图书基本信息

书名：<<经典和量子耗散系统的随机模拟方法>>

13位ISBN编号：9787030242808

10位ISBN编号：7030242807

出版时间：2009-1

出版时间：科学出版社

作者：包景东

页数：279

字数：368000

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

前言

人们所面临和研究的问题原则上可以分为两大类：确定性问题和随机问题。

前者可用熟知的数值差分或积分解决；后者只能用模拟方法解决。

即便对确定性问题，也能够设计一个随机过程，它的某个特征量的统计平均等价于问题的解。

而随机问题又可归结为两个方面：过程方程具有随机因素；初始或边界条件是随机分布的。

可以说：“随机的是确定的”。

这句话的含义是指，孤立的系统，仅受牛顿力学支配的模型只是理想化的，而系统往往要受到环境及其他不确定因素的影响，却是可以肯定的。

随机与涨落现象是众多学科领域广泛遇到的。

解决这一问题最为方便的方法是蒙特卡罗方法（MonteCarlo method，MC方法）。

该方法是以世界上最著名的赌城——摩纳哥的蒙特卡罗市的名字来命名的，颇具象征意义，现在也多被称为计算机随机模拟方法。

一个最早包含了蒙特卡罗方法思想雏形的实验，是著名的蒲丰（ComtedeBuffon）“投针求 π ”而系统地用蒙特卡罗方法解决科学问题，出现在利用早期的电子计算机模拟中子在裂变物质中的输运现象。

随机模拟方法在许多文献中介绍过，但是很零散。

研究者使用这一方法，大多是通过跟踪文献或从有经验的学者那里学到的。

因此，将随机模拟方法系统地介绍并加以讨论是一件有意义的事情。

由于蒙特卡罗方法的巨大功效，不同的研究者在他们的工作领域内对蒙特卡罗方法（参见文献[1-12]）以及随机过程理论和应用（参见文献[13-18]）的发展都做出了贡献。

人们将蒙特卡罗模拟比喻为“最后的方法”，这有两个含义：一是说当其他方法不能解决所研究的问题时，可采用蒙特卡罗方法；二是说当能用解析或数值方法时，不要使用这一方法，因为蒙特卡罗模拟结果具有较慢的随机收敛性。

不少研究者由于对此方法缺乏体会，不敢或者不放心使用蒙特卡罗方法，主要担心精度不高，以为其相对误差会高达百分之几。

然而情况并非如此，首先，大数定理和中心极限定理在理论上保证了这种算法的正确性；其次，结果收敛于真值具有概率性，因此进行多次统计实验是必要的。

很有可能用较少的实验粒子数目就获得较好的结果，这里面有一些技巧和策略可供选择。

众所周知，统计物理的基本原理是“宏观量是相应的微观量的统计平均值”。

所以擅长于计算各类平均、特别是高维分布上的平均值的蒙特卡罗方法自然能在统计物理和凝聚态物理中发挥很大的作用。

这方面将是本书主要涉及的课题。

内容概要

本书系统地介绍了如何用随机模拟方法求解经典和量子耗散系统的问题及其策略，全书分两大部分：第一部分为经典随机系统，包含第1~9章，内容包括蒙特卡罗方法与技巧、米特罗波利斯抽样和动力学方法、噪声与涨落耗散、朗之万方程的数值模拟及其策略、主方程的蒙特卡罗模拟、反常扩散的数值模拟方法、相变模型的随机模拟；第二部分为量子耗散系统，包含第10-15章，内容包括路径积分的基本特性、传播子精确可解的例子、密度矩阵和影响泛函、量子耗散系统、变分路径积分和量子蒙特卡罗方法等。

本书从基础到前沿阐明了处理随机问题的行之有效的方案，也包含了作者多年科研与教学的体会，可供从事和研究随机过程的科技人员参考，也可作为高等院校理科有关专业的研究生学习科学计算方法的教学用书。

书籍目录

前言第一章 随机方法概述 1.1 预备知识 1.2 蒙特卡罗方法的发展 1.3 蒙特卡罗求积分思想 1.4 蒙特卡罗方法的特点 1.5 计算的若干细节 1.6 小结第二章 由已知分布随机抽样 2.1 基本特性 2.2 直接抽样方法 2.3 舍选抽样方法 2.3.1 简单分布的舍选法 2.3.2 乘分布的舍选法 2.4 复合抽样方法 2.4.1 加分布 2.4.2 随机变量的合成 2.4.3 复合抽样方法的一般形式 2.5 变换抽样方法 2.6 近似抽样方法 2.7 随机向量的抽样方法 2.8 注释第三章 降方差技巧 3.1 降低实验方差的特性 3.2 重要抽样技巧 3.3 期望估计技巧 3.4 相关技巧 3.5 分层抽样技巧 3.6 分裂与赌技巧 3.7 评注第四章 米特罗波利斯抽样和动力学方法 4.1 马尔可夫过程 4.2 正则系综平均量的计算 4.3 米特罗波利斯抽样方法 4.4 热浴法 4.5 广义米特罗波利斯抽样方法 4.6 动力学方法产生平衡态与已知分布 4.6.1 平衡态分布 4.6.2 应用算例 4.6.3 已知分布 4.6.4 动力学重要抽样求定积分 4.7 评注第五章 噪声与涨落耗散 5.1 概述 5.2 噪声与布朗运动 5.3 系统加热浴模型 5.3.1 广义朗之万方程 5.3.2 涨落耗散定理 5.3.3 谱函数 5.4 噪声的功率谱 5.4.1 色噪声 5.4.2 噪声的带宽 5.5 简谐噪声和简谐速度噪声 5.6 简谐噪声 5.6.1 简谐噪声的关联函数 5.6.2 极限情况分析 5.6.3 简谐噪声的频谱关系 5.6.4 简谐噪声的频域带宽 5.7 简谐速度噪声 5.7.1 简谐速度噪声的关联函数 5.7.2 极限情况和频谱关系 5.7.3 简谐速度噪声的频域带宽 5.8 福克-普朗克方程 5.8.1 福克-普朗克方程的推导 5.8.2 伊藤斯特拉托诺维奇困境的讨论 5.9 小结第六章 朗之万方程的数值模拟及其策略 6.1 分子动力学与布朗动力学的比较 6.2 欧拉方法 6.3 随机泰勒展开 6.3.1 乘性噪声 6.3.2 一般阻尼情况 6.3.3 奥恩斯坦-乌伦贝克噪声 6.4 随机龙格-库塔算法 6.5 随机积分方法 6.5.1 非线性力展开的积分算法 6.5.2 应用算例：倾斜周期势中的定向流 6.6 广义朗之万方程的积分算法 6.7 拟局部振荡算法 6.7.1 模型和算法 6.7.2 应用算例 6.7.3 小结 6.8 乘性白噪声驱动的周期运动 6.9 半隐式算法 6.10 阻尼积分算法 6.11 评注第七章 主方程的蒙特卡罗模拟 7.1 主方程及其差分方程 7.2 时间相关平均量和相关系数的蒙特卡罗计算 7.3 主方程的直接蒙特卡罗模拟 7.4 主方程与朗之万方程的关系 7.5 实例第八章 反常扩散的数值模拟方法 8.1 离散傅里叶变换产生任意色噪声 8.1.1 时间关联噪声的模拟 8.1.2 二维空间关联噪声的模拟 8.2 非欧姆阻尼 8.3 利用傅里叶变换产生任意关联色噪声的数值算法 8.4 粒子在非欧姆阻尼环境中的扩散 8.5 连续时间无规行走 8.5.1 CTRW模型及其数值实现 8.5.2 有势情况下的CTRW 8.5.3 小结第九章 相变模型的随机模拟 9.1 伊辛模型 9.1.1 伊辛模型 9.1.2 主要物理量和方法 9.1.3 米特罗波利斯方法 9.1.4 弛豫效应 9.1.5 周期边界条件 9.1.6 有限尺度效应 9.1.7 最近邻相互作用 9.2 伊辛模型的蒙特卡罗模拟 9.3 二元合金系统 9.4 XY模型第十章 路径积分的基本特性 10.1 传播子 10.1.1 定义和性质 10.1.2 薛定谔方程的路径积分表示 10.2 有限维位形空间中的路径积分 10.2.1 由拉格朗日函数描述波函数的时间演化 10.2.2 $K(x, t; x_0, t_0)$ 的路径积分公式 10.3 路径积分的优缺点第十一章 传播子精确可解的例子 11.1 一维自由运动 11.2 一维谐振子的传播子 11.2.1 借助经典路径求传播子 11.2.2 直接计算N-1维路径积分求传播子 11.2.3 与量子力学结果的比较 11.3 强迫谐振子的传播子第十二章 密度矩阵和影响泛函 12.1 系统环境相互作用模型 12.2 实时间路径积分 12.2.1 欧几里得泛函积分 12.2.2 用跃迁矩阵元求影响泛函 12.2.3 应用算例：鞍点通过概率第十三章 量子耗散系统 13.1 虚时间和傅里叶级数 13.2 傅里叶空间的泛函测量 13.3 量子耗散系统第十四章 变分路径积分 14.1 半经典近似 14.2 有效经典势和配分函数 14.2.1 思路 14.2.2 谐振子的有效经典势 14.3 变分路径积分 14.3.1 费恩曼克莱勒特有效经典势 14.3.2 应用算例 14.4 非线性耗散系统的有效经典势 14.4.1 双变分 14.4.2 应用算例 14.5 评注第十五章 量子蒙特卡罗方法 15.1 变分蒙特卡罗方法 15.1.1 量子多体系统的最低能量 15.1.2 麦克米伦米特罗波利斯 (McMillan—Metropolis) 方法 15.1.3 偏倚抽样法求极小能量 15.1.4 应用算例 15.1.5 扩散方程、格林函数和朗之万方程 15.2 变分蒙特卡罗方法的改进：福克普朗克方程导引 15.3 格林函数蒙特卡罗方法 15.3.1 薛定谔方程的积分形式 15.3.2 无规行走法求格林函数 15.4 扩散蒙特卡罗方法 15.5 路径积分蒙特卡罗方法 15.5.1 轨道递推方法 15.5.2 快速傅里叶变换方法 15.6 非线性量子耗散系统 15.6.1 重要高斯测量 15.6.2 有效耗散经典势 15.6.3 应用算例 15.7 量子亚稳系统的衰变速率 15.7.1 路径积分蒙特卡罗方法 15.7.2 结果和讨论参考文献索引中英文人名对照表

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>