Review

运动方程

演化方程 $\frac{\partial P}{\partial t} = D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + g_2 P^2 + g_4 P^4$

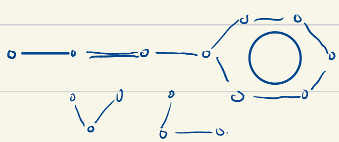
Kuramoto 模型（同步）

key Point
$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = \frac{P_{n+1} + P_{n-1} - 2P_n}{(\Delta x)^2}$$
$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{P(t+dt) - P(t)}{dt}$$

分子动力学模拟（Molecular Dynamics），ref. ① Scherer, chap 14

② M.P. Allen. Introduction to MD simulation

③ K. Vollmayer-Lee, Am. J. Phys. 2020（代码）



在分子动力学模拟中，我们可将系统写成

$$\mathcal{L} = \sum_i \frac{1}{2} m_i (\dot{\vec{r}}_i)^2 - \mathcal{U}$$

$$\mathcal{U} = \sum_{ij} U_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) + \sum_{ijk} U_{ijk}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k)$$

$\Downarrow$

系统的运动方程. $m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{f}_i$

$\Downarrow$ 离散化

$$m_i [\vec{r}_i(t+dt) + \vec{r}_i(t-dt) - 2\vec{r}_i(t)] = \vec{f}_i (dt)^2 + o(dt^2)$$

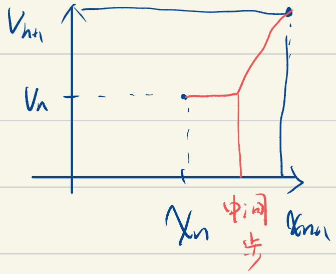
可解释很多现象：化学反应.

材料结构

相变.

蛋白质

1) Positive Verlet method



$$\begin{cases} \vec{x}_{n+1/2} = \vec{x}_n + \vec{v}_n \frac{\Delta t}{2} \\ \vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + \underset{\substack{\uparrow \\ f(\vec{x}_{n+1/2})}}{a_{n+1/2}} \Delta t \end{cases}$$

2) Velocity verlet method

$$\begin{cases} \vec{v}_{n+1/2} = \vec{v}_n + \vec{a}_n \frac{\delta t}{2} \\ \vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n + \vec{v}_{n+1/2}\, \delta t \\ \vec{v}_{n+1} = \vec{v}_{n+1/2} + \vec{a}_{n+1/2} \delta/2 \end{cases}$$

$O((\delta t)^3)$ 精度的数量级

在整个过程中最耗时的步骤是计算 $\vec{a}_{n+1/2} = \vec{f}(\vec{x}_{n+1/2}) = \frac{\partial V}{\partial x_{n+1/2}}$

复习矩阵，随机数相关知识

物理背景 $H\psi = E\psi$. 量子力学问题，矩阵.

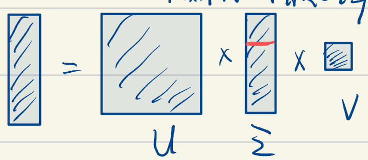
蒙特卡罗，随机过程，随机数.

矩阵. $A = (a_{ij})_{mn} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & - & - & a_{mn} \end{pmatrix}$

不能对角化的可化为约当标准型.

$A =$

- 方阵 $m=n$：
  - $A \neq A^+$（非厄密），相似变换 $A = P^{-1}\lambda P$，
  - $A = A^+$（厄密），特征值是实数. $A = U\lambda U^+$，且 $UU^+ = 1$
- 非方阵 $m \neq n$：三个重要的分解
  - LU 分解 $A = (\triangle) \times U \leftarrow$ 幺正
  - QR 分解 $A = Q \times (\triangledown)$　$QQ^+ = 1$
  - SVD 分解 $A = U\Sigma V$，$U \leftarrow$ 幺正，$V \leftarrow$ 幺正，Σ：m×n 的对角矩阵

eg. $A =$ 

$A = U\Sigma V$

$A^+ = V^+\Sigma^+U^+$

$$\begin{cases} A^+A = V^+\Sigma^+\Sigma V \\ AA^+ = U\Sigma\Sigma^+U^+ \end{cases}$$

$\boxed{\Sigma^+\Sigma \text{，是 } A^+A \text{ 对角化后的矩阵.}}$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \\ \hline & & & \\ \end{pmatrix}$$

在 mma, matlab, python 中有许多相关的命令.

概率论和数理统计复习

大数定律 和 **中心极限定律**

X_i 是一系列的独立同分布的数，$\boxed{X = \frac{1}{n}\sum x_i \sim N(\mu, \frac{\sigma^2}{n})}$

$\Uparrow$ 最终会是一个正态分布

$\bar{X} = \mu$，$\overline{X^2} - \bar{X}^2 = \frac{\sigma^2}{n}$

对于 N 个独立同分布的数的平均值，求其概率分布

$$P(X) = \overline{\delta\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} x_j - X\right)}$$

$$= \int p(x_1)p(x_2)\cdots p(x_N)\,\delta\left(\frac{1}{N}(x_1+x_2+\cdots x_N) - X\right)dx_1 dx_2\cdots dx_N$$

$$= \int dk \int p(x_1)p(x_2)\cdots p(x_N)\cdot e^{i\frac{k}{N}(x_1+x_2+\cdots x_N) - ikX} dx_1 dx_2 \cdots dx_N$$

$$= \int dk\left(\prod_{i=1}^{N}\int dx_i\, p(x_i)e^{i\frac{k}{N}x_i}\right)e^{-ikX}$$

当 N 很大时

$$\simeq \int dk\left[\prod_{i=1}^{N}\int dx_i\, p(x_i)\left(1 + \frac{ik}{N}x_i - \frac{k^2}{N^2}x_i^2\right)\right]e^{-ikX}$$

$$1 \qquad \mu \qquad \frac{k^2}{N^2}(\mu^2+\sigma^2)$$

$$= \int dk\left[1 + \frac{ik}{N}\mu - \frac{k^2}{N^2}(\mu^2+\sigma^2)\right]^N e^{-ikX}$$

$$e^{i\frac{k}{N}\mu - \frac{k^2}{N^2}(\mu^2+\sigma^2)}$$

$$= \int dk\; e^{ik - \frac{k^2}{N}(\mu^2+\sigma^2)} e^{-ikX}$$

$$\sim e^{-\frac{(X-\mu)^2}{2(\sigma^2/N)}} \sim N\left(\mu, \frac{\sigma^2}{N}\right)$$

几个地方用到

1) MC

2) 相变

3) 随机微分方程

求解 schrödinger 方程

1) 无量纲化 e.g. $\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m\dot{x}_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon|x_1 - x_2|}$

两个电子
$$\left|\begin{array}{l} m = 9.1\times10^{-31}\,kg \\ dt = 10^{-15}\,s \end{array}\right.$$

数值非常小，不利于计算机处理，选取特征单位，使数值在 $O(1)$ 量级上.