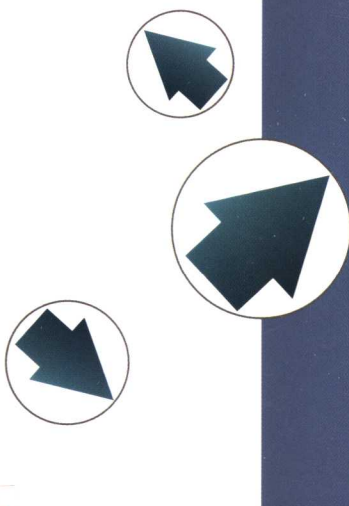
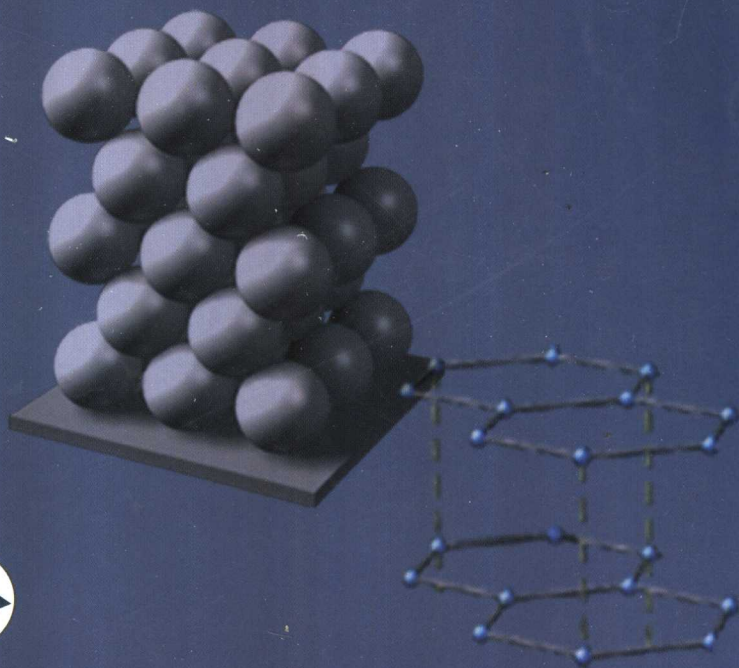
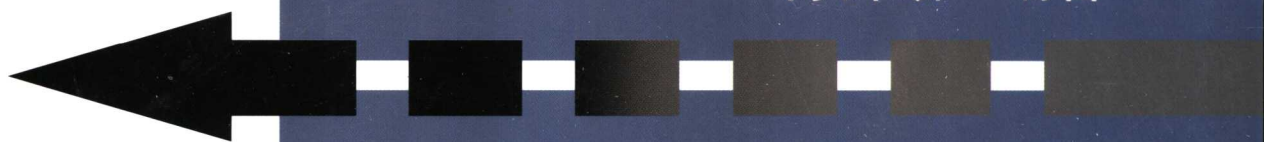


高等学校教材

计算材料科学

陈舜麟 编著



化学工业出版社
教材出版中心

高等学校教材

计算材料科学

陈舜麟 编著



化学工业出版社
教材出版中心

·北京·

(京)新登字 039 号

图书在版编目 (CIP) 数据

计算材料科学/陈舜麟编著. —北京:化学工业出版社,
2005.5

高等学校教材
ISBN 7-5025-6544-2

I. 计… II. 陈… III. 材料科学-计算-高等学校-
教材 IV. TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 046014 号

高等学校教材
计算材料科学
陈舜麟 编著
责任编辑:杨 菁
文字编辑:李 玥
责任校对:陈 静
封面设计:潘 峰

化学工业出版社 出版发行
教材出版中心
(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)
购书咨询:(010)64982530
(010)64918013
购书传真:(010)64982630
<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销
北京永鑫印刷有限责任公司印刷
三河市延风装订厂装订
开本 787mm×1092mm 1/16 印张 20 $\frac{3}{4}$ 字数 557 千字
2005 年 7 月第 1 版 2005 年 7 月北京第 1 次印刷
ISBN 7-5025-6544-2/G·1670
定 价:42.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者,本社发行部负责退换

前 言

计算物理学 (Computational Physics) 是一门边缘科学, 是物理学、数学与计算机科学三者相结合的产物, 它的兴起已有三十多年的历史。计算物理学是以计算机及计算机技术为工具和手段, 运用计算科学所提供的各种方法, 解决复杂物理问题的一门应用科学。它也是物理学的一个分支, 与理论物理、实验物理有密切联系, 但又保持着自己相对的独立性。目前, 计算物理学已成为对复杂体系的物理规律、物理性质进行研究的重要手段, 对物理学的发展起着极大的推动作用。

计算材料科学 (Computational Materials Science) 是计算物理学的一个分支, 它与理论物理、实验物理有什么区别和联系? 它在物理学研究中占据什么样的地位? 以及它对其他学科所能产生什么影响? 它的基本学科特征是什么? 它的原理和方法是什么? 这就是本书力图要给读者介绍的内容。

本书面向的读者主要是从事材料科学的研究生, 对材料科学专业的高年级大学生和其他学习者了解计算材料科学的理论和方法同样有参考价值。它的内容包括了从事计算材料科学工作者所需要的最低限度的数值计算方法和理论物理的基本概念。本书结合材料科学中的一些基本问题给出解决问题的具体方法, 并通过实际应用来解决材料物理学中有意义的和有代表性的问题来深化、扩展有关知识。它能够阐明一些广为应用的数值方法, 可以在微机上执行, 并使读者对材料物理有某种特殊的兴趣或具体的目标。

本教材是编者在十几年来给学生讲授“数值计算与程序设计”、“计算物理基础”和“计算材料科学”等课程所积累的知识和经验的基础上, 参考整理了国内外大量专业书籍文献的论述而写成的, 比较详细地讲述了对固体材料性能及微观缺陷动力学机制进行计算机模拟的分子动力学和蒙特卡罗两种方法的理论原理和实际运用等各方面的内容。书中在内容安排上尽量做到理论与具体方法并重和深入浅出的叙述, 将一些影响较大的重要文献的理论思想和具有里程碑意义的工作介绍给读者, 不但向读者介绍了国际上的研究情况, 对国内学者的一些研究成果也作了相当篇幅的介绍。其中还有一部分是编者本人的一些工作心得, 不揣固陋, 一并献给读者。书中为读者提供了相当数量的实验和理论计算数据、图表、可用于模拟计算的势函数模型; 为使此书具有较强的参考价值, 最后专门用一章的篇幅讲解编制程序的方法, 并在附录中提供了部分演示程序。

材料科学涉及范围甚广, 本书仅限于重点讲述固体材料 (重点是金属材料) 中微缺陷的分子动力学模拟计算和蒙特卡罗模拟计算的实用性方法和计算中必须掌握的系综方面的概念, 没有涉及气体和液体材料, 对高分子材料方面的问题只介绍了比较有名的势函数和解运动方程的原理; 对第一性原理计算方面的问题也只作了一些概念性的介绍, 基本上不涉及具体的计算方法, 如从头算法 (Ab initio) 等。由于实验和数值计算中不可避免地有误差存在, 因此, 误差的概念和处理方法的内容就安排在本书的前面。随后, 介绍最常用的与本书以后内容有关联的数值计算方法。也可将本书看作是一本应用数学物理方面的教材。为了较好地理解其内容, 读者应当对理论力学、普通量子力学、热力学和统计物理、高等数学及数学物理方法等大学课程的知识有所了解。

计算材料科学中需要的实际计算能力需要三方面的综合训练——物理学理论、数值分析

知识和计算机程序设计能力。而传统上这三种训练是在互无联系的课程中进行的，因此使这三种知识能够有机地结合起来的训练，对当前和今后的学习者都是十分必要的，这是科学进步和时代发展的要求。

书中有相当的内容与程序设计有关，因此，要求读者熟悉至少一种计算机高级语言的程序设计方法，至少修过一个学期的任何一种标准的高级语言（BASIC, FORTRAN, PASCAL, C 等）课程，而且读者完全有必要掌握一种专门为科技工作者设计的科学计算语言，如 Matlab、Mathematica 和 MathCAD 等。

计算材料科学方面的文献浩如烟海，本书是在编者尽其所能搜集到的资料的条件下整理编写成的，这也是编者十多年教学和科研实践中所积累的一些知识和经验的总结。书中许多地方采用了原文献作者的文字表述、公式、数据和图表，在此对被采用的所有文献的作者表示感谢。由于本人学识水平有限，再加上编写时间仓促，疏漏在所难免，敬请读者批评斧正。

本书编写过程中，得到了兰州大学物理科学与技术学院李建功教授、陈熙萌教授、徐金城教授和李波教授的支持，兰州交通大学数理与软件工程学院赵文杰教授对此书的写作自始至终给予了许多热情的建议和帮助，其他同志也给予了很多帮助，在此一并向他们表示衷心的感谢。

陈舜麟

2005 年 4 月于兰州大学

内 容 提 要

计算材料科学是计算物理学的一个分支，涉及范围甚广。本书则重点介绍固体材料（主要是金属材料）中微缺陷的分子动力学模拟计算和蒙特卡洛模拟计算的实用性方法和系统方面的概念。分别从误差理论、数值计算概要、分子动力学运动方程解法、计算机模拟的粒子系统、势函数理论与模型、金属中的嵌入势模型、Monte Carlo 方法及应用、计算程序设计等方面展开论述。并配有大量程序、公式、图、表及附录。

可供从事材料科学的研究生及该专业高年级大学生和其他学习者参考。

目 录

第 1 章 计算物理学和计算材料科学	1
1.0 绪论	1
1.1 计算物理学的起源与发展	1
1.2 计算物理学的特点和方法	2
1.3 计算物理学的进展	5
1.4 计算材料科学	6
1.4.1 分子动力学的发展历程	7
1.4.2 蒙特卡洛方法及其发展历程	8
参考文献	9
第 2 章 误差理论	10
2.1 误差的基本概念	10
2.1.1 准确值, 误差限, 真值, 期望值和平均值	10
2.1.2 误差的具体类型	11
2.1.3 有效数与可靠数	11
2.2 随机误差	12
2.2.1 误差分布函数	12
2.2.2 随机误差的特点	13
2.2.3 随机误差的估算	13
2.3 误差传递公式	15
2.3.1 单变量误差的传递	16
2.3.2 多变量误差的传递	16
2.3.3 标准误差的传递公式	16
2.3.4 关于测量数列算术平均值的标准误差	17
2.4 计算机中的数值运算	18
2.4.1 整数	18
2.4.2 浮点数表示及误差	18
2.4.3 计算函数值的坏条件判别法	18
2.4.4 保证计算数值稳定的原则	19
2.5 矩阵运算中的误差问题	20
2.5.1 矩阵的条件数	20
2.5.2 线性方程组解的相对误差	20

参考文献	22
------------	----

第3章 数值计算概要	23
-------------------------	-----------

3.1 范数与谱半径	23
3.1.1 范数的定义	23
3.1.2 矩阵的谱半径	24
3.2 线性方程组的解法	24
3.2.1 矩阵求逆法	24
3.2.2 选主元的三角分解法	25
3.3 矩阵的特征值问题	27
3.3.1 矩阵折叠法求本征值	28
3.3.2 实对称矩阵的雅克比对角化变换法	30
3.3.3 特征值的敏感性	33
3.4 矩阵的镜象变换法	34
3.4.1 镜象变换法	34
3.4.2 实对称三对角矩阵的本征值	36
3.5 曲线插值法	37
3.5.1 抛物型插值法的拉格朗日公式	37
3.5.2 抛物型插值法的牛顿公式	38
3.6 最佳一致逼近	39
3.6.1 切比雪夫多项式	39
3.6.2 最佳平方逼近	39
3.6.3 最小二乘法	42
3.6.4 正交多项式逼近	42
3.7 差分 and 差商运算	47
3.7.1 差分算子	47
3.7.2 差商公式	48
3.8 积分运算	49
3.8.1 多项式逼近的数值积分公式	49
3.8.2 高斯数值积分法	51
3.9 迭代运算	54
3.9.1 直接迭代法	54
3.9.2 牛顿迭代法	54
3.9.3 弦截法	55
3.10 微分方程的数值解法	56
3.10.1 Numerov 法	56
3.10.2 龙格-库塔法	56
3.10.3 高阶微分方程和一阶微分方程组的龙格-库塔法求解	57
参考文献	58

第 4 章 分子动力学运动方程解法	59
4.1 理论力学原理	60
4.1.1 最小作用量原理	60
4.1.2 拉格朗日 (Lagrange) 方程	61
4.1.3 哈密顿 (Hamilton) 方程	63
4.1.4 哈密顿 (Hamilton) 量与半经典量子化计算	64
4.2 粒子与粒子系综	67
4.2.1 相互作用的多粒子系综	67
4.2.2 粒子互作用模型的平衡统计性质——热力学性质的时间平均	68
4.3 粒子系统运动方程的数值解法	69
4.3.1 边界条件	69
4.3.2 Verlet 算法	70
4.3.3 Gear 算法	71
4.4 Gear 预测-矫正方法	71
4.4.1 表象表示法	71
4.4.2 表象变换	72
4.4.3 预测-矫正法 (predictor-corrector)	73
4.5 几种算法的比较	76
4.5.1 Verlet 算法	76
4.5.2 跳蛙式算法	77
4.5.3 Beeman 算法	77
4.5.4 比较几种算法的精度	78
4.6 复合函数算法	79
4.6.1 第一型算法	80
4.6.2 第二型算法	80
4.7 高阶综合矫正复合函数算法	82
4.7.1 第一型推广算法	82
4.7.2 第二型推广算法	84
4.7.3 第三型推广算法	85
4.7.4 第四型推广算法	86
4.7.5 第五型推广算法	89
4.7.6 更高阶预测公式	92
参考文献	93
第 5 章 计算机模拟的粒子系综	94
5.1 微正则系综 (E, V, N)	95
5.1.1 计算热力学量	95
5.1.2 运动方程组的建立	97
5.1.3 数值求解的具体实施	98
5.2 正则系综 (N, V, T)	100

5.2.1	正则系综的原理	100
5.2.2	正则系综分子动力学算法	102
5.2.3	正则系综与微正则系综的区别	104
5.3	等温等压系综 (N, P, T)	105
5.3.1	等温扩展法	105
5.3.2	等压扩展法	106
5.4	体积可变的等焓等压 (H, P, N) 系综	107
5.4.1	晶胞结构矩阵与矢量的建立	108
5.4.2	仅有均匀恒压的情况	108
5.4.3	系统受到外部胁强时的一般情况	109
5.5	新恒压分子动力学模型	110
5.5.1	分子系统的运动方程	110
5.5.2	分子系统的守恒定律	112
5.5.3	对称的晶胞矢量 \mathbf{h} 约束下的运动方程	113
5.5.4	受约束动力学晶胞的运动方程	115
5.6	自由能的计算和其他系综	117
5.6.1	巨正则系综	118
5.6.2	Gibbs 系综	119
5.6.3	半巨系综	119
5.7	非平衡系综动力学	120
5.7.1	输运过程	120
5.7.2	非平衡分子动力学模拟 (NEMD)	120
5.7.3	非平衡分子动力学在线性谐振子上的应用	122
5.7.4	自扩散算法	123
	参考文献	124

第 6 章	势函数理论与模型	125
6.1	势函数发展简介	125
6.1.1	原子间相互作用势的发展概况	126
6.1.2	构成分子的原子间势	127
6.1.3	固体中的对势模型	127
6.1.4	多体势	129
6.2	半经验势	129
6.2.1	长程势	129
6.2.2	短程势	130
6.3	经验势	131
6.4	赝势模型	132
6.4.1	等效势概念	133
6.4.2	电子密度和赝密度	134
6.4.3	离子赝势	134

6.5 共价和离子晶体中的原子间相互作用势	135
6.5.1 二体加三体势(团簇势)	136
6.5.2 Abell 势模型	137
6.5.3 Tersoff 势模型	138
6.5.4 KD 势模型	139
6.5.5 分子间势模型	140
6.5.6 电子气势模型	141
6.6 紧束缚势模型和密度泛函理论	143
6.6.1 密度泛函理论	143
6.6.2 态密度和带能	147
6.6.3 紧束缚近似	148
6.6.4 能矩和二次矩	148
6.6.5 过渡金属和合金的紧束缚势	150
6.7 分子动力学和密度泛函理论的统一方法	151
6.7.1 第一性原理分子动力学方法	152
6.7.2 多原子体系动力学——C-P 运算方法	154
6.8 固体、分子经验电子理论及相关势函数	162
6.8.1 固体、分子经验电子理论	162
6.8.2 过渡金属和合金的结合能公式	164
6.8.3 碱金属和碱土金属的 Morse 势函数模型	167
6.8.4 固体中 Lennard-Jones 型势函数的谢氏模型	168
6.8.5 谢氏势函数模型的改进型	172
6.8.6 基于“经验电子理论”的势函数模型的特点及存在的困难	174
参考文献	174

第 7 章 金属中的嵌入势模型

7.1 嵌入原子法	177
7.1.1 嵌入原子法基本原理	178
7.1.2 晶体结合能公式	178
7.1.3 由结合能导出的力学性质公式	178
7.1.4 排斥势函数和电子密度函数	179
7.1.5 有效电荷及嵌入能函数	180
7.1.6 作用在每个原子上的合力	181
7.1.7 表面能计算公式	181
7.1.8 采用 Rose 普适方程的嵌入势函数拟合法	181
7.1.9 嵌入原子法的理论推导简介	182
7.1.10 金属合金中的原子间相互作用势	183
7.2 分析型 EAM 模型	183
7.2.1 Johnson 的分析型 EAM 模型	184
7.2.2 EAM 模型的改进	185

7.2.3	改进的普适分析型 EAM 模型	185
7.2.4	分析型 EAM 模型的应用与展望	187
7.3	Finnis-Sinclair 经验势函数	188
7.3.1	Finnis-Sinclair (F-S) 模型	188
7.3.2	Finnis-Sinclair 模型的改进型	189
7.3.3	Finnis-Sinclair 模型的样条函数结构	190
7.3.4	弹性形变和间隙原子能	190
7.4	HCP 结构金属的嵌入势模型	191
7.4.1	金属 Zr 的分析型 EAM 模型	192
7.4.2	HCP 结构金属的分析型 F-S 模型	194
7.4.3	金属 Zr 的分析型 F-S 模型	196
7.4.4	晶格振动问题	196
7.4.5	HCP 结构金属的非球对称模型	197
7.4.6	考虑到内弹性常数的 HCP 结构金属的分析型模型	200
7.5	合金材料中的势函数	207
7.5.1	Johnson 对势函数的解析形式	208
7.5.2	Ackland 的 F-S 合金势模型	210
7.5.3	F-S 合金势模型用于金属间化合物的研究实例	212
7.5.4	金属间化合物的 EAM 势模型	217
7.6	Rose 普适理论	219
7.6.1	能量和原子间距之间的普适关系	219
7.6.2	普适关系函数	221
	参考文献	224

第 8 章	Monte Carlo 方法	226
8.1	MC 方法的基本思想	226
8.1.1	Buffon 试验	226
8.1.2	随机事件的概率定义	227
8.1.3	马尔可夫 (Markov) 过程	228
8.1.4	大数定理和中心极限定理	228
8.2	伪随机数的产生和检验	229
8.2.1	产生随机数的方法	230
8.2.2	伪随机数的随机性检验	231
8.3	给定分布的随机数抽样方法	232
8.3.1	离散型随机变量的直接抽样	233
8.3.2	连续分布的随机变量抽样	234
8.3.3	Metropolis 抽样法	241
8.4	微正则系综 MC 方法	244
8.5	正则系综 MC 方法	246
8.5.1	跃迁概率	246

8.5.2 正则系综的 MC 模拟法	247
8.6 等温等压系综 MC 方法	248
8.7 巨正则系综 MC 方法	249
8.7.1 巨正则系综 MC 算法之一	249
8.7.2 巨正则系综 MC 算法之二	250
参考文献	251
第 9 章 Monte Carlo 方法的应用	252
9.1 MC 方法在数值计算中的应用	252
9.1.1 计算定积分	252
9.1.2 解非线性方程组	256
9.1.3 解微分方程	257
9.2 Ising 模型	258
9.2.1 磁性材料	259
9.2.2 二元合金	261
9.2.3 Heisenberg 连续自由度 Ising 模型	261
9.3 自由能的计算	263
9.3.1 正则系综自由能的计算	263
9.3.2 二元系金属模型自由能的计算	265
9.3.3 计算任意固体的自由能及其在刚球 fcc 和 hcp 相中的应用	266
9.3.4 有相互作用力的 Einstein 晶体自由能	270
9.4 MC 在三维组织和模拟辐射屏蔽中的应用	271
9.4.1 用 MC 方法模拟材料三维组织及其演变	271
9.4.2 用 MC 方法求解辐射屏蔽问题	273
参考文献	279
第 10 章 计算程序设计方法	280
10.1 晶胞结构设计	280
10.1.1 坐标变换方法	281
10.1.2 HCP 晶胞结构程序设计	281
10.2 周期性边界条件的程序设计	284
10.3 分子动力学计算程序设计	286
10.3.1 预测矫正法程序设计	286
10.3.2 原子系综的分子动力学程序设计	290
10.4 METROPOLIS 抽样算法	292
参考文献	292
附录	293
附录 1 可以演示的几个计算程序	293
例 1 双原子分子在相空间中的量子轨道和能级	293

例 2	监测各次扫描之间可观察量的关联	297
例 3	计算氢分子内聚能的程序	303
例 4	利用局域自旋密度近似法计算氢原子有效势的程序	305
例 5	利用四面体法计算状态密度	306
例 6	用 EAM 法计算铜的原子内聚能和空位形成能	309
例 7	sp^3 杂化轨道间交叠积分的计算	312
附录 2	物理学常数	315
附表 1	物理学常数	315
附表 2	用于低能分子动力学的通用单位	316

第 1 章 计算物理学和计算材料科学

1.0 绪论

电子计算机的出现促进了现代数值计算方法的发展，而电子计算机技术和计算方法的发展，使得用传统的数学物理方法不能解决的问题得以解决，正是在这种情况下，催生了一门新兴的科学——计算物理学。

计算物理学是伴随着电子计算机的发展而逐步形成并获得发展的，它是物理学、数学和计算机三者相结合的产物。计算物理学是一门以物理和其他科学技术问题为出发点，运用数学的方法，并以电子计算机为工具来研究物理现象和规律的学科，它扩展了理论物理学，超出了分析方法的局限性，并扩展了实验科学的领地，因此它具有很强的应用性。今天，计算物理学已发展成为与理论物理学和实验物理学相并列的一门科学。

1.1 计算物理学的起源与发展

20 世纪 40 年代初，第二次世界大战时期，当时美国在研制核武器的工作中，迫切需要解决流体动力学过程、核反应过程、中子输运过程和物态变化过程等交织在一起的一系列问题，它们涉及的都是十分复杂的非线性方程组，用传统的解析方法求解是根本不可能的，因为需要在短时间内进行大量复杂的数值计算，没有计算机而靠人们手工运算或用机械计算器也是绝对不可能的。这样，计算机在物理学研究中的应用就成为必然。

1946 年，在冯·诺依曼的理论指导下，美国研制出了第一代电子计算机。由于人们受到在原子弹设计中使用计算机取得了巨大成功的启示，计算物理的方法和技巧也迅速地从核物理向其他学科领域渗透，从军事研究转向基础科学研究，从而大大丰富了计算物理学的内容。计算物理因而得以产生，以后，电子计算机的出现和迅速发展又为计算物理的发展打下了基础，并使计算物理得以蓬勃发展。人们从原子弹设计中使用计算机求解复杂物理问题取得的成功而得到启示，迅速将用计算机求解复杂问题的方法推广运用到物理学的其他领域，如天体物理、大气物理、等离子体物理、核物理、原子分子物理、固体物理、统计物理和高能物理等，进而应用到气象预报、水利、海洋、地震、石油、化工甚至人体科学等各个科学技术领域。与此同时，国际上为报道这些领域的研究成果相继召开了学术会议，并出版发行书刊。1963 年，利沃莫尔 (Livermore) 实验室的伯尔尼 (Berni)、埃尔德 (Alder) 等人开始编辑出版《计算物理方法丛书》(Methods in Computational Physics)。丛书内容包括统计物理、量子力学、流体力学、核粒子运动学、核物理、天体物理、固体物理、等粒子体物理、原子与分子散射、地震波、地球物理、射电天文、受控热核反应、大气环流等。1966 年，伯尔尼、埃尔德等人在美国又主编创刊了《计算物理杂志》(Journal of Computational Physics)。1969 年，由英国的伯尔基 (P. G. Burki) 主编，在西欧创刊了《计算物理通讯》(Computer Physics Communication)，主要报告各国在计算物理领域的工作。与此同时，相应的专门为计算物理工作者服务的许多方法库、程序库和数据库也相继建立。例如，在瑞士

日内瓦的欧洲联合核子研究中心 (CERN) 的 CERNLIB 程序库, 到 1988 年已包括了 2500 个子程序和 450 多个完整程序包。包含内容极为广泛, 诸如数学物理的特殊函数、线性代数、数值积分、快速傅里叶 (Fourier) 变换, 随机数产生、统计分析, 实验数据的作图分析及量子场论计算等, 它们都非常适宜于物理研究的需要。从 20 世纪 60 年代开始, 美、英等国家研制计算机化的数据库获得成功, 大量数据可以存储在占空间很小的磁带、磁盘乃至光盘上, 而且存储、检查和更新都非常方便。以核数据为例, 据国际原子能机构 (IAEA) 的核数据部 (NDS) 1980 年公布, 截至 1979 年底, 全世界共收集积累了实验数据 4 万组, 260 万个实验数据点。至于今天的数据量则是无法得到准确的估计——它实在是太大了。由此可见, 计算机的出现, 大大地武装了物理工作者, 也使一门崭新的物理学分支——计算物理学形成、成长、壮大起来。

20 世纪 60 年代以前, 计算机还主要用在物理问题的数值计算和模拟, 而到 20 世纪 60 年代以后, 计算机又进一步深入到实验室控制和数据获取自动化及理论解析运算自动化方面。1962 年, 在低能物理实验中就开始了计算机与实验仪器的联机工作。1964 年后, 高能物理实验中开始采用计算机高速可靠地采集和处理数据信息的方式, 以满足粒子物理实验对高事例率、大数据量处理和大型仪器设备控制的要求。到了今天, 计算机已经深入到各行各业直至人们的个人生活中了。人类的社会活动已经无法离开计算机。

20 世纪 60 年代初期, 随着国际上计算机在科研和工程技术领域中发挥越来越强的作用, 计算技术也在我国开始发展起来, 计算物理学也随之兴起。计算物理学已对我国原子弹和氢弹的研制、人造卫星的发射做出了显著的贡献。中国的《计算物理》(Journal of Computational Physics Sinica) 杂志于 1984 年 9 月正式出版, 它是反映国内在该领域中最新研究成果的一个综合性学术刊物。今天, 计算物理学已在我国的许多领域得到了广泛的应用和发展, 并且产生了许多分支学科。

1.2 计算物理学的特点和方法

计算物理学与理论物理学和实验物理学有着密切的联系, 计算物理学的研究内容涉及物理学的各个领域。一方面, 计算物理学所依据的理论原理和数学方程是由理论物理提供的, 其结论还需要理论物理来分析检验; 另一方面, 计算物理学所依赖的数据是由实验物理提供的, 其结果还要由实验来验证。对实验物理而言, 计算物理学可以帮助解决实验数据的分析、控制实验设备、自动化数据获取以及模拟实验过程等问题。对理论物理而言, 计算物理学可以为理论物理研究提供计算数据, 为理论计算提供进行复杂的数值和解析运算的方法和手段。总之, 计算物理学是与理论物理、实验物理互相联系, 互相依赖, 相辅相成的。它为理论物理研究开辟了一个新的途径, 也对实验物理研究和发展起了巨大的推动作用。

计算物理学是在吸收了计算数学研究成果的基础上, 采用具有自身学科特色的一种研究方法。它有如下四个方面的主要研究特点。

① 计算物理工作者在选用计算方法时更多考虑的是在算法和计算结果的物理意义上, 而计算数学工作者感兴趣的是算法的计算精度和收敛性、稳定性等问题。这是由于计算物理是以要解决的物理问题为出发点和归宿点, 因而对算法的评价和偏爱程度与计算数学并不很一致。计算物理学中有时采用较为简单可靠、物理意义清楚的算法, 对复杂物理问题进行各种近似处理。例如, 对非线性问题用一系列线性化的问题去逼近, 对非均匀介质用一批小的均匀介质的组合去逼近; 对不规则几何形体用一批规则的几何形体的组合来逼近等。

② 计算物理的任务是寻求物理规律, 解决物理问题, 因而它有时利用某些直观的物理现象, 加上逻辑推理、判断和实验。并不拘泥于数学上经过严格证明得到的计算方法, 而采

用自身特有的方法，例如流体力学中冯·诺依曼的“人为黏性法”，解非定态中子输运方程的“人为次临界法”等。

③ 计算物理学在研究中的思维方法与通常的数学思维习惯也有所不同。例如计算物理经常根据物理过程的物理图像采用蒙特卡洛方法或分子动力学方法对物理过程进行直接模拟。在处理可以归结为微分方程的物理问题时，计算物理学采用从物理问题直接得到的原始差分关系来进行计算，也称为“自然差分方法”。通常在计算数学的研究中需对原始差分关系求极限得到微分方程，再由微分方程离散化后得到人为差分方程来进行计算。实际上，从物理的角度看，原始差分关系中每一项都有物理意义，没有必要把它变为微分方程后，再人为地离散化为差分方程。从某种意义上说，计算物理学采用的计算方法更为简洁。

④ 计算物理工作者在使用计算机分析、整理大量数据的基础上，还必须得出物理结论，这些结论最好是以某种解析形式的近似函数式来表达。这样才有利于直接反映出物理规律和理论的进一步推广使用，但在许多情况下，做到这一步却有相当难度。

数学物理从实验总结出来的物理规律出发，运用数学解析方法算出各种定量结果，然后再从理论上阐明有关物理现象和物理过程，从而揭示出问题的本质，有时还能预言当时尚未被实验发现的现象。例如，量子力学揭示了原子、原子核和其他基本粒子的运动规律，狄拉克根据量子力学的原理预言了正电子的存在。显然，传统的数学物理方法对物理学的发展起了很大的作用，今后还将继续发展，但它存在很大的局限性。为了描述和研究物理过程，研究者需要将其运动规律表达为微分方程（或微分-积分方程）的形式，但只有在一定条件下解出微分方程，才能进一步深入地认识物理现象的规律并作出各种预测。否则，对那个问题的了解也只能是肤浅的，最多只能是定性的认知。正是因为绝大多数描述实际问题的代数方程和微分方程都是高阶非线性方程，根本无法用传统方法求解。

在物质世界中，我们所研究的问题常常是相当大数量的基本质点的集合。如星系中的星球、具有一定质量的气体、液体或固体物质中的原子、分子，或者是等离子体中的离子和电子等，对于这样的多体问题，即使知道了问题的基本原理，甚至已经确定了基本运动方程，却不可能用传统的数学物理方法求解。例如，可以求出单体和二体问题的解析解，但对三体问题一般说来就没有解析解了。另外，我们在实际中遇到的问题常常是复杂的非线性问题，传统的数学物理方法中采用的微扰等近似方法只能处理那些非线性很弱的问题，而对像流体力学和磁流体力学方程组那样高度非线性问题则是无能为力的。

计算物理学以其自身的特点，以计算机为工具，采用现代数学计算方法，能够解决非线性和多变量的问题，这是计算物理的特点之一。另一方面，计算物理可以提供一些比较难于进行实验的物理系统的信息，例如，对于恒星的观测只能限于其表面，而不可能探测恒星内部，对受控核聚变高温等离子体的直接观测也极困难，在十亿分之一秒的时间范围内对材料中微缺陷的运动机制的直接观测也是不可能的。但是计算物理学者在计算机上对上述物理系统进行数值模拟却能得到相当充分的信息。从原则上讲，只要计算机的能力容许的范围内，凡是局部瞬时的物理规律或已知或被假设，那么大范围、长时间的物理现象的运动规律，都可通过采用一定的数值计算方法在计算机上得到。小范围（局部）的数据发展到大范围（全局）得依靠计算机的大存储量来记录，瞬时过程积累为长时间过程则有赖于计算机的高速运行来实现。计算物理学家们正是在计算机的大存储量和高速度运算的基础上实现了对复杂的物理过程的数值模拟，或者说在计算机上做“试验”。

一切计算物理学问题的解决都要在计算机上进行，但由于计算机的离散特性，因此要求研究的对象也必须离散化，计算物理中的数学方法就是离散化方法。计算物理学中研究的问题的数学模型部分可归结为代数方程，而大多数则是微分方程，特别是偏微分方程。要想求解这些方程，必须先将问题离散化，然后再在计算机上求出离散的数值解。一般说来，求解的数值方法有：分子动力学方法、谱方法、有限元法、有限差分法和蒙特卡洛方法等。蒙特