计算物理基础

张春粦 张纯祥 主编

广东高等教育出版社

责任编辑：李敏康
封面设计：春　平

ISBN 7-5361-0611-4/O·25
定价：6.60元

计算物理基础

张春粦　张纯祥　主编

广东高等教育出版社

计算物理基础

张春粦　张纯祥　主编

*

广东高等教育出版社出版发行
广 州 市 红 旗 印 刷 厂 印 刷

*

开本 850×1168毫米 1/32 22印张　字数550千字
1991年12月第1版　1991年12月第1次印刷
印数2100册
ISBN 7-5361-0611-4/O·25
出版社登记号：粤—(09)
定 价：6.60元

前　言

电子计算机的出现和广泛应用为物理学的发展提供了现代化的手段和条件，电子计算机不仅能迅速而准确地处理大量实验数据，及时地给出实验结果，还可以在一定条件下用于模拟一些物理过程，扩展物理实验的领域。电子计算机还可以使理论物理工作者从大量繁琐的计算中解脱出来，以便集中精力于探索物理机制的本质。电子计算机的问世与普及又促进了物理学一个新的分支——计算物理学的出现和成长。《计算物理基础》是以数值计算为基础，以计算机为工具解决物理问题的一门学科。它有助于学生掌握数值计算方法和提高使用计算机能力，有助于培养学生分析问题和解决问题的能力，这就是我们编写本书的指导思想。

本书基本内容已为暨南大学应用物理系和中山大学物理系高年级本科生讲授过多次，现在出版的这本书，是在教学实践的基础上，并结合我们在科研中的一些实际工作加以充实而成的。编写本书的思路是从基本物理问题出发，建立数学模型，选择数值计算方法，建立计算流程图，编写计算机程序，并结合实例讨论和分析计算结果。

本书主要内容包括：数值计算方法基础，如非线性方程求根，线性方程组的解法，函数插值，数值积分、常微分方程、偏微分方程的计算机解法等，矩阵特征值和特征向量的计算机解法，快速傅里叶变换，蒙特卡罗方法，计算机在物理模拟中的应用，实验数据处理等。书中所有计算机程序均按 FORTRAN 语言编

写，并分别在 IBM-PC/XT 或 DPS-8/49 计算机上运行通过。在每章的末尾附有相应的习题和参考文献。

本书由张春荞、张纯祥任主编，参加编写工作的还有：其中第一、九章由黄祖湛编写，第二、三、四、五章由张春荞编写（其中4.8节和5.7节由肖璋编写）。第六、八章由何锦昌编写，第七章由张光昭编写。第十章由张纯祥编写。最后由主编整理、修改后定稿。

本书在酝酿和编写过程中，得到暨南大学理工学院物理系、中山大学物理系、广东省高等教育局教学处等有关领导和专家的热情支持和帮助。在此，编者一并表示深切的谢意。

由于编写时间较短，加之编者水平有限，书中缺点和错误一定不少，恳请读者随时指正。

编　者

1988年6月

目　录

第一章　绪　　论

计算物理学是新近发展起来的物理学领域里的一门新学科。它是物理、数学和计算机相结合的产物。四十多年前，由于研制核武器的需要，使用了最简单的计算机并获得了成功，这促使新的电子计算机的出现和发展。而新的电子计算机的出现，特别是大型快速电子计算机的研制成功，又为物理学提供了现代化工具，解决了许多要进行大量复杂计算或者用传统的数学分析方法无法解决的物理问题，促进了计算物理学的形成。

四十多年来，计算物理学已经在物理学的一些领域，如热传导和扩散过程，可压缩与不可压缩流体力学，中子输运过程，电磁场等方面取得了重大的成就，而且在物理学的其它领域和大量的新兴学科与边缘学科，如统计物理，量子力学和量子化学，固体物理、核物理、基本粒子物理、地球物理、等离子体物理与受控聚变、天体物理、航空与航天技术、生物学与医学等也发挥了它的作用，成功地解决了许多重大的问题。计算物理学的方法甚至还被应用于气象预报、水利、海洋、地震、石油、化工等其他科学技术部门。

由于计算物理的成果日益增多，反映这些成果的杂志和书籍也相继出版。总之，计算物理学以它独有的特点在物理学中起过和继续起着重要的作用。由于计算物理学有着与理论物理学和实验物理学不同的特点和研究方法、物理学界有这样一种看法，认为当今的物理学有三个分支，即理论物理学、实验物理学和计算物理学，它们以各自的工作方式和方法，对物理学的发展作出贡

献。它们既互相联系，相辅相成，又保持相对的独立性。

§1.1 计算物理学的特征

计算物理学是物理、数学、计算机三者结合的新学科。因此，它的特征必然反映出这种结合。

物理学在它长期的发展过程中，发现了许多物理学的基本原理，总结了大量的物理规律，积累了不少探索物理现象的宝贵经验和方法。虽然传统物理学中的理论物理学和实验物理学的工作方法有很大差别，但是它们对计算物理学提供了有益的经验。物理学与数学是有着非常密切的关系的。物理问题的数学表示为它的定量求解提供了可能性。尽管许多物理问题的相应数学方程，还无法用数学分析的方法求得显式的解析解，因而给理论物理工作带来困难，但是数学的另一个分支——计算数学却提供了对通常物理问题中遇到的代数方程、微分方程(包括偏微分方程)、积分方程等形式的数学问题用数值计算解题的方法而几乎没有什么困难，使得物理问题的可解范围大大扩充。当然，随着问题的难度越来越大，复杂程度越来越高，数值计算的量也越来越大。如果没有高速、大容量和稳定的电子计算机，要完成庞大的数字计算工作，即使可能，也要相当长的时间。所以要完成大量的数字计算，高速、大容量和稳定的电子计算机是必不可少的。

对于计算物理学，只要问题局部的、瞬时的物理规律已知，或者已被作为假设，我们就可以利用计算机的存储功能和快速运算功能，通过局部的联系组合和瞬时过程的积累，扩展得到大范围的、长期的变化过程。如果我们注意到曲线可以用折线来逼近，非线性的问题也可以用大量局部瞬时的线性问题的组合来逼近，那么，我们就不会怀疑这种扩展的合理性。而传统方法难以

解决的非线性问题和其它问题，对计算物理学来讲，也就变得不困难了。例如，三体问题是至今无法求得显式解析解的问题。从局部瞬时的物理规律看来，它涉及的只是牛顿运动定律和万有引力定律，而这些定律都是已知的，方程组也可以列出。这样，我们就可以用计算物理学的方法求解有关问题，如登月飞船的轨道和日、地、月相互位置等。

现代大型计算机的出现，提供了进行“纸上实验”或“计算机试验”的可能性。实验物理学是用实验设备和环境的温度、湿度等条件来模拟真实的物理过程。要获得不同物理条件下的物理现象，需要改变环境的物理条件，重新调试仪器或者对仪器作必要的改装。但在计算物理中，只需将不同的物理条件，以数字的形式输入计算机，同时对计算程序作适当的修改，即可得到结果。这是只需要对纸上的程序作适当修改，就可以进行的实验。它唯一的设备，是计算机及其配套附件。从计算物理学的角度看，这种设备对任何实验都适用，尤其是对于那些需要昂贵设备的实验、有危险性的实验或者是它的物理条件在真实环境中难以实现的实验，如高能加速器的设计实验、等离子体实验、放射性物质中链式反应的临界质量实验、研究星球演化的实验等等，计算物理学的作用显得更重要，因为它能对这些实验进行数值模拟，从某种意义上讲，它能进行这些实验，并给出有价值的结果。孤立子现象是在计算机上进行“实验”取得结果的一个例子。60年代中，Zabusky 和 Krushal 对 K-dv 方程求数值解，发现有一类非线性波在直线上传播时形状不变，互相穿透（碰撞）后仍保持其波形，又因它有类似粒子的行为，故称孤波或孤立子。对孤波的研究表明，非线性波也可以具有某些线性波的性质。凡具有孤立子性质的非线性波都是非线性色散波（即不同频率的波具有不同的波速）。在非线性波动方程内加以色散项，非线性波就有了类似于线性波的性质。而且相当多的非线性波动方

程求解，都可化为某一线性方程的本征值求解问题。K--dv 方程的孤立子解对应于薛定谔（Shrödinger）算符的束缚态，它实质上与描述微观粒子运动的薛定谔方程的本征值求解有关。非线性波理论的研究成果，被应用于基础理论和工程技术的许多方面。

计算物理学还能不借助于任何理论指导，而在纯粹经验的基础上归纳出物理定律来。物理学史上有不少物理定律是从实验数据归纳出来的。如巴尔末（Balmer）在分析了氢光谱四条已知谱线波长的数值关系后，得到氢光谱的巴尔末公式，就是其中的一个例子。兰利（P.W.Langly）已经构造了一个叫做 Bacon 的程序，能够成功地重复一些重要的科学定律的发现。它象巴尔末的工作那样，只是进行实验数据的归纳。根据给定的数据，Bacon 能够重新发现关于行星轨道周期和它们到太阳距离的开普勒(Kepler)第三定律、欧姆（ohm）定律、气体定律、动量守恒定律、斯乃尔（Snell）折射定律、道尔顿（Dalton）的定比和倍比定律、盖·吕萨克（Gay. Lussac）关于气体的定比定律、阿佛伽德罗（Avogadro）定律、布拉克（Bloch）热定律以及其它定律。这说明 Bacon 程序的能力和方法是成功的。如果能够按照Bacon的工作原理，建造一台实用的归纳机，或至少可以由 Bacon 根据实验数据归纳出事物的规律性和模式，这对于发现客观规律，认识客观规律来说，意义将是深远的。

§1.2 计算物理学研究问题的方法和步骤

计算物理学解决物理问题是从分析问题、建立数学模型入手。在建立了数学模型以后，需要选择适当的算法，写出算法流程图。在此基础上编写出程序和上机计算、最后对结果进行分析。下面我们将对这一个过程的各个环节逐点加以介绍：

一、分析问题、建立数学模型

首先，必须弄清情况，分析所要讨论的现象遵循的定理、规律。然后，根据这些定理、规律、建立方程或方程组，并且考虑问题给出的物理条件。这样建立起来的方程组和初值条件或边值条件就是问题的数学模型。当然，为了能够用计算机计算，最后的数学表示式应该是可以进行数值计算的式子。建立数学模型是计算物理解决物理问题的关键。如果数学模型能够正确反映问题的实质，问题就有可能得到正确的结果。关于建立数学模型的问题，我们将在第九章中较详细地讨论。

二、选择合适的算法、编制流程框图

算法是一组有明确步骤的解题指令，这些步骤必须是有限的和明确的。算法是数学模型求解的有效手段。一定的数学模型可能有若干种求解方法，我们应该从中选择能够满足精度要求的简练的算法。确定了算法，就可以编制流程框图。

下面我们讨论两个例子，以便了解选择合适算法的重要。

〔例1.1〕 计算多项式

$$P(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_nx^n \tag{1.1}$$

的值。

解：这里有三种计算方法，我们注意比较它们各自需要进行的乘法运算和加法运算的次数。

第一种方法是直接运算

在这种运算中，a_1x要进行一次乘法运算。a_2x^2要进行两次乘法运算。a_nx^n要进行 n 次乘法运算。可见，(1.1)式共需进行 n 次加法运算和$\frac{1}{2}n\cdot(n+1)$次乘法运算。

第二种方法是构造一个迭代式子进行运算

令r_k表示x的k次幂，S_k表示(1.1)式右侧前$k+1$项的部分和，即

$$\begin{cases} r_k = x^k \\ S_k = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots a_{k-1}x^{k-1} + a_kx^k \end{cases} \tag{1.2}$$

因为$x^k = x^{k-1}\cdot x$，$S_k = S_{k-1} + a_kr_k$

所以(1.2)式又可写为

$$\begin{cases} r_k = xr_{k-1} \\ S_k = S_{k-1} + a_kr_k \end{cases} \tag{1.3}$$

如果取$r_0 = 1$，$S_0 = a_0$作为初值，代入(1.3)式进行反复计算，即可得S_k。由于递推公式(1.3)的每一步要进行两次乘法，一次加法的运算，所以这种算法一共要进行$2n$次乘法和n次加法的运算。

第三种方法是将(1.1)式改写为

$$\begin{aligned} P(x) &= a_nx^n + a_{n-1}x^{n-1} + \cdots + a_1x + a_0 \\ &= (a_nx^{n-1} + a_{n-1}x^{n-2} + \cdots + a_2x + a_1)x + a_0 \\ &= [(a_nx^{n-2} + a_{n-1}x^{n-3} + \cdots + a_2)x + a_1]x + a_0 \\ &= \cdots[(a_nx + a_{n-1})x + \cdots + a_1]x + a_0 \end{aligned} \tag{1.4}$$

设u_k为从里面数起第k层的值，即

$$\begin{aligned} u_k &= \cdots[(a_nx + a_{n-1})x + \cdots + a_{n-k+1}]x + a_{n-k} \\ &= u_{k-1}x + a_{n-k} \end{aligned} \tag{1.5}$$

$k = 1, 2, \cdots, n.$

因为每一层要进行一次乘法运算和一次加法运算，所以第三种算法共需进行n次乘法和n次加法。

三种算法比较，显然第三种算法计算次数最少。这个例子说明，合理的算法可以使计算工作量减少到最低限度，因而带来的误差也可以相对地变小。

〔例1.2〕 计算定积分

$$A_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\, dx \tag{1.6}$$

解：由分部积分可得

$$A_n = 1 - n\int_0^1 x^{n-1} e^{x-1}\, dx$$
$$= 1 - n A_{n-1} \tag{1.7}$$

其中 $A_{n-1} = \int_0^1 x^{n-1} e^{x-1}\, dx$

由计算可得

$$A_1 = \frac{1}{e} = 0.367879 \pm 10^{-7} \tag{1.8}$$

这表明 A_1 取值为0.367879时，其误差的数量级为10^{-7}。其它A_n值亦可通过计算得到为

$$\begin{aligned}
A_2 &= 0.264242\\
A_3 &= 0.207274\\
A_4 &= 0.170904\\
A_5 &= 0.145480\\
A_6 &= 0.127120\\
A_7 &= 0.110160\\
A_8 &= 0.118720 \pm 0.01779\\
A_9 &= -0.068480 \pm 0.1610
\end{aligned} \tag{1.9}$$

A_9 的误差是这样估算出来的：因为(1.7)式是一个循环公式，当 A_0已知，即可由(1.7)式算得 A_1、A_2、……等值。如果 A_0 有误差为 ε，则 A_n 的误差可由下面的计算估出：

$$\begin{aligned}
A_1 &= 1 - (A_0 \pm \varepsilon)\\
A_2 &= 1 - 2A_1 = 1 - 2[1 - (A_0 \pm \varepsilon)] = -1 + 2A_0 \pm 2\varepsilon\\
A_3 &= 1 - 3A_2 = 1 - 3(-1 + 2A_0 \pm 2\varepsilon) = 4 - 6A \pm 3 \times 2\varepsilon\\
A_4 &= 1 - 4A_3 = 1 - 4(4 - 6A_0 \pm 3 \times 2\varepsilon)
\end{aligned} \tag{1.10}$$