

# 分子模拟

## ——从算法到应用

UNDERSTANDING MOLECULAR SIMULATION  
— FROM ALGORITHMS TO APPLICATIONS

[荷] Frenkel & Smit 著



化学工业出版社

# 分子模拟

## ——从算法到应用

Understanding Molecular Simulation  
—From Algorithms to Applications

[荷] Frenkel & Smit 著  
汪文川 等 译

化学工业出版社  
·北 京·

# (京) 新登字 039 号

## 图书在版编目 (CIP) 数据

分子模拟——从算法到应用/[荷]弗兰克等(Frenkel & Smit)著;  
汪文川等译. —北京: 化学工业出版社, 2002. 8  
ISBN 7-5025-3952-2

I. 分… II. ①弗… ②汪… III. 计算机模拟-应  
用-化学热力学-研究 IV. 0642. 1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2002) 第 050367 号

**Understanding Molecular Simulation—From Algorithms to Applications/  
by Frenkel & Smit**

ISBN 0-12-267370-0

Copyright©1996 by Academic Press. All Right Reserved.

本书中文简体版由 Academic Press 授权, 由化学工业出版社独家出版  
发行。

北京市版权局著作权合同登记号: 01-2002-3139

---

## 分子模拟——从算法到应用

Understanding Molecular Simulation

—From Algorithms to Applications

[荷] Frenkel & Smit 著

汪文川 等 译

责任编辑: 陈 丽

责任校对: 陈 静

封面设计: 曹达鹏 蒋艳君

\*

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话: (010) 64982530

<http://www.cip.com.cn>

\*

新华书店北京发行所经销

北京市燕山印刷厂印刷

三河市前程装订厂装订

开本 850×1168 毫米 1/32 印张 13 1/2 字数 363 千字

2002 年 9 月第 1 版 2002 年 9 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-3952-2/TQ·1557

定 价: 32.00 元

---

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

## 译者的话

理论分析、实验测定及模拟计算已成为现代科学研究的三种主要方法。20世纪90年代以来,由于计算机科学和技术的飞速发展,模拟计算的地位日渐突显。在化工新产品及新材料的研究和开发中,采用分子模拟技术,从分子的微观性质推算及预测产品及材料的介观、宏观性质,已成为新兴学术方向。仅据1999年的统计,美国各大学的化工系,已有50多个研究组在从事分子模拟方面的研究,显示出分子模拟正处在蓬勃发展的阶段。近几年内,国内有越来越多的研究组积极开展分子模拟研究,也取得了可喜的成绩。

本组从20世纪80年代中期开始分子模拟方面的研究。多年来深感在分子模拟领域内,需要一本兼顾模拟理论和应用的参考书。荷兰Frenkel及Smit合著的此书,是这方面的代表作。他们都是国际上物理界和化工界享有盛名的科学家,具有扎实的分子模拟理论功底和解决实际问题的经验,因而本书在世界上为引用最广的分子模拟专著之一。为此我们将此书译出,介绍给国内从事此领域研究的工作者、研究生及教师,以期推动国内分子模拟的研究。

本书译者有汪文川(序言,1、2、3章及附录F),周健(4、6、10、11、14章及附录A、C、E),曹达鹏(5、12、13章及附录F、D、G),金文正(第7、8、9章及附录B、I、H)。汪文川和周健对全书进行了译校。最后汪文川和曹达鹏对全书做了统稿处理。由于本书涉及了数学、物理、化学及计算机科学等基础学科,有一定的理论深度,相应给翻译者也带来了一些困难。因此译文中难免有不少缺憾,敬请读者能不吝赐教,指出不足之处,以利于我们今后改进。

本书在翻译过程中,得到作者之一Smit教授的大力支持和化工出版社的热情帮助。本组研究生、博士后多年的工作积累,对本书中的有关章节的翻译,有所裨益,借此机会对他们致以衷心的感谢。

汪文川

2002年6月于北京化工大学

## 前 言

本书并非计算机模拟操作手册。本书旨在介绍分子模拟实施方法中涉及的物理知识。当然,也要给出实施方法,否则本书内容会太抽象,以至于无多大实际用途。本书的视野是有限的。我们不打算讨论计算机模拟的各个方面,只偏向于给出一些计算工具的统一表述,而这些工具目前正用于研究相平衡,尤其是分子和大分子物质的相行为。此外,我们有意将讨论局限于经典多体体系,即使这些提及的方法也可适用于量子体系。总之,在经典多体体系的描述中,只讨论平衡现象。

本书是针对活跃于计算机模拟领域中或有志于此的读者。计算机模拟工作者不断面临与方法选择有关的各种问题,因为,总是有缤纷繁多的计算工具可供选用。我们应该作一合理的选择来了解蕴含在其中的至关重要的物理知识。本书的目的正是向读者提供这些背景。

必须在一开始就坦言,我们认为某些方法确实比另一些方法更有用,因此在叙述中有所侧重。实际上我们相信读者不会因为作者没有平等对待各种方法这一事实而抱怨。然而凡是当我们表达个人的偏好时,总是用基于物理、应用数学甚至仅仅经验的一些观点来支持它。事实上我们将叙述与实例相结合以达到两重目的。首先,表明选定的方法是如何起作用的,其次,给作者一种对于可用数值模拟来研究的现象的感受。

读者也将会看出有两类模拟方法被详加讨论:一级相转变及各种偏倚 Monte Carlo 方法。我们花费这么多篇幅于这些主题并不是认为它们比其他较少涉及的题目更重要,而是感到对上述两主题的讨论目前较为支离破碎。

本导言是为非专业人士而写的,此举出于有心。随着计算机实

验变成通用的工具,计算机模拟者群体正迅速扩张。许多新的模拟工作者将用计算机模拟作为一种工具,而并不对各种方法有太大兴趣。然而我们希望说服那些认为计算机模拟程序是一“黑箱”的读者,“黑箱”内部是有趣的,而且尤为重要是了解模拟程序的运作将大大改进将其仅作为“黑箱”的效率。

在理论构架之外,本书还讨论一些在模拟界已成为常用知识的实用技巧和规则。要追溯这些规则的起源往往是困难的。因此有些技巧在某种情况下很有用,而在其他情况下会导致程序效率低下。在本书中将按合理的文字叙述,讨论各种技巧内的理论内涵,而将主要文字用来描述各种方法的理论构架。为了表明这些想法,本书给出3类内容:算法,实例研究及例题。

### (1) 算法

算法表述构成了本书的主要部分。这种表述并不给出多少该算法如何有效地执行的信息。当然该算法的执行细节可以从全部程序清单中获取。然而,即使是在一个精心组织的程序中,程序代码也会含有工作程序所必须的多个程序行,他们会掩盖这些程序行所欲表达的算法的真意。作为一种折中方案,我们对每一种算法提供一些虚拟代码。这意味着用于真实程序时,必须赋予虚拟代码的某些基本特征。例如虚拟代码只考虑  $x$  方向,如果此代码将用于一种模拟,类似的程序行必须加上  $y$  及  $z$  方向。此外,我们也省略了大多数变量的初始化。

### (2) 实例研究

在实例研究中,在本书正文中所讨论的各种算法将综合在一完整的程序中。这些程序用来说明各种模拟的概貌。有些实例研究着重于模拟中会发生的问题或有时会犯的错误。我们用于实例研究的 Fortran 码的全部列表,读者可通过 Internet<sup>●</sup> 获取。

### (3) 例题

在例题中将演示正文中所讨论的方法如何用于一个实例中。我

---

● <http://www.hpcn.tudelft.nl/frenkel.smit.html>

们尽可能涉及目前所关心的研究课题。这样读者能获得用模拟研究这一类体系的一些感悟。此外,我们还试图在这些例题中说明模拟是如何有助于求解各种“真实的”实验或理论问题的。

在本书中所讨论的许多主题都已在公开文献中出现。然而例题及实例研究是为本书而备的。在编写这一部分材料时,我们只得包容一些据本人所知文献中未加报道过的一些计算技巧。

在计算机科学中,一般推断任何一个超过 200 行的源程序代码至少含有一个错误。全体实例研究的源程序码含有 25000 行编码。假如我们的编程能力不低于平均水平,则意味着至少在源程序代码中有 125 处错误。

基于上一段的观点,我们必须补充以下的不能承诺的事项。

我们不保证,表露或隐喻在本书中所含的各个程序没有错误,或能满足对任何特殊应用的需要。不能依靠这些程序去解决这类问题,其不正确答案可能会导致人身伤害、破坏或财产损失。本书作者和出版社对您使用各个程序所引起的直接的或随之而来的损害不承担任何责任和义务。

虽然本书及所含的程序受版权保护,但只允许作出恰当的引用,我们授权本书读者采取本书的各个程序的各部分为己所用。

最后,衷心感谢我们许多同事的帮助和合作。事实上有几十位同事在本书所叙述的主题中共同切磋。此处无法列出他们的全部姓名,我们将在正文的恰当之处提及。诚然,我们感激他们的贡献。此外,Daan Frenkel 受益于在阿姆斯特丹原子及分子物理 FOM 研究所及 Utrecht 大学 van't Hoff 实验室的同事的无数次激动人心的讨论。而 Berend Smit 受惠于与 Shell 公司的几位同事的切磋。此外,数位同事阅读了全文或部分内容以帮助完稿。他们是 Giovanni Ciccotti, Mike Deem, Simon de Leeuw, Toine Schlijper, Stefano Ruffo, Maria-Jose Ruiz 及 Guy Verbist。我们还感谢 Klaas Esselink 及 Sami Karaborni 的封面图。总之,在此感谢诸位努力。不过我们强调文中的各种错误,由我们自负,责无旁贷。

# 目 录

1 概述 .....	1
------------	---

## 第一部分 基本原理

2 统计力学 .....	9
2.1 熵及温度 .....	9
2.2 经典统计力学 .....	13
2.2.1 各态历经性 .....	15
3 Monte Carlo 模拟 .....	18
3.1 Monte Carlo 方法 .....	18
3.1.1 重要性抽样 .....	19
3.1.2 Metropolis 方法 .....	21
3.2 基本 Monte Carlo 算法 .....	25
3.2.1 算法 .....	26
3.2.2 技术细节 .....	27
3.3 尝试移动 .....	36
3.3.1 平动 .....	36
3.3.2 方位移动 .....	40
3.4 应用 .....	44
4 分子动力学模拟 .....	51
4.1 概念 .....	51
4.2 程序 .....	52
4.2.1 初始化 .....	54
4.2.2 力的计算 .....	55
4.2.3 运动方程积分 .....	57
4.3 运动方程 .....	59
4.3.1 其他算法 .....	62
4.3.2 高阶算法 .....	65



4.3.3	时间可逆算法的刘维公式 .....	65
4.3.4	李雅普诺夫非稳定性 .....	69
4.4	混合 Monte Carlo .....	71
4.5	计算机实验 .....	72
4.5.1	扩散 .....	75
4.5.2	测定相关性的 $n$ -阶算法 .....	80
4.6	一些应用 .....	86

## 第二部分 系 综

5	不同系综中的 Monte Carlo 模拟 .....	95
5.1	一般方法 .....	96
5.2	正则系综 .....	96
5.2.1	Monte Carlo 模拟 .....	96
5.2.2	算法的证明 .....	97
5.3	微正则 Monte Carlo .....	98
5.4	等温等压系综 .....	99
5.4.1	统计力学基础 .....	99
5.4.2	Monte Carlo 模拟 .....	102
5.4.3	应用 .....	106
5.5	等张力等温系综 .....	108
5.6	巨正则系综 .....	109
5.6.1	统计力学原理 .....	110
5.6.2	Monte Carlo 模拟 .....	112
5.6.3	算法的证明 .....	114
5.6.4	应用 .....	116
6	不同系综中的分子动力学 .....	119
6.1	恒温下的分子动力学 .....	120
6.1.1	Andersen 热浴 .....	121
6.1.2	Nose-Hoover 热浴 .....	127
6.1.3	Nose-Hoover 链 .....	134
6.2	在线优化: Car-Parrinello 方法 .....	138

## 第三部分 相平衡

7	自由能计算 .....	143
---	-------------	-----

7.1	热力学积分	144
7.2	化学势	148
7.2.1	粒子插入法	149
7.2.2	其他系综	152
7.2.3	重叠分布法	154
7.3	其他自由能方法	158
7.3.1	多直方图	159
7.3.2	接受率法	165
7.4	伞形抽样	167
8	无界面的共存相	173
8.1	Gibbs 系综法	174
8.1.1	配分函数	175
8.1.2	Monte Carlo 模拟	176
8.1.3	方法的实施	179
8.1.4	结果分析	185
8.2	应用	191
8.3	半巨正则系综	194
9	含固体的相平衡	202
9.1	热力学积分	202
9.2	固体的自由能	204
9.2.1	具有不连续势能的原子固体	204
9.2.2	具有连续势能的原子固体	214
9.3	分子固体的自由能	216
9.4	描绘共存曲线	219

#### 第四部分 高等方法

10	约束	225
10.1	约束	226
10.2	约束及非约束平均	231
11	稀有事件	237
11.1	理论背景	238
11.2	逾越势垒模拟	243
12	簇移动	249

12.1 簇 .....	249
12.2 早期拒受方法 .....	255
<b>13 复杂流体 .....</b>	<b>258</b>
13.1 偏倚抽样方法 .....	259
13.1.1 Metropolis 之外的方法 .....	259
13.1.2 取向偏倚 .....	260
13.2 链状分子 .....	267
13.2.1 构型偏倚 Monte Carlo .....	267
13.2.2 格子模型 .....	268
13.2.3 非格子模型 .....	272
13.3 尝试取向的产生 .....	278
13.3.1 强分子内部相互作用 .....	278
13.4 固定末端 .....	286
13.4.1 格子模型 .....	286
13.4.2 充分柔性链 .....	288
13.5 巨正则系综 .....	290
13.5.1 算法 .....	291
13.6 Gibbs 系综模拟 .....	295
13.6.1 算法 .....	295
13.7 聚合物之外的模拟 .....	298
<b>14 链状分子的自由能 .....</b>	<b>300</b>
14.1 作为可逆功的化学势 .....	300
14.2 Rosenbluth 抽样 .....	301
14.2.1 具有离散构象的大分子 .....	301
14.2.2 扩展至连续可变形分子 .....	306
14.2.3 重叠分布 Rosenbluth 方法 .....	313
14.2.4 递归抽样 .....	314

## 第五部分 附 录

<b>附录 A 线性响应理论 .....</b>	<b>319</b>
A1 静态响应 .....	319
A2 动态响应 .....	320
A3 耗散 .....	323

<b>附录 B 长程作用</b> .....	329
B1 Ewald 加和 .....	329
B2 其他替代算法 .....	338
<b>附录 C 节省 CPU 时间</b> .....	344
C1 Verlet 列表 .....	344
C2 元胞列表 .....	348
C3 Verlet 和元胞联合列表 .....	351
C4 效率 .....	354
<b>附录 D 统计误差</b> .....	358
D1 统计性质:体系尺度 .....	358
D2 相关函数 .....	360
D3 块平均 .....	362
<b>附录 E 积分方法</b> .....	365
E1 高阶方法 .....	365
E2 Nose-Hoover 算法 .....	366
E3 Nose-Hoover 链 .....	372
<b>附录 F 参考态</b> .....	375
巨正则系综模拟 .....	375
<b>附录 G Gibbs 系综中的统计力学</b> .....	378
G1 Gibbs 系综自由能 .....	378
G2 Gibbs 系综的化学势 .....	384
<b>附录 H 一些通用算法</b> .....	387
<b>附录 I 聚合物的重叠分布</b> .....	391
<b>参考文献</b> .....	395

# 1 概 述

## (1) 计算机模拟的历史

在一种基础性的新发明寻求到它的广泛应用之前，通常要花费数十年而不是几年。对计算机模拟，则另有一番故事。在第二次世界大战期间及其后，计算机模拟最初被作为开发电子计算机的用途的一种工具。这些计算机原本建成开发核武器及破译密码之用。在20世纪50年代初期，部分转为非军事用途，这就成为计算机模拟学科的开始。Wood<sup>[1]</sup>回忆道：“当 Los Alamos（原子能实验室）的 MANIAC 计算机在 1952 年开始运行，Metropolis 有意在计算机上尝试尽可能广泛的不同问题，以便评价其逻辑结构及证实其能力。”

计算机模拟的奇特之处在于：它的确也是一种“发现”，虽然它显现稍迟，且在这种方法引入后成长较慢。事实上“发现”一词略显欠妥，因为它并不涉及自然界新机理的深究，而只是描述自然界。用计算机来工作，可以给我们一个新的自然定律的比喻：有多少算法就会有多少信息。对于任何一种非平凡算法（即粗略地说，那些不能解析求解的算法），即使往往可以对计算结果的一般特性（如对称性）做出精确表述，也不能仅从程序预测该计算的结果。同样，正如我们所知，一些自然定律具有用方程式表示的某些奇异的特点，而这些方程除了在少数很特殊的情况下，人们不能精确求解。如果我们想考察多于两个相互作用的物体的运动，即使是相对简单的牛顿力学定律也变得基本上不能求解。也就是说，这些方程不能仅用铅笔和信纸解析求解。然而用计算机可以得到任意所需准确度的答案。绝大部分材料科学要处理多原子或分子体系。多往往意味着不止两个，通常是远大于此。因此如果想要了解液体的性质

(举一个特别棘手的例子)，不能希望仅用笔和纸来求得精确解。

在计算机模拟出现之前，仅有一种预测分子性质的方法，即采用作为物质近似表述的一种理论。由于仅有很少体系的平衡性质可以精确计算（例如理想气体，单谐晶体，一些格子模型，如铁磁体的 Ising 模型），因此这种近似是完全不可避免的。所以绝大多数真实物质的性质是根据近似理论来预测的（例如稠密气体的范德华方程，电解质的 Debye-Hückel 理论，用玻尔兹曼方程描述稀薄气体的输运性质）。倘若具有分子间相互作用的足够信息，这些理论将给出有关性质的估算。遗憾的是除了最简单的分子外，对于所有的分子间相互作用的了解十分有限，如果要通过直接与实验比较来检验一种特定的理论的真实性的话，这就会出问题。如果发现理论与实际不一致，这可能意味着理论是错误的，或分子间的相互作用的估算不正确，或两者兼有之。

显然，如果能不依靠近似理论求得一个给定模型体系的基本上精确的结果，这将是非常美妙的。计算机模拟允许我们真正做到这一点。一方面，可以将模型体系性质的计算结果与实际体系的结果相比较，如果两者不一致，则认为模型是不合适的，必须改进分子间相互作用的估算。另一方面，可以将某一给定模型体系的模拟与适用同一体系的计算解析预测相比较。如果此时发现理论与模拟不一致，则认为理论有缺陷。因此，在这种情形下计算机模拟起的作用可视为一种用来检验理论而设计的实验。这种在将理论应用于客观世界之前加以筛选的方法称之为计算机实验。计算机模拟的这种应用极为重要。它已导致了一些非常重要的理论修正，其中一些可以追溯到玻尔兹曼时代。而且它也改变了人们构筑新理论的方法。如今已很少有理论在计算机模拟检验之前就应用于客观世界。模拟具有双重目的：它给理论家一种问题的物理感受，它也产生一些精确的结果，用于检验所构筑的理论的质量。就其广泛用于新理论结果的最初（通常还是最终）检验的程度而言，计算机模拟已成为标准手段。

然而应予注意，计算机只向我们提供数字而不是解释。此外，

如同在真正的实验中一样，这些数字有统计误差，所以绝不能从模拟中直接得到理论关系式。也像在真正的实验中一样，还必须从中提取有用的信息。举一个十分不实际的例子。假定我们要用计算机来测定理想气体压力随密度的变化，由于理想气体的体积随压力的变化关系经 Boyle 和 Gay-Lussac 的研究，已为人们所熟知，这个例子不太有实际意义。Boyle 和 Gay-Lussac 定律表明理想气体的体积与压力的乘积为一常数。现假定用计算机模拟来测定此乘积，则可以得到一组实验结果，如表 1-1 所示。数据表明  $p$  等于  $\rho k_B T$ ，仅此而已。接下来是去推导出此结论。

表 1-1 理想气体状态方程的模拟

$\rho k_B T$	$p$	$\rho k_B T$	$p$
1	$1.03 \pm 0.04$	4	$4.04 \pm 0.03$
2	$1.99 \pm 0.03$	5	$5.01 \pm 0.04$
3	$2.98 \pm 0.05$		

计算机模拟的早期历史<sup>[2]</sup>说明了其作用。一些物理领域由于有很好的解析理论，看来不大需要模拟（例如预测稀薄气体或液晶固体性质）。然而在其他领域，充其量也只有少数已知精确结果，且其进展也因缺少无争议的检验来评价近似理论而受到阻碍。稠密流体正是此类例子。计算机模拟出现之前，建立液体模型的惟一方法是用大量宏观球体的集合（如轴承）的机械模拟<sup>[3-5]</sup>。于是主要的问题变成如何按液体中的原子一样的方式来排布这些球。这个课题的大量工作是由著名的英国科学家 Bernal 完成的，他建造及分析了流体的此类模型。事实上，公平地说，分析三维结构的最繁琐的工作是由他的研究生们完成的。如 Wilkinson 女士，她的研究任务是证实所有的泡沫塑料球特有的局部填充几何。她发现至少有 197 种。看看 Bernal 如何构筑其某些模型是有益的。以下引言取自 1962 年 Bakerian 讲座中有关 Bernal 构筑一种液体的球——辐条模型<sup>[5]</sup>：

“……取大量的橡胶球并将它们粘在 2.75~4in (1in=2.54cm)

不同长度的杆上。我尽可能仔细地粘在最初的位置上，在我的办公室做此事每 5min 被打扰中断一次，以至于不记得中断之前我干的事。但是……”

其后也做了一些模型，例如从滚珠轴承中将几千个钢球倒入一气球中。应当着重指出，这些液体的机械模型，在某些方面是十分真实的。然而由机械模拟所产生的许多结果的分析太繁琐了，最终不得不由计算机来完成。

从前面所述的观点来看，这一点是不足为奇的，即当电子计算机首次用于非经典研究时，稠密液体便成为首批须加以处理的问题之一。事实上液体的首次模拟是由 Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller 和 Teller 在 Los Alamos<sup>[6]</sup> MANIAC 计算机上采用（或更确切地说，引入）Metropolis Monte Carlo (MC) 方法来进行的。Monte Carlo 模拟的名字最早是由 Metropolis 和 Ulam 所杜撰的<sup>[7]</sup>，因为这种方法大量采用计算机产生的随机数。差不多在同一时期 Fermi, Pasta 及 Ulam<sup>[8]</sup>开展了他们著名的单谐振一维晶体的数值研究。在 Livermore 的 Alder 及 Wainwright<sup>[9]</sup>于 1956 年通过研究硬球的集聚首次报道了正确的分子动力学 MD 模拟。真实材料模型的首次 MD 模拟于 1959 年被报道了（发表于 1960 年），该研究由位于 Brookhaven 的 Vineyard 领导的小组<sup>[10]</sup>开展，模拟钴晶体的辐射危害（欲考察历史，见[11]）。Argonne 的 Rahman<sup>[12]</sup>在 1964 年报道了对真实流体（氩）的首次分子动力学模拟。此后，计算机逐渐为美国政府实验室之外的科学家所使用，模拟的实践开始扩散到其他各大洲<sup>[13~16]</sup>。随之开发了许多计算机模拟方法，不过平心而论，自 20 世纪 50 年代以来 MC 和 MD 的基本算法变化不大。

计算机模拟的最一般的应用是预测材料的性质。对于此类模拟的需求并不一定很直观。诚然测定水的凝固点要比计算机模拟来解决容易得多。关键在于测定水在 1atm ( $1\text{atm} = 101325\text{Pa}$ ) 下的凝固点虽然简单，但在高压或高温下测定此类性质往往十分困难，也就会十分昂贵。计算机不为此担心：当模拟处于 10000 K 下的体系，它并不会升温至发烟。此外，可以用计算机模拟来预测至今还



未能制得的材料的性质。最后，计算机模拟日渐应用于数据分析。例如由二维核磁共振所得到的大分子结构的一种有效方法是将实验数据输入至分子动力学模拟，让计算机求得能量上有利及与现有核磁共振 NMR 数据相符的结构。

最初这种模拟受到一定的怀疑，这是可以理解的。模拟并不适合现有的概念，即任何结论不是实验的，必是理论的。事实上许多科学家偏向于维持事情的原貌：理论适用于理论家，实验适用于实验家，而计算机不去混淆这个话题。然而，这种立场难以获得支持，正如下面一段首位用数值模拟来研究辐射危害的动力学的学者 George Vineyard<sup>[11]</sup>的传记中的一段引文所说的：

“……在 1957 年夏于 Gordon 举行的金属化学与物理学术会议上，我作了在金属中辐射损害的报告……报告之后有热烈的讨论……一时出现了一个念头，即计算机或许可用来跟踪在放射性损害的逐级过程中的细节。我们卷入了争论。一些人坚持认为在计算机上是不可能做成此事的，另一些人则认为无此必要。John Fisher 执意认为这个任务可以用手工解决得足够好，随之被迫应允去证实。他回到他的实验室工作。次日早晨，他要求再给他点时间，并答应回去后马上将结果寄给我。约两周后，还未有消息。两周后，还未有消息，我打电话给他，他承认他已经放弃了。这件事激发了我下一步如何用一个高速计算机去替代 John Fisher 的工作。”

最后，计算机模拟可以作为一个纯粹的探索工具。这听起来有些奇怪。人们倾向于说我们不能借助模拟“发现”任何事物，因为你绝不能得到你未曾输入的任何东西。计算机发现在这方面与数学发现并没有不同。事实上在使用计算机之前，未知领域的数值描述从未被考虑过。

解释这一观点的最好方法是举一个明显的例子。在 20 世纪 50 年代中期，统计力学中的一个热门问题是：一个仅有强的短程排斥力而无任何相互吸引的球形粒子体系能形成晶体吗？在一次非常著名的计算机模拟中，Alder 及 Wainwright<sup>[17]</sup>和 Wood 及 Jacobson<sup>[18]</sup>表明这种体系的确具有一阶凝固转变。这在当今已被接受为真知灼