

## 自优化剩余函数量子Monte Carlo方法

黄宏新

湖南师范大学化学系, 长沙 410081

摘要:

提出剩余函数量子Monte Carlo的一个新算法, 这是一个自优化和自改善的过程. 与以前的算法相比, 本算法中的试探函数的优化是在剩余函数方法中同步进行的, 而不是在变分Monte Carlo计算之前. 为了优化试探函数, 使用一种改进了的速降法, 这是一个步长能够自动调节, 超线性收敛的优化技术. 在这个算法中, 还使用了一种新的相关函数, 它满足电子与电子以及电子与核奇点条件. 此方法已被用于计算H<sub>2</sub>、LiH、Li<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O分子的基态以及CH<sub>2</sub>的X<sup>3</sup>B<sub>1</sub>态、1<sup>1</sup>A<sub>1</sub>态和2<sup>1</sup>A<sub>1</sub>态的能量值.

关键词: 剩余函数量子Monte Carlo方法 自优化过程 相关函数

收稿日期 2002-12-27 修回日期 2003-04-03 网络版发布日期 2003-08-15

通讯作者: 黄宏新 Email: huanghongxin@etang.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1369KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 剩余函数量子Monte Carlo方法

▶ 自优化过程

▶ 相关函数

本文作者相关文章

▶ 黄宏新