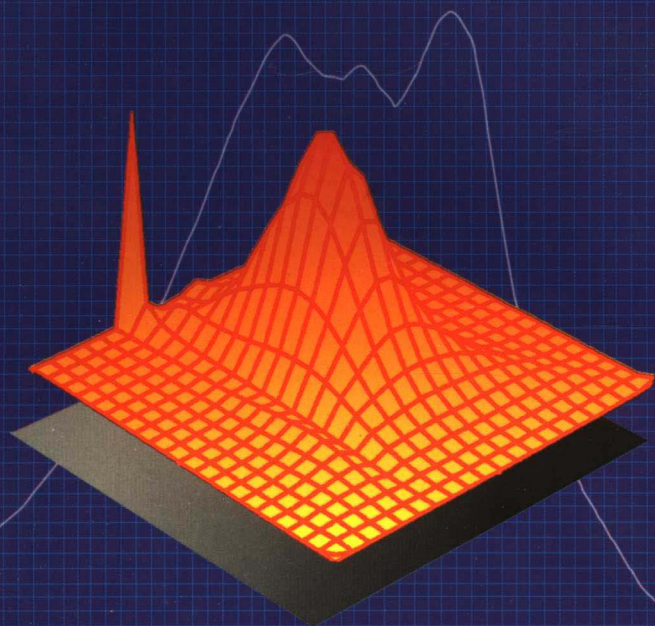


科学与工程计算丛书

模拟物理概论

MONIWULIGAILUN

朱允伦 编著



SECS

河南科学技术出版社

科学与工程计算丛书

模拟物理概论

朱允伦 编著

河南科学技术出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

模拟物理概论 / 朱允伦编著. - 郑州: 河南科学技术出版社,
2000.6

(科学与工程计算丛书)

ISBN 7-5349-2460-X

I. 模 … II. 朱 … III. 模拟物理 - 概论 IV.0411.3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2000) 第 50424 号

责任编辑 王广熙

河南科学技术出版社出版发行

(郑州市农业路 73 号)

邮政编码: 450002 电话: (0371)5737028

河南第一新华印刷厂印刷

开本: 850×1168 1/32 印张: 6.125 字数: 140 千字

2000 年 6 月第 1 版 2000 年 6 月第 1 次印刷

印数: 1-1 000

ISBN 7-5349-2460-X/O·6 定价: 9.00 元

代 序

为促进我国科学与工程计算事业的发展，1988年7月，中国核学会计算物理学会在青岛举办了全国计算物理学术研讨会。会议期间，经有关专家商议，决定出版一套《科学与工程计算丛书》，得到了许多著名科学家的热情关心和支持。经过两年多的筹备，正式开始了这套丛书的编辑出版工作。

计算机是一种延伸、强化人的思维的工作。当世界上第一台计算机 ENIAC 诞生时，冯·诺伊曼就预言这一新工具所拥有的巨大潜力和对人类社会的深远影响。在过去的40多年里，计算机迅猛发展，其应用范围从国防尖端部门扩大到科学技术和国民经济建设的各个领域，计算机已经给人类社会带来了一场深刻的技术革命，计算机的发展和计算方法的进步极大地提高了人们的计算能力，从而引起了科学方法论上的巨大变革，使计算成为科学研究的第三手段，对研究的定量化起到了特殊重要的作用。“实验、理论、计算”三位一体是现代科学研究的基本模式，三者既相对独立，又互相补充，互相依赖。人们在计算机上可充分利用数值计算来模拟现实世界的各种过程，部分替代实验或作为实验的补充，检验理论模型的正确性，尤其是还能呈现现实生活中无法重复或无法进行实验的现象，或模拟耗资巨大的实验工程，探索新的奥秘。由于有了计算这一强有力的手段，大大增强了人们科学研究的能力，促进了不同学科之间的交叉渗透，缩短了基础研究到应用开发的过程，加速了把科学技术转化为生产力的进程。

在计算机的发展和数值计算的广泛应用的推动下，科学与工程计算（简称科学计算）作为一门工具性、方法性和边缘交叉性的

新学科, 已经开始了自己的发展. 它既包含了在各种科学与工程领域中逐步发展起来的计算性学科分支, 如计算数学、计算物理、计算力学、计算化学以及计算地震学等计算工程学, 又包括经济科学、医学、生物学和系统科学等发展中所需要的计算理论. 计算方法则是它们联系的纽带和共性的基础. 科学计算就其本质而言, 是要解决现代科学与工程中提出的大规模、非线性、非均匀和几何形状非规则的复杂问题, 是数学理论和计算艺术的高度结合, 是复杂系统的数值计算或模拟. 计算机的性能与算法水平的乘积是衡量计算能力高低的指标.

我国在科学与工程计算领域已有了一支较高水平的、能打硬仗的队伍. 这支队伍在我国计算机水平相对落后的条件下, 以其智力优势和拼搏精神为我国的国防建设和经济建设作出了重大贡献, 积累了丰富的实践经验, 急需加以总结、提高、推广和交流. 编写《科学与工程计算丛书》, 正是为了适应这种形势的需要, 它的出版将会填补我国这方面的空缺.

这套丛书是采用“众人拾柴火焰高”的集资方式创办的, 由于丛书的涉及面极广, 故不设主编, 由常务编委轮流担任执行主编. 丛书作者都是奋战在教学和科研第一线的专家学者, 他们为发展我国的科技事业不辞劳苦, 呕心沥血, 无私奉献, 谨向他们表示崇高的敬意.

可以期望, 《科学与工程计算丛书》的出版发行, 必将有力地推动我国科学计算事业的发展.

《科学与工程计算丛书》编委会

1990 年 8 月

绪 言

物理学最基本的手段是实验，相应地，实验物理是物理学的基本分支。自从 20 世纪初提出量子力学和相对论后，理论方法、数学方法在物理研究中变得越来越重要，而且出现了一些专门从事理论研究的物理学家，因而理论物理成为一个独立的分支。现在，计算机模拟作为第三种研究手段，在物理研究中越来越重要，越来越广泛，尤其在非线性物理、格点规范理论、统计物理、凝聚态物理等领域出现了一批以做计算机模拟为主的物理学家，物理方面的论文约有 30% 用到了计算机模拟，出版了大量有关计算机模拟在物理学中应用的专著，还出现了模拟物理中心这样的研究机构，所以，实际上已形成了一个新的分支——模拟物理。

随着计算机模拟的广泛应用，计算机模拟已成为现代物理学人才必须掌握的基本方法，不管是从事理论物理还是实验物理，在创新研究工作中都要了解和用到这些方法，而培养一批计算机模拟物理的人才就更加重要了。

这一重要趋势自然应当在大学物理专业的教学中有所反映，这是教学现代化的一个重要标志。从 1989 年起，我在北京大学物理学系开设了“计算机模拟方法”课程。本书就是作者在这门课程讲义的基础上编写的，主要是增加了一些对模拟物理原理的探讨和论述。

计算机模拟的方法可分为三类：随机性模拟方法（蒙特卡罗方法 MC）、确定论模拟方法（分子动力学方法 MD）和离散性模拟方法（元胞自动机方法 CA 和遗传算法 GA 等）。本书系统地介绍了这三类模拟方法，而重点是讲蒙特卡罗方法。与其他讲述蒙特卡罗方法的教材不同，本书在原理的讲解方面尽量避免使用数学

名词，尽量通俗易懂，以适合物理专业的学生，并注重介绍计算机模拟方法在物理学各领域中的应用，尤其是涉及一些新的前沿领域，例如量子力学（量子蒙特卡罗方法）、非线性物理、统计物理、格点规范理论、相对论性重离子碰撞等。要掌握计算机模拟方法，必须动手，所以，本书给出了十几个作业供选择。这些作业大小适度，又有一定的趣味和难度，如锌树林生长、逾渗、Ising 模型相变、中子穿透等，以培养学生的独创精神。读者在使用本书时，最好也做几个作业。

在本书完成时，我不由得想起很多物理学前辈对我的引导和支持。最早把我引入计算机模拟的是金建中院士，1964 年，我从北京大学物理学系毕业后分配到他担任所长的兰州物理所工作，这个所的主要研究方向是真空，而我是学理论的。他给我提出是否可以用蒙特卡罗模拟分子流动来作真空系统计算的课题。我经过调研很快掌握了蒙特卡罗方法的要点，完成了两项分子流动的蒙特卡罗模拟工作，从而使我对蒙特卡罗模拟产生了浓厚的兴趣。在我考回北京大学物理学系做粒子理论的研究生后，1979 年看到文献上第一篇格点规范理论的蒙特卡罗模拟的文章后，就想转向这个方向。当时的导师曹昌祺教授很支持，放手让我搞，于是我就自己钻研开展了这方面的工作。在转为胡宁院士的博士生后，又得到胡宁先生和戴元本、何祚庥、郝柏林、苏肇冰等院士的鼓励和指导，继续做这方面的工作。在留校任教后，北京大学物理学系先后几届系主任虞福春、赵凯华和甘子钊院士都支持我开展模拟物理方面的工作，支持我开设“计算机模拟方法”课程，甘子钊先生还支持我的建议，在北京大学成立了模拟物理中心。校长陈佳洱院士也给予我很大的支持和鼓励。尤其要提到的是，本书的写作得到了何祚庥院士的热情鼓励和支持。

本书得以出版，应当感谢丛书编委会的张锁春和蒋伯诚两位教授的关心和支持。

本书的有些例子是我的一些学生在跟我做毕业论文时完成的，主要是量子蒙特卡罗模拟和遗传算法及元胞自动机应用的例子。他们是刘国峰、罗卫东、傅少华、朱文光、杨丹、刘宁、杨成、严海峰、张泽湘等，还有不少学生在我讲课过程中与我的讨论也对我有很大的帮助。

模拟物理是一门新的学科，目前还没有见到国内外有论述模拟物理的专著，只见到有讲述计算机模拟方法的书。从内容来讲，本书的主要篇幅也是讲计算机模拟方法的，但是，为了强调模拟物理这个新的领域已经形成，所以就尝试性地加写了模拟物理的形成和原理部分，并将书名定为《模拟物理概论》，希望能够引起对模拟物理这一新领域的注意，并希望能够起到抛砖引玉的作用，希望以后有更好的模拟物理专著出现。由于作者的工作范围和水平所限，本书难免有错误之处，欢迎读者指正。

作 者

2000 年 3 月 12 日

目 录

第一章 关于模拟物理	(1)
1.1 计算机模拟 —— 物理学研究的第三手段	(1)
1.2 计算机模拟的特点与步骤	(6)
1.3 计算机模拟的分类与作用	(8)
1.4 模拟物理的形成	(10)
1.5 模拟物理的原理	(12)
1.6 模拟物理的方法	(16)
参考文献	(17)
第二章 随机性模拟方法 —— 蒙特卡罗方法 (MC)	(23)
2.1 蒙特卡罗方法概述	(23)
2.2 随机数的产生与检验	(41)
2.3 随机抽样方法	(52)
2.4 MC 对随机过程的直接模拟	(68)
2.5 MC 在确定性问题中的应用	(91)
2.6 量子蒙特卡罗方法	(102)
2.7 MC 在统计物理与格点规范理论中的应用	(113)
参考文献	(131)
第三章 确定论模拟方法 —— 分子动力学方法 (MD) ...	(137)
3.1 引言	(137)
3.2 单粒子问题 —— 初值问题的数值解法	(139)
3.3 分子动力学模拟的基本步骤	(143)
3.4 微正则系综的分子动力学模拟	(147)

3.5	正则系综的分子动力学模拟	(150)
3.6	分子动力学模拟的主要结果	(154)
	参考文献	(159)
第四章 离散型模拟方法 —— 元胞自动机 (C A) 和		
	遗传算法 (G A)	(161)
4.1	从“生命游戏”谈起	(161)
4.2	元胞自动机 (C A) 模拟	(163)
4.3	元胞自动机 (C A) 模拟的应用	(168)
4.4	遗传算法 (G A) 及其应用	(172)
	参考文献	(182)

第一章 关于模拟物理

1.1 计算机模拟 —— 物理学研究的第三手段

19 世纪中叶以前，物理学基本上是一门实验科学。后来，麦克斯韦的电磁理论开始显示出理论思维的威力。到 20 世纪初，随着量子力学和相对论的诞生，理论物理成为一门独立分支。物理学成为实验和理论密切结合的科学，并引起 20 世纪科学技术的重大革命。

这个革命对人类社会生活产生了重大影响，其中一个重要方面是电子计算机的发明，而计算机的发明和发展又反过来促进了物理学的发展。

计算机在物理学研究中的用途主要可分为八个方面：

- (1) 数值分析：常用计算方法用于物理问题。
- (2) 计算机模拟：计算机数值实验。
- (3) 符号运算：用计算机作公式推导等非数值计算。
- (4) 实验数据处理。
- (5) 实验控制。
- (6) 计算机辅助教学。
- (7) 文字图形处理与科学可视化。
- (8) 网络通信，科技交流。

必须强调指出的是，电子计算机对物理学的用处，决不只是做数值计算，更重要的是，它为物理学家提供了新的认识与研究手段 —— 计算机模拟。这是与实验方法、理论数学方法并列的第三种研究手段，下面我们通过一些例子来说明这一点。计算机模拟与实验、理论方法一样，也带来了新的物理概念，发现了新的

物理现象.

例 1.1 费米 - 巴斯塔 - 乌拉姆实验.

这是历史上第一个计算机实验. 费米是 20 世纪最重要的物理学家之一. 在计算机发明以后, 他就开始思考计算机的应用问题. 他首先想到的一个问题是: 能量均分是如何实现的? 大家知道, 物理学家用简谐振子集合的模型很好地解释了固体在室温附近的比热, 这需要假设能量是均分的. 简谐振子是用线性常微分方程描写的简单振动, 其解为 $\cos \omega t$ 和 $\sin \omega t$ 的线性叠加, 各个不同频率的振子 (称为模式) 是互相独立的, 没有相互作用, 相互之间也不可能有能量交换. 人们曾经相信, 能量均分是由于这些谐振子之间有很弱的非线性相互作用而实现的. 费米对此提出了疑问: 事情是否果真如此?

这个问题很难用解析的方法来解决. 1952 年, 费米建议在电子计算机上做如下数值实验: 取 64 个谐振子, 相互间有微弱的非线性相互作用. 在初始时刻把能量集中在第一个模式的谐振子上, 其他 63 个模式的谐振子能量都为零, 通过计算以后各个时刻的能量分布来研究能量均分问题. 第二年, 巴斯塔 (Pasta) 和乌拉姆 (Ulam) 在 Los Alamos 的第一台大型电子计算机 MANIAC I 上实现了这个建议. 实验的结果完全出人意料, 经过 3 万个周期后, 能量又回到了第一个模式的谐振子, 只剩 1% 以下的能量留给了其他振子 (图 1.1), 根本没有能量均分的趋势. 连费米本人事先也没想到结果会这样奇怪. 顺便指出, 这种返回并不是庞加莱周期, 那要比这长得多 (大约与地球寿命相当), 这种返回只是明确表明这样的系统是不会发生能量均分的.

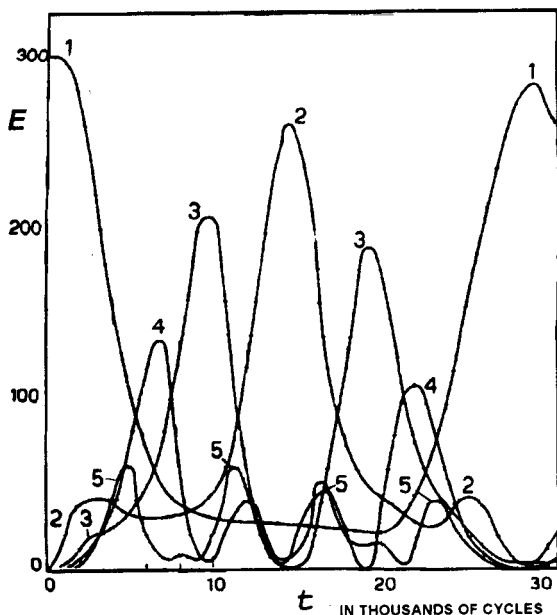
在费米去世后, 其合作者在 Los Alamos 的一个内部研究报告 (LA-1940) 中报告了这个结果. 虽然它始终没有正式发表, 但

非线性问题的研究

E. 费米, J. 巴斯塔和 S. 乌拉姆 文献 LA-1940 (1955 年 5 月)

摘 要

在 Los Alamos 的 MANIAC I 计算机上研究了一个由 64 个质点组成的一维动力学系统, 在邻近质点间含有非线性力, 考虑的非线性项有二次的、三次的非线性项, 结果分解为傅里叶分量并作为时间的函数画出。



图中画出的是头五个模式的动能加势能. $N = 32; \alpha = 1/4; \delta t^2 = 1/8$. 弦的初始形状是单一正弦波. 计算了约三万次计算循环

图 1.1 费米等人非线性问题研究的摘要 [1,3]

确实产生了重大的影响。它直接导致了孤立子理论的发展，也是“各态历经理论”的一个反例，以后导致非线性科学的发展。许多人把它看作计算物理学的正式起点，因为这是第一个计算机模拟实验，它清楚表明计算机不只是一个数值计算工具，而且可以由计算机实验来发现物理问题。从此，计算机模拟实验成了物理学家的一种新的认识与研究自然规律的重要手段。

例 1.2 反应堆屏蔽——中子输运。

当时，在 Los Alamos 的计算机上还做了另一个重要的计算机模拟实验，这就是发明计算机的冯·诺伊曼 (Von Neumann) 和乌拉姆做的中子输运过程的计算机模拟。在原子弹的研制过程中，碰到大量链式反应级联过程与输运过程，例如核燃料达到爆炸所需的临界质量就是一个重要问题，又如核反应堆外面的屏蔽层需要多厚也是一个重要问题，解决这些问题都需要解链式反应的级联过程和输运过程的积分微分方程，而这些方程很难用解析方法解。要通过实验来解决这些问题显然又很危险。所以，费米和冯·诺伊曼等人就提出通过计算机随机试验来模拟这些链式反应与输运过程，从而为原子弹研制提供了可靠的数据，这方面的模拟在以后的核武器研制中一直起着极其重要的作用。

例 1.3 天气预报 (蝴蝶效应)。

20 世纪 60 年代初，美国气象学家洛伦兹 (Lorenz) 构造了一个天气的简化模型，这个模型包含 12 个方程，是一个决定论的系统。洛伦兹用这个模型在计算机中模拟天气的变化。一天，在计算偶然中断后，他用前一次输出的结果作为初值打进计算机开始计算，一个小时以后他看到了出乎意料的结果，他发现天气变化同上一次结果迅速偏离，而其原因说来似乎让人难以置信：计算机存储中保留了六位数字，而在输出时只打印三位，正是这 $1/1000$ 的误差对结果引起了很大的影响。图 1.2 是洛伦兹当时

的打印结果，可看到两条曲线从几乎相同的出发点开始，很快就分道扬镳了。

这个例子表明结果对初始条件的敏感依赖性，它说明长期天气预报是不可能的。有人用“蝴蝶效应”来形象地描述这一特性：一只蝴蝶在北京扇动翅膀会在纽约引起一场龙卷风！

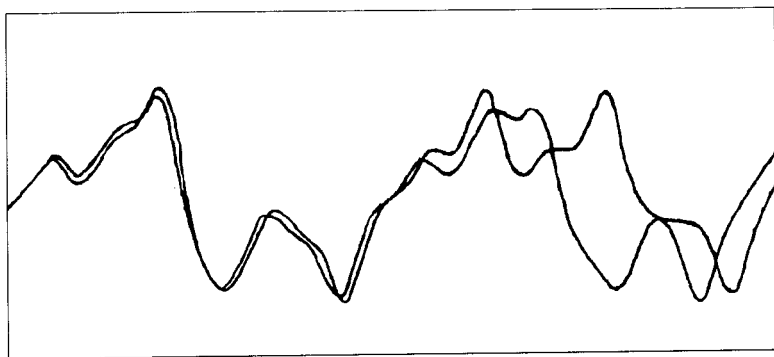


图 1.2 洛伦兹的打印结果 [2,3]

进一步研究发现上述现象是非线性方程的特性，由此引起了非线性科学的发展，即“混沌”科学的发展。

近四十年来，随着计算机的飞速发展和研究问题的日益深入复杂，计算机模拟实验的应用范围越来越广泛，规模也越来越大，计算机模拟实验在物理研究中也越来越重要。计算机模拟已成为与实验手段、理论手段并列的第三种科研手段 [3,4]，这是由于计算机模拟实验具有一系列传统的手段所没有的特点。

1.2 计算机模拟的特点与步骤

计算机模拟的主要特点，也是它与数值分析的不同之处，在于它不需要先有解析的方程，只需要有一个基本的机制就可以进行。例如，在统计物理研究中，碰到一种自回避随机迁移问题，即在随机行走中，以后的步子不许穿过以前各步所经过的路径，加上这个限制后就不可能用通常的微分方程来描写它的平均性质。但是在蒙特卡罗模拟中加上这个限制是轻而易举的。像这样没有解析方程的问题，计算机模拟实验几乎是唯一的研究方法。即使在有解析方程的情形，当出现非线性、高维、多变量或复杂边界条件等复杂性时，通常的数值分析也是很困难的，而用计算机模拟则往往迎刃而解。而且，由于计算机模拟将结果直接和基本机制联系了起来，因而可通过计算机模拟与实验结果的比较来研究基本的机制。比如，相对论性重离子碰撞研究是目前用于探索新的物质形态——夸克胶子等离子体的重要实验手段，在分析实验数据时，必须通过核内的计算机模拟来判断有无夸克胶子等离子体形成。另外，计算机模拟还可以把所有信息都记录下来，因而可测出一般数值方法无法计算、实验也难以测量的量。例如，在自由分子流动的蒙特卡罗模拟中，可以把分子通过时的平均碰壁数统计出来。在相变的蒙特卡罗模拟研究中，可以通过一些微观量的统计平均研究相变的机制。

计算机模拟的一个突出特点是它基本上不受任何条件的限制，只受到计算机本身的限制，因而具有极大的灵活性与随意性。计算机模拟的对象是模型，因而不限于自然界发生的现象，比如，磁单极并未在实验中发现，但用计算机模拟可以做磁单极在磁场中运动的实验。计算机模拟也不受时间、空间的限制。例如，可以用计算机模拟星体的演化过程，也可模拟中子星周围或黑洞内

部的运动，而这些都无法在实验室做实验，只能用计算机模拟。计算机模拟的对象还可以完全是理论的模型，相互作用、维数及各种参数都可以是假想的，而且可以控制得很精确，因而为理论研究提供了有力手段。

计算机模拟之所以重要，还因为它原则上是精确的，只有数值计算误差或统计误差，而这些误差也是可以控制的。在物理研究中，物理学家常常用模型来解释物理现象，比如用伊辛模型来解释铁磁性，即假定每个格点上有个自旋磁矩，只能取上下两个方向，相邻格点的相互作用是有利于取相同方向的。但是，这样一个简单模型却很难解析求解。在二维情形，昂色格用了个巧妙的方法得到了解析解，并因此得到了诺贝尔奖。而对于三维情形，则无法解析求解。实际上，物理学中的模型有解析解的是极少数，大量模型只能用近似方法来求解；另一方面，实验也有很多引起系统误差的因素是难以精确控制的，如样品的杂质、测量仪器的系统误差及实验的环境干扰等。这样，在理论模型与实验比较时，往往难于判断是模型的问题还是近似方法的问题，或者还可能是实验的问题。现在，计算机模拟弥补了这个缺陷。由于它原则上是精确的，一方面，用其结果与实验比较可以检验理论模型；另一方面，与近似解比较可检验近似方法的有效性。计算机模拟的这种双重作用使它已成为理论与实验之间的桥梁，因而显示出特别的重要性。

计算机模拟实验可以用图形显示，因而具有形象直观的优点。计算机显示器和图形软件的高度发展，使模拟实验的结果可以用很精细的彩色图形显示，甚至还可动画给出运动过程，从而把一些困难的问题形象直观地表现出来，而且，这种图形显示是很随意的：大的可以缩小，小的可以放大；快的可以变慢，慢的可以变快；漫长的、宏观的星体演化过程，瞬间的、微观的过程都