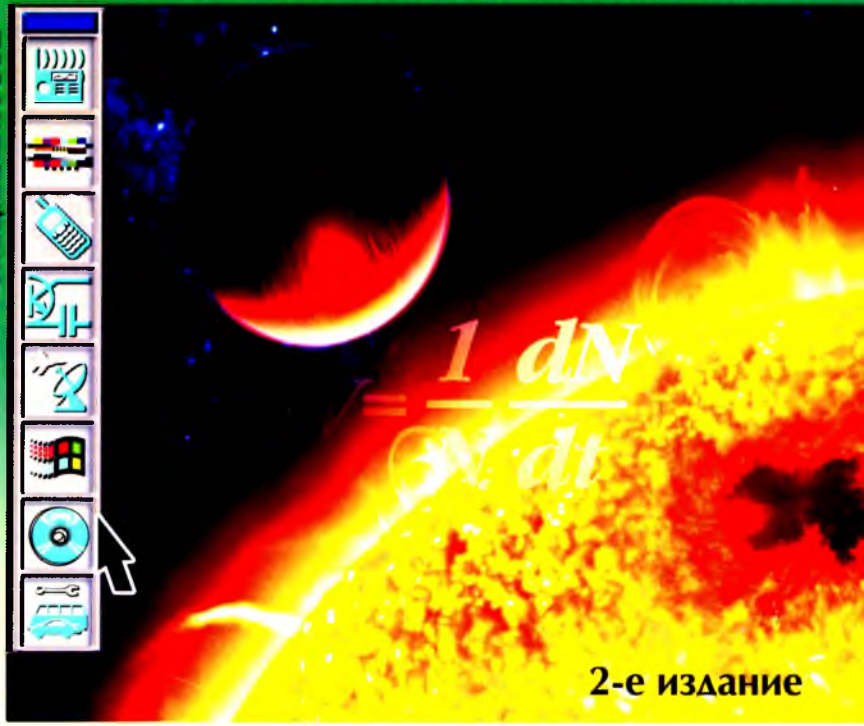
УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

ДЛЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

СПЕЦИАЛЬНОСТЬ



2-е издание

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАКЕТА MathCAD

С.В.Поршнев

Горячая линия–Телеком

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ **3**

Глава 1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ЯВЛЕНИЙ **7**

1.1. Введение 7

1.2. Моделирование свободных колебаний цепочки связанных гармонических осцилляторов 7

1.3. Моделирование вынужденных колебаний цепочки связанных гармонических осцилляторов 23

1.4. Моделирование волновых движений 33

1.5. Фурье-анализ волновых пакетов, движущихся в среде с дисперсией 37

1.6. Интерференция и дифракция 51

1.7. Геометрическая оптика 61

1.8. Поляризация 66

Глава 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ, СОСТОЯЩИХ ИЗ БОЛЬШОГО ЧИСЛА ЧАСТИЦ (МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ) **71**

2.1. Введение 71

2.2. Математическая модель статистической системы 72

2.3. Численный алгоритм решения системы уравнений движения 74

2.4. Моделирование системы, состоящей из большого числа частиц, методом молекулярной динамики 79

2.5. Оценка макроскопических характеристик статистической системы 91

2.6. Оценка коэффициентов переноса в методе молекулярной динамики 97

2.7. Моделирование фазовых переходов методом молекулярной динамики 102

2.8. Заключение 105

Глава 3. МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО **107**

3.1. Введение 107

3.2. Численные методы интегрирования функций, зависящих от одной переменной 107

3.3. Основы метода Монте-Карло 112

3.4. Алгоритм генерации случайных чисел с равномерным законом распределения 124

3.5. Алгоритм Метрополиса 127

Глава 4. СЛУЧАЙНЫЕ БЛУЖДАНИЯ 134
4.1. Введение 134
4.2. Одномерные случайные блуждания 134
4.3. Метод случайных блужданий на плоскости 145
4.4. Моделирование движения решеточного газа 169
4.5. Непрерывная модель случайных блужданий 175

Глава 5. МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ В ПРОЦЕССЕ РЕЛАКСАЦИИ И СОСТОЯНИИ РАВНОВЕСИЯ 178
5.1. Введение 178
5.2. Моделирование процесса релаксации статистической системы 179
5.3. Энтропия 189

Глава 6. МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОКАНОНИЧЕСКОГО АНСАМБЛЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО 198
6.1. Микроканонический ансамбль 198
6.2. Моделирование микроканонического ансамбля 199
6.3. Модель Изинга 209

Глава 7. МОДЕЛИРОВАНИЕ КАНОНИЧЕСКОГО АНСАМБЛЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО 225
7.1. Введение 225
7.2. Канонический ансамбль 225
7.3. Алгоритм Метрополиса для канонического ансамбля 227
7.4. Моделирование двумерной модели Изинга методом канонического ансамбля 240

Глава 8. МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ 252
8.1. Введение 252
8.2. Стационарное уравнение Шредингера 254
8.3. Моделирование колебаний двухатомной молекулы в квазиклассическом приближении 267
8.4. Нестационарное уравнение Шредингера 282
8.5. Оценка энергии основного состояния квантовой системы методом Монте-Карло 296
8.6. Оценка энергии основного состояния квантовой системы вариационными методами Монте-Карло 305

ПРИЛОЖЕНИЯ 314
1. Оценка погрешности численного интегрирования 314
2. Метод Ромберга 316