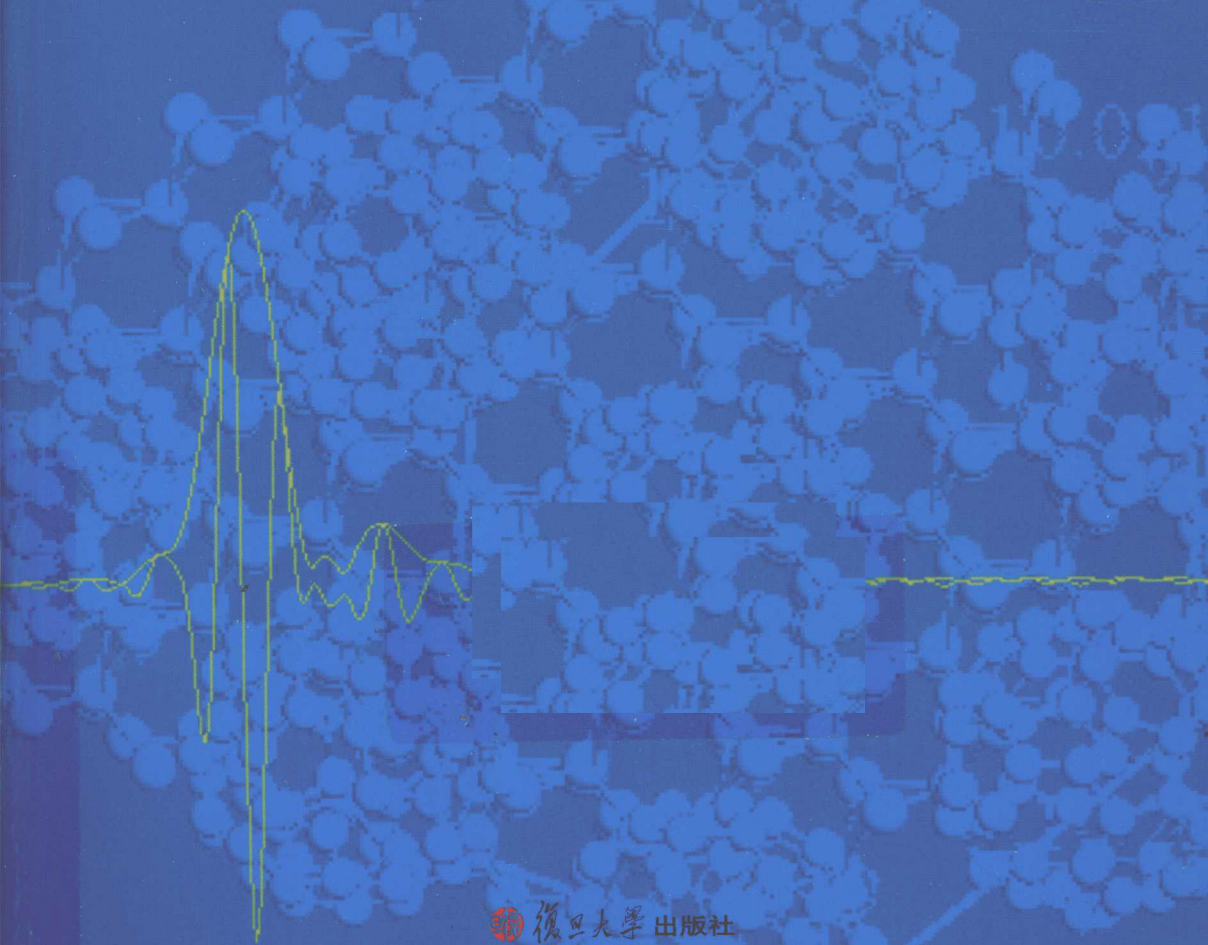
普通高等教育“十一五”国家级规划教材

计算物理学

Computational Physics

顾昌鑫 主编　顾昌鑫 朱允伦 丁培柱 编著



复旦大学出版社

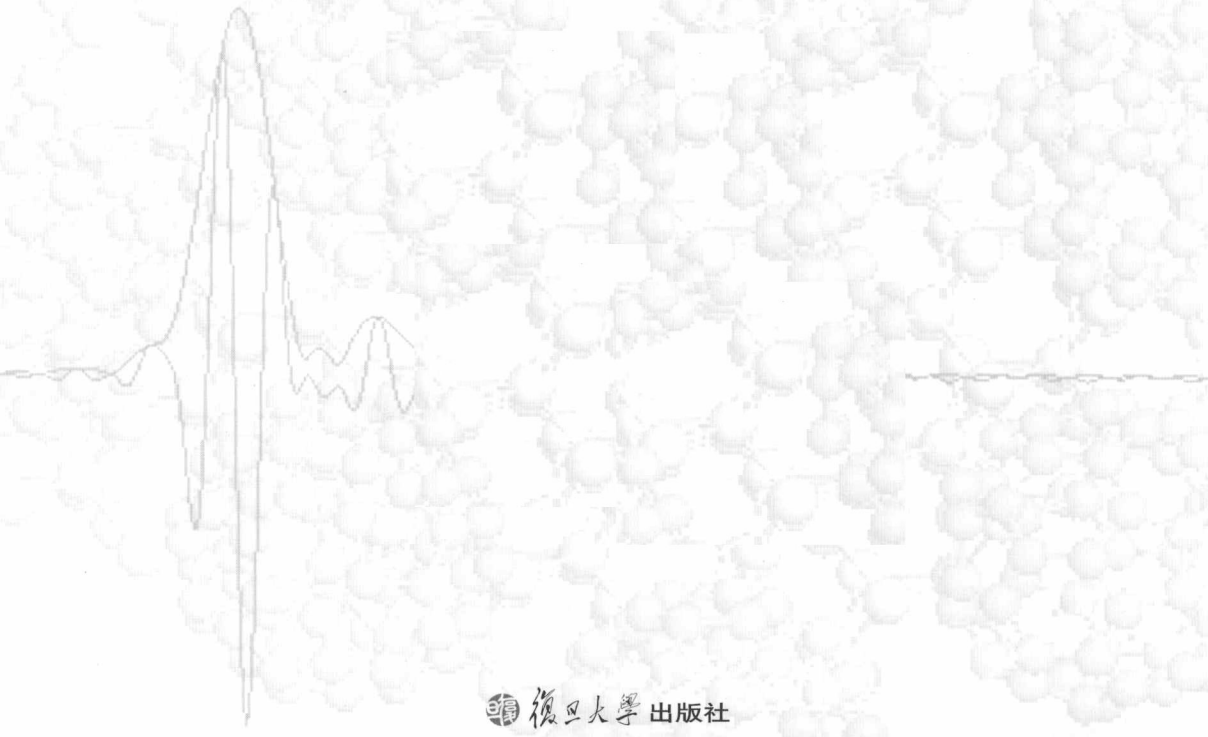
需要全本请访问 www.ertongbook.com

普通高等教育“十一五”国家级规划教材

计算物理学

Computational Physics

顾昌鑫 主编　顾昌鑫 朱允伦 丁培柱 编著



复旦大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

计算物理学/顾昌鑫主编. —上海:复旦大学出版社,2010.7
ISBN 978-7-309-07484-0

Ⅰ. 计… Ⅱ. 顾… Ⅲ. 物理学-数值计算-计算方法 Ⅳ. 0411

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 139484 号

计算物理学
顾昌鑫 主编
出品人/贺圣遂 责任编辑/梁 玲

复旦大学出版社有限公司出版发行
上海市国权路 579 号 邮编:200433
网址:fupnet@fudanpress.com http://www.fudanpress.com
门市零售:86-21-65642857 团体订购:86-21-65118853
外埠邮购:86-21-65109143
江苏省句容市排印厂

开本 787×960 1/16 印张 28.75 字数 461 千
2010 年 7 月第 1 版第 1 次印刷

ISBN 978-7-309-07484-0/O·456
定价:49.00 元

如有印装质量问题,请向复旦大学出版社有限公司发行部调换。
版权所有 侵权必究

前　言

计算物理学是物理学中实验物理学与理论物理学两大分支外的第三大分支。它是以现代计算机为工具，应用适当的数学方法，对物理问题进行数值计算及分析、对物理过程进行数值模拟的一门新的物理学分支学科，是物理学、数学与计算机科学三者相结合的交叉、综合学科。

计算物理学自20世纪中期诞生以来，它在研究复杂物理体系和近代科学技术的重大发明中所显示出的无法替代的作用及强大的功能，日益被人们所认识和重视。经过半个多世纪的不平凡发展历程，随着现代科学技术的高速发展与复杂体系研究的不断深入，计算物理学及由此拓展而成的科学计算，已发展成为除了理论与实验之外的第三种研究手段，它在当代科学技术和工程应用领域研究中的重要性已经日益明显地体现出来。

计算物理学作为物理学的一个独立分支，不仅与传统的实验物理学及理论物理学一起成为现代物理学的鼎立三足，而且深入现代的实验物理与理论物理之中，发挥着从未有过的独特作用。理论物理没有计算物理学支撑，研究难以深入；而实验物理不用计算物理的方法对实验数据进行处理，也很难甚至无法从复杂的测量结果中得到有用的物理信息，计算物理学已成为现代物理学的基石。因此当代物理工作者，无论是进行理论物理研究，还是从事实验应用研究，都必须掌握计算物理的概念和方法，具备计算物理应用能力。同样，计算物理学工作者不仅需要具有坚实的理论物理基础、熟谙实验物理方法，更重要的是需要掌握计算方法和应用现代计算机，解决科学前沿领域和重大工程技术中传统的理论解析方法及目前实验技术无能为力的问题。这种多学科交叉的复合型计算物理人才的教育与培养，是我国国民经济建设各个方面，特别是我国高科技事业发展的迫切需要和国防科技事业的强劲需求，计算物理学的教育和计算物理学教材建设也就显得十分重要了。

从上世纪80年代初开始，复旦大学就在物理系为固体物理专业与电子物理专业研究生率先开设了计算物理学课程，这或许是国内高等学校中最早开设计算物理课程的单位，然后扩大至理科其他各系和专业。当时由张开明教授首开主讲，80年代中期后由笔者讲授。由张开明教授编写的“计算物理”课程讲义，曾提供给其他兄弟院校作参考，并在同行的鼓励和督促下，于1987年由张开明、顾昌鑫修订出版，这本教材还曾获得“上海市优秀图书奖”。随着近年科学技术的高速发展，特别是计算物理学科本身的发展，在我校讲授计算物理课程的多年教学实践中，课程内容得到不断的充实和深化，对原有的《计算物理学》一书作补充和修订显然很有必要而且也是客观要求。由于种种原因，笔者虽有此愿，终未动笔。2005年12月一次偶然的机会，在复旦大学出版社鼓励督促下，申报“十一五”国家级规划教材，不料一举中的，于是才提笔重新修订编著。

计算物理学编著的体裁通常有两种：一是以数值计算方法为框架，先介绍数学物理方程常用的数值计算方法，然后以具体的物理问题为实例，介绍数学方法的应用；一是以物理问题为框架，同时介绍求解物理问题的数值计算方法。两种体裁各有特点。前一种体裁常会给人以“计算数学＋应用实例”的感觉，而较难体现计算物理的真正内涵。笔者认为计算物理学则是从物理问题出发，通过建模和借助计算机进行数值研究（数值计算和数值模拟），分析计算模拟结果后，最终以得出物理结论为归宿，所以，物理是主体，数学是方法，计算机是工具，计算物理学宗于物理。后一种体裁更能体现出计算物理学作为物理学第三大分支的特点，张开明教授与笔者合著的《计算物理学》（1987年版）就是尝试以这种体裁编写的。但是这种形式往往不能使数值计算方法的通用性凸显出来，而且在科学技术和工程技术众多领域中应用的重要性不易体现。何种体裁更合理，仍有待商榷。最好的办法是尽量将两种写法结合起来，视具体内容互有侧重，希望既能体现出计算物理宗于物理又能显示其广泛适用性的特点。不同专长的教师讲授计算物理学课程，会有不同的风格，各有侧重而各具特色，教学也应与学术研究一样，兼容并蓄才能丰富计算物理的教学，推动计算物理的发展。

计算物理学课程在复旦大学开设至今已近三十年，已成为复旦大学物理学、电子物理、材料物理、原子核物理、无线电物理、微电子学、通讯与微波遥

需要全本请访问 www.ertongbook.com

感，以及化学等诸多专业研究生的修读课程。

本书编写时，适当考虑了不同专业的需要，从数值计算和数值模拟两个方面，介绍了计算物理的常用方法，着重介绍了某些理论计算、实验数据处理和数值模拟等方面的实例，引导读者对应用计算物理概念、方法，研究具体物理问题的途径、过程与规律——从物理概念、原理、模型、方法到结论和应用，有一个基本完整的了解，进而付之应用。本书还特别包含了在物理学中应用极为广泛的快速傅里叶变换和最优化方法，这在其他同类书籍中少有涉及。这两方面的内容，相信会有力地增强读者解决实际问题的能力。本书的内容比1987年版的《计算物理学》有较大的扩充，力求体现计算物理学宗于物理的实质，同时对某些抽象的数学方法所蕴含的深刻内涵作了独特的物理诠释，也许是本书的特色所在。由于计算物理学是一门综合性交叉学科，涉及物理、数学、计算机科学等多个方面的知识，所以本书的读者需要具备物理学、高等数学基础知识和一定的计算机程序编写能力。

需要特别指出的是，本次编著得到了计算物理造诣深厚的吉林大学丁培柱教授和北京大学朱允伦教授的鼎力支持，他们还承担了部分内容的编写，使本书大为增色。具体而言，第一、二、三、四、五章由顾昌鑫在原来张开明、顾昌鑫编著的《计算物理学》的基础上整理、撰写；第六章根据朱允伦基于其原著《模拟物理学概论》提供初稿、由顾昌鑫整理撰写，其中§6.4与附录6AⅡ是朱允伦撰写的新内容；第七章§7.1、§7.2、§7.3、§7.4.4则根据张开明、顾昌鑫编著《计算物理学》有关内容及朱允伦基于其原著(同上)提供的初稿由顾昌鑫撰写，§7.4.1至§7.4.3、§7.5、§7.6由朱允伦撰写；第八章由丁培柱撰写。全书由主编顾昌鑫整理、定稿。

由于计算物理学涉及和应用的领域非常广泛，笔者在1987年版的《计算物理学》前言中说过，现在仍然这样认为：企图考虑到各个方面的需要，写出一本内容完全的计算物理书，这无论从计算物理学本身的特点来说，还是就作者有限的知识和实践经验而言，都将是十分困难和并不现实的。另外，近年发展起来的数值计算和数值模拟方法(如神经网络方法和元胞自动机方法)，以及并行计算机及并行算法等，限于本书篇幅都未列入。而且不同的专业有不同重点需求，本书只能阐述和介绍计算物理学基本的概念与常用方法，即使对于比较适用的专业，也是不尽完备的。由于同样的原因，计算物理的习题也不可

能是面向所有专业领域，为了免受编著者专业局限的影响，本书也不附习题，读者或使用本教材的教师可根据各自的专业布置作业或习题。本书的重编出版如果能够推动有关同行从事计算物理学这个新兴物理学分支的研究和对读者有所裨益的话，作者将感到十分欣慰，也是我们编著的初衷。限于作者的水平，书中难免有不少疏漏甚至错误之处，诚望读者不吝赐教。

编写本书时得到了张开明教授的热情支持和指导，选用了她同笔者编著的《计算物理学》(1987 年版)和她早期编写的讲义的有关内容。但是，她坚持不再署名，为此，笔者心怀敬意尊重她本人意愿。张开明教授是我校计算物理的开创者，为我校计算物理的发展作出了重要贡献，谨对她深表钦敬和诚挚谢忱。

历届不同专业的学生，在作为课程考核的计算物理作业中，将计算物理的基本原理、概念方法用于各自专业的学位论文课题研究中，取得了十分可喜的成果，几乎都达到国内外学术刊物论文水平。作业的多样性、广泛性丰富了课程内容。本书中也选用了复旦大学师生的部分科研成果，作者对他们的贡献表示感谢。在编写本书的过程中，参阅了有关同行的计算物理学著作，深得教益，还承蒙许多师长和同事鼓励、指教和书稿整理校对等给予的诸多帮助，以及复旦大学出版社、编辑的热情支持，作者谨在此一并表示衷心感谢。

谢希德院士素以睿智与敏锐的目光，关注国外科学发展新动态，开创新学科。复旦大学计算物理学科的开创和发展，也得到了谢希德教授的关心和指导，包括对本人步入计算物理行列给予了热情的指示和鼓励，作者铭感至深。复旦大学前校长华中一教授同样对计算物理学科深为关注，给予了重要的支持和指导，弥足珍贵。

愿以重新编写出版的《计算物理学》作为心香一瓣献给先辈。

顾昌鑫

于复旦大学

二〇〇九年九月

前　言

（《计算物理学》1987 年版）

近年来，物理学的一大分支——计算物理学，日益引起人们的兴趣，受到人们的重视。由于计算物理学的性质、研究方法和它所需要的设备等方面，与实验物理和理论物理两大分支之间有着明显的差异，因而逐渐形成为物理学的一个独立分支——第三分支。

科学技术的发展，使所研究的体系越来越复杂，传统的解析推导方法已经不敷应用，甚至无能为力；而计算科学的发展，大规模高速计算机的出现又为物理学研究提供了有效的手段，成为必不可少的工具。研究体系的复杂性也促进了计算物理学的产生和发展。

就本质上而言，计算物理是对复杂体系的物理规律、物理性质进行研究（特别是数值研究）的一个重要手段。计算物理学的研究主题无论是属于理论的范畴还是属于实验结果的分析处理方面，都使原来的理论物理和实验物理的研究状况大大改观，不仅使理论研究从解析推导的束缚下解放出来，而且使实验物理的研究手段得到根本的改革，使其建立在更加客观的基础上，更有利于从实验本身的现象中揭示客观规律。从某种意义上说，计算物理学的研究方法及研究风格更接近于实验科学。有人把它称为“数值实验”或“实验的理论”是有一定道理的。

研究体系的复杂性可以表现在各个方面。例如，从研究具有较少自由度的体系转变到研究具有较多自由度的体系，就是很有代表性的一个方面。这表现为对常微分方程的求解转变为对偏微分方程的求解。体系自由度的增加，使求解过程增加了复杂性。诸如流体力学，薛定谔方程或狄喇克方程在非中心或多体条件下的求解，天体物理中的辐射传输等问题，就属于这一类。问题的复杂性还来自对标量系统的研究扩展为对矢量或张量系统的研究，以及

从线性系统发展到非线性系统的研究。例如广义相对论的偏微分方程组就是这种复杂性的表现，它既是张量的又是高度非线性的。问题的复杂性使解析方法失去了原有的威力，而借助于计算机进行研究往往是唯一可能的方法。复杂性是科学进展的必然结果，计算物理学的产生和发展也就成了必然趋势。计算物理解决一些重要科学问题的事实，就充分说明了计算物理学作为物理学第三分支的地位及其重要性。

计算物理学在凝聚态物理方面的应用可以使人们对它的作用有一个充分的认识。大家知道凝聚态物理包括许多分支，诸如对完整固体和非完整固体电子结构和几何结构的研究；对无序材料和非晶态材料、液体金属和合金的研究；对表面、界面以及人工合成的各种调制结构的研究等等，计算物理学对这些问题都可作出较好的解答，特别是在探索各种材料的原子结构和电子结构方面，无论是实验研究或理论研究，计算物理都是不可缺少的。这可以以固体电子结构的研究为例来说明。以往，用传统的能带方法研究完整的固体的结构并不太困难，因为完整的固体有周期性的晶格结构和周期性的势场，我们只要取一个原胞来进行计算就行。原胞的尺寸不大，体心立方与面心立方的原胞都只包含一个原子，即使像金刚石或闪锌矿结构一类的晶体也只由两个原子构成一个原胞。计算是对一个简约布里渊区中不同的 K 点进行的，计算工作量并不太大。但是对于对称性破缺的不完整固体，例如研究固体的表面问题，情况就复杂得多。固体表面只具有二维周期性，垂直于表面方向的周期性已经丧失，这就需要作特殊的处理。对固体表面电子态的研究通常有两种方法：一是所谓薄片模型法，用几个原子层来模拟半无限的表面，然后人为地构造出三维的周期性，再用能带方法求解。由于原胞增大，计算工作量增加很多。二是量子化学的方法，即用有限个原子构成的集团来模拟半无限的表面，然后采用量子化学的方法来计算。显然，需根据不同的要求来选取适当的原子集团。可以想象，为模拟无穷的固体，原子集团应取得越大越好，原子个数越多越好，计算工作量当然也随之很快增加。即使考虑 50 个原子构成的集团，也还不能算太大，若采用原子轨道线性组合(LCAO)的方法来进行计算，而且只计及最外层的 s，p 轨道的话，表面电子态的研究就将归结为求解 200 阶矩阵的特征值问题。对某些元素还应该考虑 d 轨道，那就变成 450 阶矩阵的求解问题，如果考虑内层芯能级电子的话，阶数就更高了。这样高阶矩阵的对角

化问题，如果不借助于电子计算机的话，将一筹莫展。再说为得到久期矩阵元，要计算大量的所谓多中心积分（一般是六重积分），其工作量也可想而知。又比如由于薛定谔方程的非线性，整个计算还应采用逐次迭代以达到自洽收敛，这无疑会增加许多计算工作量。近年来，新型材料的研究是一个相当活跃的领域，这也要牵涉到大原胞的计算。因此提高计算能力，革新计算技巧，已成为凝聚态物理理论研究的迫切需要，反过来这也推动了计算物理的发展。

计算物理不仅为理论研究开拓了新的途径，而且使实验研究进入了一个新的阶段。

用实验研究方法来确定物质结构，一直是固体物理学的主要课题。对于有序结构的三维晶体，早在本世纪初，用X射线衍射方法已得到基本解决。近年来表面科学的发展，需要确定表面原子的排列，由于X射线散射截面过小，用X射线衍射法已很难获得表面原子排列的信息。低能电子衍射实验（LEED）则是探测表面原子排列的一种重要方法，然而要从实验测得的结果（LEED强度随入射电子束能量变化的曲线）来决定表面的原子结构，还必须同理论上计算出的各种可能构型的能量曲线相比较，才能对实验曲线作出满意的解释。这种计算（通常采用多重散射动力学理论）非常复杂，非采用大型计算机进行数值研究不可。再如，对晶体或无序材料的研究，广延X射线吸收精细结构（EXAFS）实验方法是一种有效的手段，可以得出配位原子种类和数目、原子排列的短程结构等重要信息，但必须经过对实验数据作复杂的数学处理，而这正是计算物理的内容。由此可知，实验研究的发展也必须有计算物理的配合。

计算物理涉及的面很广，它渗透到物理学的各个领域。计算物理学也必须结合物理学的具体领域才能生根发展。此外，计算物理学在物理学中除进行数值研究以外，还可以进行非数值的运算——代数运算。现在理论物理中已经有很多繁复的解析推导可以借助计算机来进行了。这是计算物理中一个正在发展的很有前途的分支。

本书原是为复旦大学物理系固体物理专业和电子物理专业研究生“计算物理”课程编写的讲义，也曾提供给开设此门课程的其他兄弟院校作参考。在有关同行的鼓励和督促下，才决定修改出版。本书的内容主要结合这两个专业的需要，介绍了理论计算和一些实验数据处理方面的常用方法，同时对计算

物理一些基本方法也作了较系统的介绍。例如以原子结构计算为例介绍了常微分方程，特别是薛定谔方程的数值解方法（第一章）；以分子结构计算为例介绍了求解偏微分方程很有效的变分法（第二章）；以电磁场的计算为例介绍了有限差分法和有限元方法（第三章）。另外，既介绍了在物理学中应用极为广泛的最优化方法和快速傅里叶变换法（第四章和第五章），也介绍了近年来凝聚态物理实验研究常用的X光电子谱、俄歇电子谱和广延X射线吸收精细结构的数据分析处理方法（第六章和第七章）。最后，还简要介绍了对物理问题进行随机模拟的方法——蒙特卡罗法（第八章）。其中很多内容是本校教师和研究生近几年来科学研究的成果。

企图考虑到各个方面的需要，写出一本内容完全的计算物理书，这无论从计算物理本身的特点来说，还是就作者有限的知识而言，都是十分困难的。即使对固体物理和电子物理专业来说，本书也不尽完备。作者只是想通过这本书的出版，能够推动有关同行，特别是青年科学工作者，从事计算物理这个新兴物理学分支的研究工作，起到抛砖引玉的作用。

限于作者的水平，书中难免有很多缺点、不足，以致错误之处，望读者给予批评指正。

在本书最后定稿过程中，叶令、徐至中、章志鸣、赵焕卿、戴乐山等各位教授及其他同志审阅了部分章节并提出了不少宝贵的意见；复旦大学出版社的有关同志给予了热情的支持，作者谨向他们表示衷心感谢。

作　者

一九八六年六月于复旦大学

需要全本请访问 www.ertongbook.com

目　录

前言 …… 1

前言(1987 年版) …… 5

第一章　绪论和基础知识 …… 1

§1.1　绪论 …… 1

1.1.1　计算物理学的诞生 …… 3

1.1.2　计算物理学的研究对象、研究范围、研究方法 …… 4

§1.2　计算机计算的特点 …… 9

§1.3　函数离散化和曲线拟合 …… 12

1.3.1　多项式插值 …… 12

1.3.2　曲线拟合(实验数据拟合) …… 21

§1.4　数值积分 …… 24

1.4.1　Newton-Cotes 型积分公式 …… 25

1.4.2　Gauss 型积分公式 …… 30

附录 1AⅠ　线性方程组的追赶法求解 …… 32

附录 1AⅡ　三次 δ 样条插值 …… 33

参考文献 …… 35

第二章　物理问题的数值计算与分析(Ⅰ)——常微分方程的数值解 …… 36

§2.1　引言——数值解的必要性 …… 36

§2.2　常微分方程初值问题的数值解法 …… 39

2.2.1　Euler 折线法 …… 39

2.2.2　Runge-Kutta 法 …… 44

2.2.3 Adams 方法 …… 45
2.2.4 高阶微分方程和一阶微分方程组的求解 …… 46
§2.3 二阶常微分方程的数值解·原子结构的计算 …… 48
2.3.1 Numerov 方法 …… 48
2.3.2 原子结构的计算——径向薛定谔方程数值解 …… 50
§2.4 常微分方程边值问题的差分法求解 …… 62
2.4.1 差分和差商 …… 63
2.4.2 微分方程差分化 …… 64
2.4.3 常微分方程的本征值问题 …… 66
附录 2A Ⅰ 分子轨道计算 …… 69
§2AⅠ.1 引言 …… 69
§2AⅠ.2 Roothaan 方程和从头计算 …… 72
§2AⅠ.3 几种常用的近似方法 …… 78
§2AⅠ.4 多重散射 Xα 方法 …… 84
§2AⅠ.5 关于固体电子结构计算 …… 89
参考文献 …… 91

第三章 物理问题的数值计算与分析(Ⅱ)——偏微分方程的数值解 …… 92
§3.1 引言 …… 92
3.1.1 偏微分方程的求解概述 …… 92
3.1.2 电磁场计算中的微分方程 …… 94
§3.2 有限差分法 …… 99
3.2.1 差分格式的稳定性 …… 100
3.2.2 弦振动(双曲型)方程的差分格式与稳定性 …… 103
3.2.3 热传导(抛物型)方程的差分格式与稳定性 …… 108
3.2.4 椭圆型方程的差分格式 …… 109
3.2.5 其他物理问题差分格式举例 …… 122
§3.3 变分法 …… 126
3.3.1 Ritz 方法 …… 126
3.3.2 迦辽金(Галёркин)方法 …… 130

§3.4 有限元素法 …… 132
3.4.1 常微分方程边值问题的有限元方法 …… 133
3.4.2 椭圆型偏微分方程边值问题的有限元方法 …… 134
3.4.3 有限元方程的求解 …… 148
3.4.4 磁场中存在铁磁物质时的有限元法计算 …… 148
3.4.5 时变电磁场的有限元素法 …… 152
3.4.6 有限差分法与有限元素法的比较 …… 154
附录3AⅠ 矩阵的一维表示及高斯消去法·有限元素法中矩阵作一维表示的总本合成 …… 154
§3AⅠ.1 矩阵的一维表示及一维表示下的消去法 …… 155
§3AⅠ.2 矩阵作一维表示的总体合成 …… 157
参考文献 …… 159

第四章 物理问题常用算法之一——快速傅里叶变换 …… 160
§4.1 引言 …… 160
§4.2 傅里叶正变换和逆变换 …… 162
§4.3 卷积和相关 …… 167
§4.4 离散傅里叶变换 …… 169
§4.5 快速傅里叶变换 …… 178
§4.6 快速傅里叶变换应用举例之一——广延X射线吸收精细结构的数据处理 …… 183
4.6.1 EXAFS实验现象与基本理论 …… 183
4.6.2 EXAFS的数据处理 …… 188
§4.7 快速傅里叶变换应用举例之二——X光电子能谱的实验数据处理 …… 204
4.7.1 引言 …… 204
4.7.2 实验谱的预处理——噪声和背景的扣除 …… 205
4.7.3 谱的退卷积处理——去除加宽函数影响 …… 209
参考文献 …… 213

第五章 物理问题常用算法之二——最优化方法 …… 214
§5.1 引言 …… 214
§5.2 无约束最优化问题求解 …… 217
5.2.1 最优化问题基础和基本解法 …… 217
5.2.2 一维搜索 …… 222
5.2.3 求解无约束最优化问题的解析法——非直接搜索法 … 233
5.2.4 求解无约束最优化问题的直接搜索法——单纯形法 … 245
§5.3 有约束最优化问题求解 …… 249
5.3.1 惩罚函数法 …… 249
5.3.2 复合形法 …… 251
5.3.3 复合形法应用举例——电子光学系统的最优化设计 … 254
§5.4 遗传算法——全局优化算法 …… 261
5.4.1 遗传算法的基本原理 …… 262
5.4.2 遗传算法的操作步骤 …… 263
§5.5 遗传算法应用举例——离轴电子全息图的全局最优化数值重现 …… 267
5.5.1 电子全息概述 …… 267
5.5.2 电子全息图的记录 …… 269
5.5.3 电子全息图的数值重现 …… 272
§5.6 实验数据优化方法处理应用举例——俄歇电子谱的实验数据处理 …… 277
5.6.1 引言 …… 277
5.6.2 俄歇电子谱的退自卷积 …… 279
参考文献 …… 282

第六章 物理研究中确定论模拟方法——分子动力学方法 …… 284
§6.1 引言 …… 284
§6.2 分子动力学模拟的基本步骤 …… 288
§6.3 平衡态分子动力学模拟 …… 295
6.3.1 微正则系综的分子动力学模拟 …… 296

6.3.2　正则系综的分子动力学模拟 …… 298
§6.4　从头计算的分子动力学模拟概要 …… 302
§6.5　分子动力学模拟应用举例——MoS_2 基板上外延生长 C_{60} 薄膜的 MD 模拟 …… 305
6.5.1　引言 …… 305
6.5.2　MoS_2 基板上外延生长 C_{60} 薄膜的 MD 模拟 …… 305
附录 6AⅠ　时间步长 h 选取对模拟计算的影响 …… 313
附录 6AⅡ　能量均分和费米—帕斯塔—乌拉姆问题 …… 315
参考文献 …… 318

第七章　物理问题的随机模拟方法——蒙特卡罗方法 …… 319
§7.1　概论 …… 319
7.1.1　引言 …… 319
7.1.2　蒙特卡罗方法数学基础 …… 323
7.1.3　蒙特卡罗方法的基本思想和基本步骤 …… 328
7.1.4　拉普拉斯方程的蒙特卡罗方法求解——醉汉问题 …… 330
7.1.5　蒙特卡罗方法的特点 …… 333
§7.2　随机数和随机抽样 …… 334
7.2.1　产生均匀分布的随机数的方法 …… 335
7.2.2　产生具有给定分布的随机变量——随机抽样 …… 339
§7.3　蒙特卡罗方法在确定性问题中的应用 …… 349
7.3.1　应用蒙特卡罗方法计算积分 …… 350
7.3.2　求解非线性方程组的随机搜索法 …… 357
§7.4　蒙特卡罗方法在随机性问题中的应用 …… 358
7.4.1　随机游动问题 …… 359
7.4.2　随机生长过程模拟 …… 362
7.4.3　中子输运过程模拟 …… 364
7.4.4　电子与固体相互作用的蒙特卡罗模拟 …… 367
§7.5　量子蒙特卡罗方法 …… 378
7.5.1　变分蒙特卡罗方法(VMC) …… 379

7.5.2 格林函数蒙特卡罗方法(GFMC) …… 380
7.5.3 路径积分蒙特卡罗方法(PIMC) …… 383
7.5.4 量子蒙特卡罗方法的应用 …… 385
§7.6 蒙特卡罗方法在统计物理与格点规范理论中的应用 …… 386
7.6.1 计算平衡态平均值的基本方法 …… 386
7.6.2 蒙特卡罗方法在格点规范理论中的应用 …… 389
参考文献 …… 393

第八章 辛算法基础与应用——薛定谔方程的辛算法 …… 395
§8.1 引言 …… 395
§8.2 辛结构与哈密顿系统的辛算法 …… 397
8.2.1 辛结构与哈密顿力学 …… 397
8.2.2 哈密顿系统的辛格式 …… 404
§8.3 定态薛定谔方程的辛形式与辛算法 …… 411
8.3.1 一维定态薛定谔方程的辛形式 …… 412
8.3.2 一维定态薛定谔方程的辛-打靶法 …… 413
8.3.3 一维连续态的保 Wronskian 算法 …… 417
§8.4 含时薛定谔方程的辛算法与应用 …… 420
8.4.1 量子系统是一个无穷维哈密顿系统 …… 421
8.4.2 基于完备基展开的辛算法 …… 422
8.4.3 含时薛定谔方程的辛离散——空间变量离散法 …… 431
8.4.4 强激光场中的一维模型原子——基于渐近边界条件的辛算法 …… 436
参考文献 …… 443

需要全本请访问 www.ertongbook.com