$ 和  $z_{\text{eff}}$  只能通过数值模拟求得. (3D,  $\gamma \approx 7/6$ , 2D,  $\gamma \approx 4/3$ )

$$P(N) \text{ 可以改写为: } P(N) = \exp \left( -N \ln \left( \frac{z_{\text{eff}}}{z-1} \right) + (\gamma - 1) \ln N \right)$$

## SAW的相变:

除了自回避, 如果对于最近邻占据格点加上一项吸引能, 可以得到有趣的结果.

相变来自自回避排斥作用, 熵以及吸引相互作用的竞争. 有趣的是, 存在一个临界温度  $T_c$ , 当  $T > T_c$  时:

$$\langle \mathbf{R}^2 \rangle \sim N^{2\nu} \quad \nu \approx 0.59$$

当  $T < T_c$  时:

$$\langle \mathbf{R}^2 \rangle \sim N^{2/3}$$

而当  $T = T_c$  时:

$$\langle \mathbf{R}^2 \rangle \sim N$$

# Monte Carlo 模拟基础

## 随机变量及其分布

随机变量(以下用 $\xi$ 表示)可分为两类, 一类是离散型随机变量, 它可以取一系列分立值  $x_1, x_2, \dots, x_n, \dots$ , 其对应的取某一值的几率为  $p_1, p_2, \dots, p_n, \dots$ .  $p_i$  称为的概率分布; 另一类是连续型随机变量,  $\xi$  可连续取值, 设在区间  $[x, x + \delta x]$  内取值的概率为  $p(x < \xi < x + \delta x)$ , 令

$$f(x) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{P(x \leq \xi < x + \delta x)}{\delta x}$$

$f(x)$  称为的分布概率密度, 而处于区间  $[a, b]$  内的概率由下式给出

$$p(a \leq \xi < b) = \int_a^b f(x) dx$$

几率应归一化, 即

$$\sum_{i=1}^{\infty} p_i = 1$$

对离散型随机变量

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1$$

对连续型随机变量

定义分布函数

$$F(x) = p(\xi \leq x) = \int_{-\infty}^x f(x) dx$$

代表  $\xi$  处于  $[-1, x]$  的几率. 显然,

$$f(x) = \frac{dF}{dx}$$

随机变量的数学期望定义为

$$E(\xi) = \sum_i x_i p_i$$

或

$$E(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx$$

方差定义为

$$D(\xi) = \sum_i (x_i - E(\xi))^2 p_i$$

或

$$D(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - E(\xi))^2 f(x) dx$$

**大数定理：** 设 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n, \dots$  为一随机变量序列，相互独立，具有同样分布，且 $E(\xi_i) = a$ 存在，则对任意小量 $\varepsilon > 0$ ，有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p \left\{ \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a \right| < \varepsilon \right\} = 1$$

这一定理指出，不论随机变量的分布如何，只要 $n$ 足够大，则算术平均与数学期望值可无限接近，也就是说，算术平均以几率收敛于其数学期望值。

设 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n, \dots$ 为一随机变量序列, 相互独立, 具有同样分布, 且 $E(\xi_i) = a, D(\xi_i) = \sigma^2$ 存在, 则当 $n \rightarrow \infty$ 时,

$$P\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a < \frac{X_\alpha \sigma}{\sqrt{n}}\right) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{X_\alpha} e^{-x^2/2} dx$$

推论

$$P\left(\left|\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a\right| < \frac{X_\alpha \sigma}{\sqrt{n}}\right) \rightarrow \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{X_\alpha} e^{-x^2/2} dx \quad (A)$$

令:

$$\frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{X_\alpha} e^{-x^2/2} dx = 1 - \alpha$$

$$\left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a \right| < \frac{X_\alpha \sigma}{\sqrt{n}}$$

成立的几率为  $1 - \alpha$ ,  $1 - \alpha$  称为可信水平.

$\alpha$ ,  $1 - \alpha$ 和 $X_\alpha$ 的数值关系

$\alpha$	0.5	0.05	0.02	0.01
$1 - \alpha$	0.5	0.95	0.98	0.99
$X_\alpha$	0.6745	1.9600	2.3263	2.5758

由表可见, 当 $X_\alpha = 2.5758$ 时, (A)成立的几率已经为99%, 也就是说, 该式的可靠性已相当高.

[http://hrma.physics.sjtu.edu.cn/SimulationPhysics/A\\_Guide\\_to\\_Monte\\_Carlo\\_Simulations\\_in\\_Statistical\\_Physics-Landau\\_2nd\\_Edition.pdf](http://hrma.physics.sjtu.edu.cn/SimulationPhysics/A_Guide_to_Monte_Carlo_Simulations_in_Statistical_Physics-Landau_2nd_Edition.pdf)

# Non-Uniformly Distributed Random Numbers

Let  $F(x)$  be the cumulative distribution function of a random variable  $x$ , then  $x$  can be generated from

$$x = F^{-1}(\xi)$$

where  $\xi$  is uniformly distributed, and  $F^{-1}(x)$  is the inverse function of  $F(x)$ .

# Proof the Inverse Method

The Mapping from  $x$  to  $\xi$  is one-to-one. The probability for  $\xi$  between value  $\xi$  and  $\xi + d\xi$  is  $1 \cdot d\xi$ , which is the same as the probability for  $x$  between value  $x$  and  $x + dx$ . Thus

$$d\xi = dF(x) = F'(x)dx = p(x)dx.$$

Since  $F^{-1}(\xi) = x$ , or  $\xi = F(x)$

# Example 1, Exponential Distribution

$P(x) = \exp(-x)$ ,  $x \geq 0$ , then

$$F(x) = \int_0^x \exp(-y) dy = 1 - \exp(-x)$$

So we generate  $x$  by  $x = -\log(\xi)$  where  $\xi$  is a uniformly distributed random number.

# Example 2, Gaussian distribution

Take 2D gaussian distribution

$$p(x, y) dx dy = \frac{1}{2\pi} \exp(-(x^2 + y^2)/2) dx dy$$

Work in polar coordinates:

$$p(r, \theta) r dr d\theta = \frac{1}{2\pi} \exp(-r^2/2) r dr d\theta$$

# Box-Muller Method

The formula implies that the variable  $\theta$  is distributed uniformly between 0 and  $2\pi$ ,  $\frac{1}{2}r^2$  is exponentially distribution, we have

$$\begin{aligned}x &= \sqrt{-2 \log(\xi_1)} \cos(2\pi\xi_2) \\y &= \sqrt{-2 \log(\xi_1)} \sin(2\pi\xi_2)\end{aligned}$$

$\xi_1$  and  $\xi_2$  are two independent, uniformly distributed random numbers.

产生高斯分布随机数的一个很好的方法是

$$x = \sum_{i=1}^{12} \xi_i - 6$$

$\xi$ 是 $[0, 1]$ 均匀分布的随机数。

# 状态空间

- 一个随机变量  $X$  可以取值的集合为状态空间.
- 例子: 骰子试验中的  $1,2,3,4,5,6$   
无规行走中行走者的位置  
一组分子的位置和动量  
Ising模型的自旋组态.

# 马尔可夫过程

一个随机过程是一系列随机变量的序列  $X_0, X_1, \dots, X_n,$   
随机过程由联合概率分布来标志

$$P(X_0, X_1, \dots)$$

如果  $P(X_{n+1}|X_0, X_1, \dots, X_n) = P(X_{n+1}|X_n)$   
则此过程为马尔可夫过程.

# 马尔可夫链

一个马尔可夫链可以完全由一个初始概率  $P_0(X_0)$ , 和转移矩阵

$$W(X_n \rightarrow X_{n+1}) = P(X_{n+1}|X_n)$$

来确定. 一个序列  $X_0 = a, X_1 = b, \dots, X_n = n$  出现的概率为

$$P_0(a)W(a \rightarrow b)W(b \rightarrow c)\cdots W(\dots \rightarrow n)$$

.

# 转移矩阵的性质

$W(X \rightarrow Y) = P(Y|X)$  是一个条件概率, 所以必有  $W(X \rightarrow Y) \geq 0$ .

到所有可能位置的概率为1, 所以

$$\sum_Y W(X \rightarrow Y) = 1.$$

# 演 化

给定当前概率,  $P_n(X)$ , 下一步(第 $n + 1$ 步)的概率为

$$P_{n+1}(Y) = \sum_X P_n(X)W(X \rightarrow Y)$$

用矩阵形式, 此为

$$P_{n+1} = P_n W.$$

主方程 (Master Equation):

由

$$P_{n+1}(Y) = \sum_X P_n(X)W(X \rightarrow Y)$$

注意到:

$$\begin{aligned} \sum_X P_n(X)W(X \rightarrow Y) &= \sum_{X \neq Y} P_n(X)W(X \rightarrow Y) + P_n(Y)W(Y \rightarrow Y) \\ &= \sum_{X \neq Y} P_n(X)W(X \rightarrow Y) + P_n(Y) \left( 1 - \sum_{X \neq Y} W(Y \rightarrow X) \right) \end{aligned}$$

于是:

$$P_{n+1}(Y) - P_n(Y) = \sum_{X \neq Y} P_n(X)W(X \rightarrow Y) - \sum_X P_n(Y)W(Y \rightarrow X)$$

这一方程称为主方程.

注意到 $k$ 步后的状态的概率为

$$P(X_k = b | X_0 = a) = [W^k]_{ab}.$$

即

$$P(X_{k+s} | X_0) = \sum_{X_s} P(X_{k+s} | X_s) P(X_s | X_0)$$

写成矩阵形式

$$W_{k+s} = W_k W_s.$$

# 第 $n$ 步的状态分布

给定初始状态 ( $n = 0$ ) 的分布  $P_0$ , 第  $n$  步的状态分布为

$$P_n = P_0 W^n$$

# 例: 无规行走



醉汉行走,每一步向左和向右的概率均为  $\frac{1}{2}$ , 他无法记住前一步是如何走的.

# 问 题

- 在何种条件下  $P_n(X)$  与时间  $n$  和初始条件无关? 并且趋向于一个极限概率  $P(X)$ ?
- 给定  $W(X \rightarrow X')$ , 如何计算  $P(X)$ .
- 给定  $P(X)$ , 如何构造  $W(X \rightarrow X')$ .

# 不可约

对任何状态 $I$ 和任意状态 $J$ , 对于某个 $n$ ,  $n$ 步后从 $I$ 到 $J$ 的概率不为0.

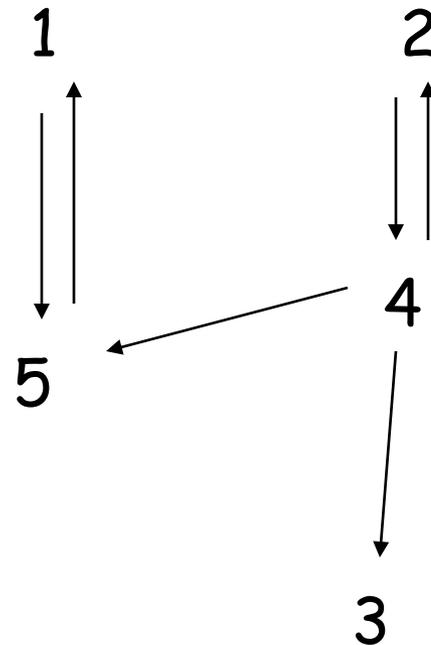
或, 对于某个  $n$ ,  $[W^n]_{IJ} > 0$ .

# 吸收状态

- 吸收状态: 一个状态,如果到达了该态,则无法走到任何其它地方去.
- 闭合子集: 一个子集合,一旦进入,将永远在此子集合内的状态间转移.

# Example

$$W = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$



$\{1,5\}$  is closed,  $\{3\}$  is closed/absorbing.

It is not irreducible.

# 非周期态

如果对于足够大的  $n$ , 总有  $[W^n]_{II} > 0$ , 则状态  $I$  是非周期的,

对所有  $n > n_{\max}$ , 从状态  $I$  走  $n$  步后回到  $I$  的概率非0.

# 不变分布或平衡分布

如果

$$\sum_Y P(Y)W(Y \rightarrow X) = P(X)$$

我们说  $P(X)$  对于  $W(X \rightarrow Y)$  是不变分布.

# 向平衡态的收敛

设 $W$  不可约和非周期, 假定  $W$  有一个不变分布  $p$ . 则对于任何初始分布, 当  $n \rightarrow \infty$  时, 对所有  $j$  都有

$$P(X_n = j) \rightarrow p_j,$$

这一定理给出了存在唯一的极限分布的条件.

# 极限分布

同时还有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [W^n]_{ij} = p_j$$

与初始状态  $i$  无关.

$$PW = P, \quad \sum_i P_i W(X_i \rightarrow X_j) = P_j$$

# 趋向平衡的条件

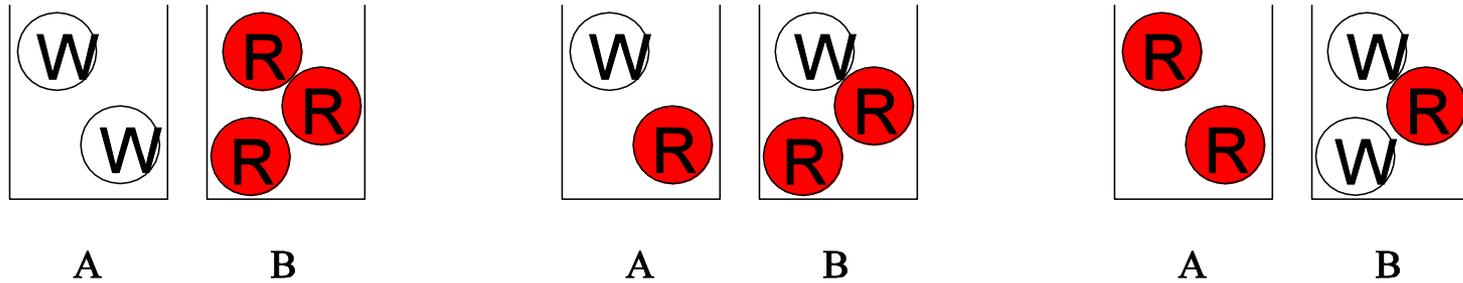
不可约和非周期条件的意义是

对所有状态  $j$  和  $k$ ,

$$[W^n]_{jk} > 0$$

对于足够大的  $n$  成立. 这一点又被称为是各态历经.

# Urn Example



There are two urns, urn A has two balls, urn B has three balls. One draws a ball in each and switch them. There are two white balls, and three red balls.

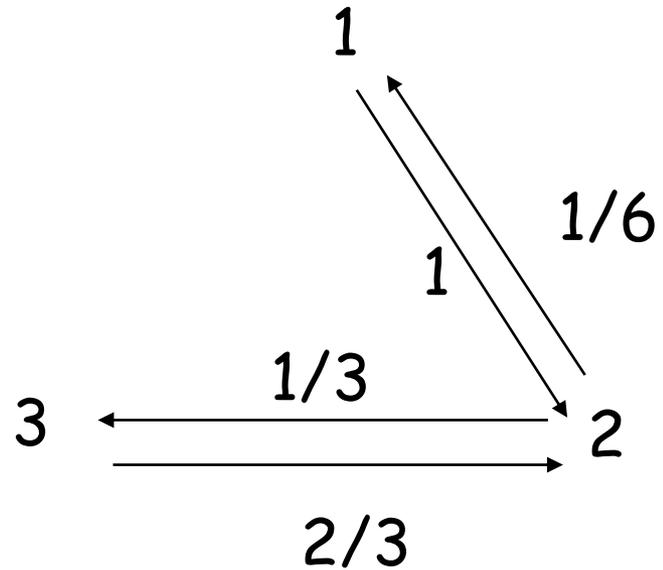
What are the states, the transition matrix  $W$ , and the equilibrium distribution  $P$ ?

# The Transition Matrix

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1/6 & 1/2 & 1/3 \\ 0 & 2/3 & 1/3 \end{pmatrix}$$

Note that  $W^2$  are all positive.

$$W^2 = \begin{pmatrix} 1/6 & 1/2 & 1/3 \\ 1/12 & 23/36 & 5/18 \\ 1/9 & 5/9 & 1/3 \end{pmatrix}$$



# 本征值问题

- 获得  $P$  的问题是一个本征值问题

$$P = P W$$

- 其解为

$$P_1 = 1/10, P_2 = 6/10, P_3 = 3/10.$$

- 物理意义?

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1/6 & 1/2 & 1/3 \\ 0 & 2/3 & 1/3 \end{pmatrix}$$

$$p_1 = \frac{1}{6}p_2$$

$$p_2 = p_1 + \frac{1}{2}p_2 + \frac{2}{3}p_3$$

$$p_3 = \frac{1}{3}p_2 + \frac{1}{3}p_3$$

$$p_3 = \frac{1}{2}p_2$$

$$p_2 = \frac{1}{6}p_2 + \frac{1}{2}p_2 + \frac{1}{3}p_2 = p_2$$

$$p_1 = \frac{1}{10}, \quad p_2 = \frac{6}{10}, \quad p_3 = \frac{3}{10}$$

# 趋向于平衡

- Let  $P_0 = (1, 0, 0)$

$$P_1 = P_0 W = (0, 1, 0)$$

$$P_2 = P_1 W = P_0 W^2 = (1/6, 1/2, 1/3)$$

$$P_3 = P_2 W = P_0 W^3 = (1/12, 23/36, 5/8)$$

$$P_4 = P_3 W = P_0 W^4 = (0.106, 0.587, 0.3)$$

$$P_5 = P_4 W = P_0 W^5 = (0.1007, 0.5986, 0.3007)$$

...

$$P_0 W^\infty = (0.1, 0.6, 0.3)$$

# 趋向于平衡

$$W^4 = \begin{bmatrix} 0.1065 & 0.5880 & 0.3056 \\ 0.0980 & 0.6042 & 0.2978 \\ 0.1019 & 0.5957 & 0.3025 \end{bmatrix} \quad W^6 = \begin{bmatrix} 0.1007 & 0.5986 & 0.3007 \\ 0.0998 & 0.6005 & 0.2998 \\ 0.1002 & 0.5995 & 0.3002 \end{bmatrix}$$

$$W^8 = \begin{bmatrix} 0.1001 & 0.5998 & 0.3001 \\ 0.1000 & 0.6001 & 0.3000 \\ 0.1000 & 0.5999 & 0.3000 \end{bmatrix} \quad W^9 = \begin{bmatrix} 0.1000 & 0.6001 & 0.3000 \\ 0.1000 & 0.6000 & 0.3000 \\ 0.1000 & 0.6000 & 0.3000 \end{bmatrix}$$

$$W^{10} = \begin{bmatrix} 0.1000 & 0.6000 & 0.3000 \\ 0.1000 & 0.6000 & 0.3000 \\ 0.1000 & 0.6000 & 0.3000 \end{bmatrix}$$

# 时间反演

问题:

设  $X_0, X_1, \dots, X_N$  是一个马尔可夫链, 具有不可约的转移矩阵  $W(X \rightarrow X')$  和平  
衡分布  $P(X)$ , 什么样的转移矩阵将会导致一个时间反演的链  $Y_0 = X_N, Y_1 = X_{N-1}, \dots,$   
 $Y_N = X_0$ ?

新的转移矩阵  $W^R$  应该满足

$$P(X)W^R(X \rightarrow X') = P(X')W(X' \rightarrow X)$$

原始过程

$$P(X_0, X_1, \dots, X_N) = P(X_0)W(X_0 \rightarrow X_1)W(X_1 \rightarrow X_2) \\ \dots W(X_{N-1} \rightarrow X_N)$$

必须等于反演过程

$$P(X_N, X_{N-1}, \dots, X_0) = P(X_N)W^R(X_N \rightarrow X_{N-1}) \\ W^R(X_{N-1} \rightarrow X_{N-2}) \dots W^R(X_1 \rightarrow X_0).$$

# 可逆马尔可夫链

若一个马尔可夫链满足细致平衡条件

$$P(X)W(X \rightarrow Y) = P(Y)W(Y \rightarrow X)$$

则说它是可逆的.

几乎所有的用于Monte Carlo计算的马尔可夫链都被构造成为可逆的.

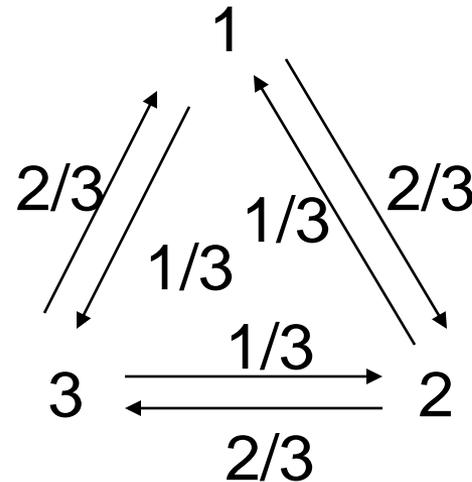
# An example of a chain that does not satisfy detailed balance

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 2/3 & 1/3 \\ 1/3 & 0 & 2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 0 \end{pmatrix}$$

Equilibrium distribution is

$$P = (1/3, 1/3, 1/3).$$

The reverse chain has transition matrix  $W^R = W^T$  (transpose of  $W$ ).  $W^R \neq W$ .



# Realization of Samples in Monte Carlo and Markov Chain Theory

- A Monte Carlo sampling do not deal with probability  $P(X)$  directly, rather the samples, when considered over many realizations, following that distribution.
- Monte Carlo generates next sample  $y$  from the current  $x$ , using the transition probability  $W(x \rightarrow y)$ .

练习:

一个骰子的近邻状况如下:

1  $\rightarrow$  2, 3, 4, 5

2  $\rightarrow$  1, 3, 4, 6

3  $\rightarrow$  1, 2, 5, 6

4  $\rightarrow$  1, 2, 5, 6

5  $\rightarrow$  1, 3, 4, 6

6  $\rightarrow$  2, 3, 4, 5

设骰子置于桌面上, 每次都随机推倒。请写出这一问题的转移矩阵 $W$ , 并利用本征值方法和迭代方法求每个面出现的概率。

编程题：

1, 模拟二维简单无规行走，计算x方向，y方向，和总的末端距平方的平均值和链长N的关系，与严格结果比较。

鸣沙山月牙泉

祝各位国庆节快乐!

谢谢大家!

1, 模拟二维简单无规行走, 计算x方向, y方向, 和总的末端距平方的平均值和链长N的关系, 与严格结果比较。



## 逾渗问题中的几个重要的物理量:

- 1, 集团尺寸  $s$ : 集团中包含的格点数
- 2, 平均集团尺寸分布  $n_s(p)$ : 定义为尺寸为  $s$  的集团的数目。 $sn_s$  为尺寸为  $s$  的集团所占据的格点的总数。

3,

$$w_s = \frac{sn_s}{\sum_s sn_s}$$

为随机抽取一个占据格点时, 该格点处于某一尺寸为  $s$  的集团的几率。

- 4, 平均集团尺寸由下式给出

$$S = \sum_s s w_s = \frac{\sum_s s^2 n_s}{\sum_s s n_s}$$

跨越集团几率  $P_\infty$ : 跨越集团内包含的格点总数与占据格点总数之比. 对于一个无穷大的格点, 当  $p < p_c$  时,  $P_\infty = 0$  而当  $p = 1$  时,  $P_\infty = 1$ , 在  $p = p_c$ ,  $P_\infty$  由零变为非零且随  $p$  增加而增加.

回转半径  $R_s$ :

$$R_s^2 = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s (\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}})^2$$

其中:

$$\bar{\mathbf{r}} = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s \mathbf{r}_i$$

**平均连接长度  $\xi(p)$** : 集团的线性尺寸, 常用的定义有回转半径, 如非跨越集团的平均回转半径, 最大非跨越集团的回转半径等。

当  $p < p_c$  时, 随  $p$  的增加而增加, 而  $p > p_c$  时, 随  $p$  的减小而增加, 在  $p = p_c$  处发散. 当  $|p - p_c| \ll 1$  时, 我们称系统处于临界区域,  $\xi$  的发散行为是非解析的, 满足如下的指数关系

$$\xi(p) \sim |p - p_c|^{-\nu}$$

在临界区域, 当  $p > p_c$  时, 有  $P_\infty \sim (p - p_c)^\beta$

集团的尺寸发散, 其行为是  $S(p) \sim |p - p_c|^{-\gamma}$

这样我们定义了三个临界指数。

对于二维问题，这些临界指数可以解析求出，其值为 $\beta = 5/36$ ， $\gamma = 43/18$ ， $\nu = 4/3$ 。

对于三维问题，只能用各种近似方法来得到，其结果为 $\beta = 0.4$ ， $\gamma = 1.8$ ， $\nu = 0.875$ 。这些指数具有很大的普适性，与晶格结构以及与关联长度的不同定义均无关。除此之外，它们之间还满足一定的关系，如

$$2\beta + \gamma = \nu d$$

式中 $d$ 为空间维数，这种关系称为标度关系。

相对于临界指数，临界点 $p_c$ 则不是一个普适量，对于二维正方格点， $p_c = 0.5927$ 而对于三角格子 $p_c = 1/2$ 。

## 逾渗的计算机模拟和分析

**第一步**是生成逾渗集团, 这是最简单的一步;

**第二步**是标定集团, 即找出每个集团所包含的格点, 并对集团编号, 以便进一步分析, 这是整个分析中最困难的一步;

**第三步**是根据第二步的结果, 具体计算临界几率, 临界指数等, 这一步也非常简单。

我们重点介绍第二步!

# 集团分析：Hoshen-Kopelman算法

J. Hoshen and R. Kopelman, PRB 14, 3438(1976)

np(1)=1	10	10			12		11	
np(2)=2	10			8		11	11	9
np(3)=3			8	8				9
np(4)=2		6				2		
np(5)=5		6		4	2	2		7
np(6)=6				4	2		5	
np(7)=7		1			2			3
np(8)=8	1	1		2	2	2		3

np(9)=9  
np(10)=10  
np(11)=9  
np(12)=12

# 集团分析：Hoshen-Kopelman算法

10	10			12		9	
10			8		9	9	9
		8	8				9
	6				2		
	6		2	2	2		7
			2	2		5	
	1			2			3
1	1		2	2	2		3

4 → 2

11 → 9

请自己完成其它步骤并写出程序！

计算 $P_\infty$ 与 $p$ 的关系，计算 $S$ 与 $p$ 的关系，计算 $\xi$ 与 $p$ 的关系。  
得到相变点和临界指数（如何求？）

$$P_\infty \sim (p - p_c)^\beta$$

$$\ln P_\infty = \beta \ln |p - p_c| + C$$

练习：

- 1, 写出R250的随机数发生器。
- 2, 利用R250和其它你可以找到的随机数发生器, 生成随机数序列, 并利用 $(x_k, x_{k+p})$ 在显示屏打点, 检查其质量。
- 3, 利用不同的随机数发生器, 用简单抽样法计算积分

$$\int_0^2 \frac{\sin^4(x)}{\sqrt{\cos^3(x) + \frac{3}{\pi}}} dx$$

- 4, 模拟二维简单无规行走, 计算x方向, y方向, 和总的末端距平方的平均值和链长N的关系, 与严格结果比较。
- 5, 模拟不退行二维无规行走。

**习题1:** 模拟三维空间SAW的相变.

- 1, 通过模拟, 计算有 $n$ 个近邻, 且末端距为 $R$  的链的分布  $P(n, R)$ ,
- 2, 由 $P(n, R)$ , 积分求得有 $n$ 个近邻的分布  $P(n)$ ,
- 3, 计算感兴趣的物理量(能量, 比热, ...)

参考文献: K Kremer, A Baumgartner and K Binder  
J. Phys. A: Math. Gen. 15 (1981) 2879-2897.

**习题2,** 对于不同的 $p$ , 模拟和分析二维逾渗问题, 计算各个临界指数。

