

剩余函数量子 Monte Carlo 方法*

黄宏新 廉世勋 曹泽星¹

(湖南师范大学化学系, 长沙 410081; ¹ 厦门大学化学系, 厦门 361005)

摘要 为量子 Monte Carlo 方法提出一条新途径——剩余函数法; 引入了 Schrödinger 方程剩余函数的概念, 利用剩余函数将一种新的有明显物理意义的试探函数应用到量子 Monte Carlo 过程中; 这种试探函数是通过一种迭进式的方式确定的, 它不需要在 Monte Carlo 过程中优化参数. 文中我们将给出这种试探函数的具体形式, 证明由这种试探函数求出的能量期望值收敛于体系真实的能量值; 文中还给出这种试探函数能量期望值的计算公式以及它在变分 Monte Carlo 过程中的具体运算步骤; 几个分子的算例说明这种试探函数的能量期望值不仅逐步逼近体系真实的能量值, 而且逼近速度也非常快, 一般只需要 4~5 次迭进即可获得 90% 以上的相关能. 据作者所知, 这种试探函数的计算精度和收敛速度在目前量子 Monte Carlo 方法中均是最高的.

关键词: 量子 Monte Carlo 方法, Schrödinger 方程的剩余函数, 能量期望值

学科代码: B030201

近二十年来, 量子 Monte Carlo (QMC) 方法取得了很大的发展, 建立了诸如变分 Monte Carlo (VMC)^[1]、扩散 Monte Carlo (DMC)^[2]、和格林函数 Monte Carlo (GFMC)^[3] 等具体算法. 这些算法将人们带入到一个求解 Schrödinger 方程的新领域. QMC 方法最大的特长在于它能很容易地处理任意形式的试探函数的积分, 这是其它一切量子化学方法 (例如自洽场 (SCF) 方法等) 无法做到的. 然而, 无需回避的事实是: 到目前为止, 人们并没有充分地运用这一特长. 其原因在于: (1) 试探函数形式的好坏, 完全是凭经验确定, 目前还没有一个理论方法指导人们去寻找优秀形式的试探函数; (2) 即使有了某种好的形式的试探函数^[4], 人们常常又会面临着无法优化这种试探函数所包含的大量可调参数的困难. 尽管已经提出了几个优化 QMC 试探函数的方法^[4-6], 但由于统计误差的存在, 致使这些参数很难精确确定下来, 而且这种优化很费时. 由于这种种原因, 至今人们使用于 QMC 过程中的试探函数仍然主要只有一种, 那就是 Hartree-Fock 行列式乘以 Jastrow 相关函数 (HF · J)^[2]. 令人遗憾的是这种 HF · J 型的试探函数的精度并不那么令人满意, 因为它没有最大限度地发挥 QMC 方法善于处理任意形式试探函数的积分的特长. 当前寻找优秀形式试探函数的问题已经成为进一步发展 QMC 方法的关键性问题之一. 所谓优秀形式的试探函数, 我们认为它应该满足如下几个条件: (1) 由这种试探函数求出来的能量期望值原则上应该能无穷逼近体系真实的能量值, 而且逼近速度要快; (2) 不需要在 QMC 过程中优化参数; (3) 形式简单, 具有一定的物理意义; (4) 计算量较小. 人们一旦找到了适合这些条件的试探函数, 那么 QMC 方法将进入一个新阶段.

1998-09-21 收到初稿, 1999-01-01 收到修改稿. 联系人: 黄宏新. * 国家自然科学基金和湖南省教委科研基金资助项目

本文将建立“Schrödinger 方程剩余函数”的概念, 利用剩余函数将一种有明显物理意义的新的试探函数引入到 VMC 过程中. 这种试探函数是通过一种多重的迭进式的方式确定的, 它不需要在 QMC 过程中优化参数. 文中我们将给出这种试探函数的具体形式, 证明由这种试探函数求出的能量期望值收敛于体系真实的能量值; 文中还给出这种试探函数能量期望值的计算公式以及它在 VMC 过程中的具体运算步骤; 最后我们将通过几个分子的算例说明这种试探函数用于 VMC 过程取得了很大的成功, 其期望值不仅逐步逼近体系真实的能量值, 而且逼近速度也非常快, 一般只需要 4~5 次迭进即可获得 90% 以上的相关能. 据作者所知, 这种试探函数的计算精度和收敛速度均高于已报导的量子 Monte Carlo 方法.

1 剩余函数法

如果 Ψ 是体系的准确波函数, 那么该体系的 Schrödinger 方程为

$$H\Psi - E\Psi = 0 \quad (1)$$

这里 H 为体系的 Hamiltonian 算符, E 是体系的真实能量.

若 ψ_i 表示一个一般性的试探函数, 定义 Schrödinger 方程的剩余函数

$$\delta_i = H\psi_i - E\psi_i \quad (2)$$

且取 δ_i 与 ψ_i 相互正交, 即 $\langle \psi_i | \delta_i \rangle = 0$ (3)

则有

$$E_i = \frac{\langle \psi_i | H | \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle} \quad (4)$$

下面我们讨论剩余函数 δ_i 的性质:

(a) δ_i 的“重迭积分”等于 ψ_i 与 δ_i 的“交换积分”, 即

$$\langle \delta_i | \delta_i \rangle = \langle \delta_i | H | \psi_i \rangle \quad (5)$$

(b) δ_i 的物理意义是当把一个一般性的试探函数 ψ_i 作为体系 Schrödinger 方程的真实波函数 Ψ 来看待时, ψ_i 对 Ψ 所“欠缺的部分”就是 δ_i .

根据以上剩余函数 δ_i 的物理意义, 我们有理由认为若将 ψ_i 对 Ψ 所“欠缺的部分” δ_i 补充到 ψ_i 中去, 将产生一个新的试探函数 ψ_{i+1} ; ψ_{i+1} 与 ψ_i 相比应该离体系真实波函数 Ψ 更“靠近”一些. 于是我们作新的试探函数 ψ_{i+1} :

$$\psi_{i+1} = \psi_i + \lambda_i \delta_i \quad (6)$$

这里 λ_i 是一个待定系数, 下面我们用变分原理来确定 λ_i 的值以及 ψ_{i+1} 的能量期待值 E_{i+1}

$$E_{i+1} = \frac{\langle \psi_{i+1} | H | \psi_{i+1} \rangle}{\langle \psi_{i+1} | \psi_{i+1} \rangle} = \frac{\langle \psi_i | H | \psi_i \rangle + 2\langle \delta_i | \delta_i \rangle \lambda_i + \langle \delta_i | H | \delta_i \rangle \lambda_i^2}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle + 2\langle \delta_i | \delta_i \rangle \lambda_i + \lambda_i^2} \quad (7)$$

在(7)式的推导中, 我们使用了(3)式和(5)式.

可以证明, 当 E_{i+1} 取极值时 λ_i 和 E_{i+1} 的值为

$$\lambda_i = \frac{2\langle \psi_i | \psi_i \rangle \langle \delta_i | \delta_i \rangle}{[\langle \delta_i | \delta_i \rangle \langle \psi_i | H | \psi_i \rangle - \langle \psi_i | \psi_i \rangle \langle \delta_i | H | \delta_i \rangle] \pm \sqrt{X}} \quad (8)$$

其中 $\sqrt{X} = \sqrt{4\langle \psi_i | \psi_i \rangle \langle \delta_i | \delta_i \rangle^3 + [\langle \delta_i | \delta_i \rangle \langle \psi_i | H | \psi_i \rangle - \langle \psi_i | \psi_i \rangle \langle \delta_i | H | \delta_i \rangle]^2}$

$$E_{i+1} = \frac{\langle \delta_i | H | \delta_i \rangle}{\langle \delta_i | \delta_i \rangle} + \frac{1}{\lambda_i} \quad (9)$$

结合(8)式和(9)式,我们可以得到,当 E_{i+1} 取极小值时, E_{i+1} 和 λ_i 的值分别为:

$$\lambda_i = \frac{2}{(E_i - W_i) - \sqrt{4\Delta_i + (E_i - W_i)^2}} < 0 \quad (10)$$

$$E_{i+1} = W_i + \frac{1}{\lambda_i} \quad (11)$$

在(10)式和(11)中,我们已经令:

$$\Delta_i = \frac{\langle \delta_i | \delta_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle} \quad (12)$$

$$W_{i1} = \frac{\langle \delta_i | H | \delta_i \rangle}{\langle \delta_i | \delta_i \rangle} \quad (13)$$

下面我们考虑“新”、“旧”试探函数 ψ_{i+1} 和 ψ_i 所对应的能量期望值的差值 ΔE_i :

$$\Delta E_i = E_{j+1} - E_j = W_i + \frac{1}{\lambda_i} - E_i = \Delta_i \lambda_i \leq 0 \quad (14)$$

应该指出在(14)式中,仅有 $\Delta_i = 0$ 时, ΔE_i 才会等于 0; 而 $\Delta_i = 0$ 就意味着 $\psi_i = \Psi$. 这就是说,除非试探函数 ψ_i 本身就是体系的真实波函数,否则新的试探函数 ψ_{i+1} 的能量期望值一定低于原来的试探函数 ψ_i 的能量期待值^[7],也就是说 ψ_{i+1} 一定比 ψ_i 好.

如果我们从一个初始的试探函数 ψ_1 开始,按照由(2)式到(13)式的整个步骤,对体系反复地处理 n 次,将得到一个 $n+1$ 级的试探函数 ψ_{n+1} 及其能量期望值 E_{n+1} :

$$\psi_{n+1} = \psi_1 + \sum_{i=1}^n \lambda_i \delta_i \quad (15)$$

$$E_{n+1} = E_1 + \sum_{i=1}^n \lambda_i \Delta_i \quad (16)$$

(15)式就是迭进式试探函数的具体表达式,(16)式是该试探函数相对应的能量期望值.由(16)式可知,这种试探函数的能量期望值原则上能无穷逼近体系真实的能量值.

2 迭进式试探函数及其能量期望值的计算

(15)式和(16)式为迭进式试探函数 ψ_{n+1} 及其能量期望值 E_{n+1} 的表达式,然而这两个式子不便于直接运算,下文我们将它们变换为能方便运算的表达式.由(6)式和(2)式,可以得到:

$$\psi_{n+1} = \left(\prod_{i=1}^n \lambda_i \right) \left\{ \prod_{i=1}^n \left[H + \left(\frac{1}{\lambda_i} - E_i \right) \right] \right\} \psi_1 \quad (17)$$

考虑到(17)式中每个中括号项 $[H + (1/\lambda_i - E_i)]$ 中的 H 和 $(1/\lambda_i - E_i)$ 之间都是可交换的算符,利用数学归纳法,可以证明:

$$\begin{aligned} \psi_{n+1} = & \left(\prod_{i=1}^n \lambda_i \right) \left\{ H^n + \left[\sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{\lambda_i} - E_i \right) \right] H^{n-1} + \left[\sum_i \sum_{j>j} \left(\frac{1}{\lambda_i} - E_i \right) \left(\frac{1}{\lambda_j} - E_j \right) \right] H^{n-2} \right. \\ & \left. + \left[\sum_{i>j} \sum_{j>k} \sum \left(\frac{1}{\lambda_j} - E_j \right) \left(\frac{1}{\lambda_k} - E_k \right) \left(\frac{1}{\lambda_i} - E_i \right) \right] H^{n-3} + \dots + \prod_{i=1}^n \left(\frac{1}{\lambda_i} - E_i \right) \right\} \psi_1 \end{aligned} \quad (18)$$

为了叙述的方便,下面我们先定义“组合积”的概念.所谓“组合积”就是从 n 个元素 a_1, a_2, \dots, a_n 中任意取出 K 个元素,作成乘积形式 $a_i a_j \dots a_k$ (共 K 个元素相乘),然后将所有这些可能的乘积项相加所得到的和,用符号 $C_K^n(a)$ 表示.容易得到:

$$C_n^k(a) = \sum_{i>} \sum_{j>} \cdots \sum_{l>} (a_i a_j \cdots a_l) \quad (19)$$

使用了以上定义的“组合积”形式,我们可以将(18)式简化为

$$\begin{aligned} \psi_{n+1} &= \left(\prod_{i=1}^n \lambda_i \right) \left\{ C_n^0 \left(\frac{1}{\lambda} - E \right) H^{n-0} + C_n^1 \left(\frac{1}{\lambda} - E \right) H^{n-1} + \cdots + C_n^n \left(\frac{1}{\lambda} - E \right) H^{n-n} \right\} \psi_1 \\ &= \left(\prod_{i=1}^n \lambda_i \right) \left\{ \sum_{k=0}^n C_n^k \left(\frac{1}{\lambda} - E \right) H^{n-k} \right\} \psi_1 \end{aligned} \quad (20)$$

在(20)式的推导中,我们已经令 $C_n^0(1/\lambda - E) = 1, H^{n-n} = 1$.

为了能量期望值 E_{n+1} 表述的方便,作映射:

$$\left. \begin{aligned} \Omega_{2i+1} &= \frac{1}{\lambda_i} - E_i \\ \Omega_{2i} &= \frac{1}{\lambda_i} - E_i \end{aligned} \right\} i = 1, 2, \cdots, n \quad (21)$$

另外还作记号:

$$\overline{H}_i^k = \frac{\langle \psi_i | H^k | \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}, \quad i = 1, 2, \cdots, n \quad (22)$$

按照(17)式至(20)式相同的原理,我们可以得到:

$$E_{n+1} = \frac{\sum_{k=0}^{2n} C_{2n}^k(\Omega) \overline{H}_1^{2n+1-k}}{\sum_{k=0}^{2n} C_{2n}^k(\Omega) \overline{H}_1^{2n-k}} \quad (23)$$

要由(20)式和(23)式求出 ψ_{n+1} 和 E_{n+1} , 还需要计算出 λ_i , 也就是要求出 Δ_i 和 W_i (见(10)式). 根据 Δ_i 和 W_i 的定义, 我们有:

$$\Delta_i = \frac{\langle \delta_i | \delta_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle} = \overline{H}_i^2 - (E_i)^2 \quad (24)$$

$$W_i = \frac{\langle \delta_i | H | \delta_i \rangle}{\langle \delta_i | \delta_i \rangle} = \frac{\langle \delta_i | H | \delta_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle} \bigg/ \frac{\langle \delta_i | \delta_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle} = \frac{\overline{H}_i^3 - 2E_i \overline{H}_i^2 + (E_i)^3}{\overline{H}_i^2 - (E_i)^2} \quad (25)$$

模仿(23)式的推导,我们可以得到:

$$\overline{H}_i^2 = \frac{\sum_{k=0}^{2(i-1)} C_{2(i-1)}^k(\Omega) \overline{H}_1^{2i-k}}{\sum_{k=0}^{2(i-1)} C_{2(i-1)}^k(\Omega) \overline{H}_1^{(i-1)k}} \quad (26)$$

$$\overline{H}_i^3 = \frac{\sum_{k=0}^{2(i-1)} C_{2(i-1)}^k(\Omega) \overline{H}_1^{i+1-k}}{\sum_{k=0}^{2(i-1)} C_{2(i-1)}^k(\Omega) \overline{H}_1^{(i-1)k}} \quad (27)$$

在以上(24)~(27)式中, $i = 1, 2, 3 \cdots n$; 由上文可以知道,要计算出 E_{n+1} 和 ψ_{n+1} 只需要计算出 $\overline{H}_i^k (i = 1, 2, \cdots, 2n+1)$ 即可.

3 计算结果及讨论

为了和以前的数据进行对照,我们仍然以 H_2 、 LiH 、 Li_2 和 H_2O 分子的基态作为算例,用剩余函数法计算了它们的基态能. 计算中取 $\text{HF} \cdot \text{J}$ 型的函数作为迭进式试探函数的 ψ_1 :

$$\psi_1 = D \uparrow D \downarrow \exp\left(\sum_{i < j} \frac{a_{ij} r_{ij}}{1 + br_{ij}}\right) \quad (28)$$

这里 $D \uparrow$ ($D \downarrow$) 为自旋向上(向下)的行列式,其分子轨道由最小基的 STO 组成; r_{ij} 为电子之间的距离; $a_{ij} = 1/4$ (i, j 自旋相同)或 $1/2$ (i, j 自旋不同); $b = 1$. 我们用 VMC 方法计算出 \overline{H}_1 ($i = 1, 2, \dots, 9$), 即可求出五级迭进式波函数及其对应的能量期望值.

按照 VMC 方法, 我们有

$$\overline{H}_1 = \sum_{c=1}^m (E_c^{(1)})_c \quad (29)$$

$$\overline{H}_2 = \sum_{c=1}^m [(E_c^{(1)})^2]_c \quad (30)$$

.....

$$\overline{H}_5 = \sum_{c=1}^m [(E_c^{(5)})(E_c^{(4)})]_c \quad (31)$$

这里 m 为按照 ψ_1^2 取样的电子的构型数, 在我们的计算中 $m = 10^9 \sim 2 \times 10^9$; $E_i^{(i)}$ 称为 i 级局部能:

$$(E_i^{(i)}) = \psi_1^{-1} H^i \psi_1 \quad (32)$$

我们曾经给出过 $E_1^{(1)}$ 的计算公式^[6], 由如下迭推公式可求出各级局部能:

$$E_i^{(i+1)} = E_i^{(1)} E_i^{(i)} - \frac{1}{2} \nabla_N^2 E_i^{(i)} - \nabla_N \ln \psi_1 \cdot \nabla_N E_i^{(i)} \quad (33)$$

这里 ∇^2 为体系的 Laplace 算符, ∇ 为梯度算符, N 为体系的电子数.

用剩余函数法计算得到的 H_2 、 LiH 、 Li_2 和 H_2O 四个分子基态能五级计算值 E_1 、 E_2 、 E_3 、 E_4 、 E_5 列于表 1. 为了便于比较, 同表中还列出了这四个分子基态的 Hartree-Fock(H-F)方法的

表 1 不同方法计算得到的 H_2 、 LiH 、 Li_2 和 H_2O 四个分子基态能的数据比较
Table 1 Ground state energies of H_2 , LiH , Li_2 and H_2O calculated from several methods

	H_2	LiH	Li_2	H_2O
H-F limit	-1.1336	-7.987	-14.872	-76.0675
CI	-1.1737	-8.0647	-14.903	-76.3683
Exact	-1.17447	-8.0690	-14.9967	-76.4376
E_1	-1.1401(1)	-7.9013(2)	-14.8438(3)	-75.675(1)
E_2	-1.1615(1)	-8.0212(2)	-14.9043(3)	-76.196(2)
E_3	-1.1735(1)	-8.0455(3)	-14.9305(5)	-76.253(4)
E_4	-1.1740(1)	-8.0642(3)	-14.9544(6)	-76.399(4)
E_5	-1.1742(2)	-8.0678(3)	-14.9898(8)	-76.405(6)

极限值、最好的组态相互作用(CI)方法的计算值、“Exact”数值,这些数据以及这四个分子的几何构型数据取自参考文献[2, 8]。由表1中的数据可以看出,剩余函数法的收敛速度是非常快的。对这四个分子的基态而言,一级能量值 E_1 相当于 H-F 方法极限值的精度,三级能量值 E_3 已相当于 CI 方法的精度,四级能量值 E_4 均比最好的 CI 计算值更好,而五级能量值 E_5 则得到了相关能为 90% ~ 99% 的非常好的效果(其中相关能百分率分别为 H₂ 99.34%、LiH 98.54%、Li₂ 94.54%、H₂O 91.19%);这超过了我们以前用 VMC 方法^[6]对这四个分子的基态能的处理结果(其中相关能百分率分别为 H₂ 98.9%、LiH 85.6%、Li₂ 87.4%、H₂O 80.9%);也超过了前人用 DMC 方法对这四个分子的基态能的处理结果(其中相关能百分率分别为 H₂ 98.9%、LiH 96.5%、Li₂ 94.6%、H₂O 83.7%)[2]。

在 VMC 方法中使用迭进式函数,其取样过程与一般 VMC 方法相同;所不同的是在取样过程中必须计算 i 级局部能,而不是只计算 1 级局部能;每多计算一级局部能,计算量仅增加 15% 左右。将迭进式函数引入到 DMC 方法中,能将相关能百分率提高到 95% ~ 99%;不过此时 λ_i 的值以及 E_{i+1} 的值的确定不宜再使用变分原理,而是使用 Schrödinger 方程剩余量,因为 DMC 方法要求试探函数的节面分布尽可能地接近真实波函数的节面分布。这方面的工作正在整理中。总之,剩余函数法将 VMC 的精度提高到了新水平,能将 DMC 的精度提高到更高的水平。在精度、收敛速度和简便性方面剩余函数法将为 QMC 方法开辟一条新途径。

参 考 文 献

- 1 Moskowitz J W, Kalos M H. *J. Quantum Chem.*, **1981**, *20*: 1107
- 2 Reynolds P J, Ceperley D M, Alder B J, Lester B J. *J. Chem. Phys.*, **1982**, *77*: 5593
- 3 Ceperley D M, Alder B J. *J. Chem. Phys.*, **1984**, *81*: 5833
- 4 Umrigar C J, Wilson K G, Wilkins J W. *Phys. Rev. Lett.*, **1988**, *60*: 1719
- 5 Huang S, Sun Z, William A *et al.* *J. Chem. Phys.*, **1990**, *92*: 597
- 6 Huang Hongxin, Cao Zexing. *J. Chem. Phys.*, **1996**, *104*: 200
- 7 Cioslowski J. *J. Chem. Phys.*, **1987**, *86*: 2105
- 8 Huang Hongxin, Liu Shubin. *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **1994**, *312*: 281

Surplus Function Quantum Monte Carlo Approach*

Huang Hongxin Lian Shixun Cao Zexing¹

(Department of Chemistry, Hunan Normal University, Changsha 410081,

¹Department of Chemistry, Xiamen University, Xiamen 361005)

Abstract A concept of surplus function for Schrödinger equation is put forward. A novel quantum Monte Carlo approach entitled surplus function method is suggested with use of a novel trial function of significant physical meaning which is based on the proposed surplus function. The trial function is of an iteration-type and suffers no time-consuming parameter optimum in a quantum Monte Carlo process. It is theoretically proved that the energy expectation value obtained from the

proposed trial function converges to the exact energy value of the system investigated. In addition, computation formulas and procedures for energy expectation value are presented. Calculations for several molecules indicate that the energy expectation value obtained from the trial function does converge to the exact energy value of the investigated system and the converging rate is very fast as generally only 4-5 iterations achieves over 90% correlation energy. To our knowledge, both the calculating precision and converging rate of the trial function proposed are the highest one in the quantum Monte Carlo approach at present time.

Keywords: Quantum Monte Carlo approach, Surplus function for Schrödinger equation, Energy expectation value

Received 1998-09-21, revised 1999-01-01. Correspondent: Huang Hongxin.
Research Foundation of Hunan Provincial Educational Committee

* The Project Supported by NSFC and Re-

学 科 代 码 表

- | | | |
|--------------------|----------------------|-------------------|
| B0301 结构化学 | B0300405 结晶过程动力学 | B030703 电子转移光化学 |
| B030101 体相静态结构 | B0305 胶体与界面化学 | B030704 光合作用 |
| B030102 表面结构 | B030501 表面活性剂 | B030705 大气光化学 |
| B030103 溶液结构 | B030502 分散体系 | B0308 热化学 |
| B030104 动态结构 | B030503 流体性能 | B030801 热力学参数 |
| B030105 谱学 | B030504 界面吸附现象 | B030802 相平衡 |
| B030106 结构化学方法和理论 | B030505 超细粉和颗粒 | B030803 电解质溶液化学 |
| B0302 量子化学 | B0306 电化学 | B030804 非电解质溶液化学 |
| B030201 基础量子化学 | B030601 电极过程动力学 | B030805 生物热化学 |
| B030202 应用量子化学 | B030602 腐蚀电化学 | B030806 量热学 |
| B0303 催化 | B030603 熔盐电化学 | B0309 高能化学 |
| B030301 多相催化 | B030604 光电化学 | B030901 辐射化学 |
| B030302 均相催化 | B030605 半导体电化学 | B030902 等离子体化学 |
| B030303 人工酶催化 | B030606 生物电化学 | B030903 激光化学 |
| B030304 光催化 | B030607 表面电化学 | B0310 计算化学 |
| B0304 化学动力学 | B030608 电化学技术 | B031001 化学信息的运筹 |
| B0300401 宏观反应动力学 | B030609 电催化 | B031002 计算模拟 |
| B0300402 分子动态学 | B0307 光化学 | B031003 计算控制 |
| B0300403 反应途径和过渡态 | B030701 激光闪光光解 | B031004 计算方法的最优化 |
| B0300404 快速反应动力学 | B030702 激发态化学 | B031100 材料 |