

JISUANWULI
JISUANWULI
JISUANWULI
JISUANWULI

计算物理

大连工学院出版社

计 算 物 理

宫 野 编著

大连工学院出版社

内 容 简 介

本书紧密结合物理学上的问题，给出了计算方法和具体算例，内容简洁、明瞭，通俗易懂。主要内容包括静电场、电阻网络、热传导与扩散问题的线性、非线性方程组的数值解，定积分，常微和偏微分方程的数值解，薛定谔方程的数值解和矩阵解，常用的实验数据处理方法：插值、拟合，计算机对物理问题的随机模拟，谐波分析与快速傅里叶变换，多重积分的数论网格法等十五章。同时，书中附有脉络清晰的计算框图和三十余个标准、通用的 FORTRAN 语言程序。程序准确无误，功能强，可供开展科研工作选用。

本书可作为大专院校应用物理专业及理工科其它相近专业的技术基础课教材和科研人员、工程技术人员的参考书。

计 算 物 理

JISUAN WULI

宫 野 编著

大连工学院出版社出版发行
(大连市甘井子区凌水河)

辽宁省新华书店经销
大连船舶生产服务公司
印刷公司 印刷

开本：787×1092 1/32 印张：12 $\frac{1}{4}$ 字数：262 千字

1987年12月第一版 1987年12月第一次印刷

印数：0001—2500 册

责任编辑：许芳春

封面设计：羊 戈

校对责任：田 溪

统一书号：13400·10

ISBN 7-5611-0025-6/O·2

定价：2.20 元

前 言

计算物理起源于第二次世界大战中美国研制核武器的工作。它是利用现代大型快速计算机对物理过程进行数值模拟的一门新兴的边缘学科，是物理科学的最新发展之一，是介于理论物理与实验物理之间的一个新分支。因此，计算物理又可以简单地理解为用现代化的计算工具武装起来的理论物理，或形象化地描述为“纸面上的”实验物理。

现在，计算物理已广泛应用于原子能、航空与航天、气象、海洋、化工、石油、建筑等工业部门。在基础科学研究中，对于天文学、力学、物理学、化学以至生理学、医学等都已成为不可缺少的现代化研究手段。

为了推动和普及这门学科在我国的发展，根据给物理系本科生、研究生、部分中青年教师和代培生等讲授“计算物理”的讲义，参阅有关资料和基于作者多年来应用数值方法研究与解决各种物理和工程技术问题的科研工作经验，特编著了这本“计算物理”书。

根据计算物理学的特点，本书对于各种数值计算方法理论本身不作细致的讨论，而主要是探讨如何应用这些方法并借助电子计算机进行有成效的实际计算。每章有例题，书末有上机实习题，帮助读者理解和消化所学过的内容。并且，书中还附有脉络清晰的计算框图和三十余个标准、通用的FORTRAN语言程序。程序准确无误，功能强，可供开

展科研工作选用。同时，将近年来的某些新方法，例如样条函数，快速傅里叶变换以及作者在计算物理方面新的研究成果（均已在国内外有关刊物上发表）纳入本书。

由于水平有限，书中的缺点甚至错误在所难免，衷心希望广大读者提出批评建议，以便今后作进一步的修改。

宫 野

1986年9月于大连工学院物理系

目 录

第一章 计算物理学概况

- § 1. 计算物理学的内容…………… (1)
- § 2. 计算物理学的性质和任务…………… (3)
- § 3. 计算物理学所用方法的特点…………… (5)
- § 4. 目前国内外发展简况…………… (6)

第二章 几个简单计算和计算正确性的检验

- § 1. 电场强度和超越方程根的近似计算…………… (8)
- § 2. 平均值、均方差和气垫实验数据处理… (20)
- § 3. 氢气在低温时定容热容量…………… (23)
- § 4. 虚宗量贝塞尔函数的计算…………… (27)
- § 5. 泰勒展开近似…………… (35)
- § 6. 计算正确性的检验…………… (42)

第三章 电阻网络和线性、非线性方程组的数值解法

- § 1. 电路中各电阻上的端电压和线性代数方程组的直接法…………… (45)
- § 2. 非线性方程组的牛顿法和下降法…………… (55)

第四章 静电场、电子线路、热传导和扩散

- § 1. 两个点电荷的电场中的电位…………… (70)
- § 2. 点电荷系的电场中的电位和定积分的近似计算…………… (73)
- § 3. 振荡积分的非隆方法…………… (86)

§ 4. RC回路中电容器的放电和欧拉近似法.....	(94)
§ 5. 振荡电路和改进的欧拉法及龙格—库塔法.....	(96)
§ 6. 求解刚性常微分方程初值问题的特雷纳方法.....	(106)
§ 7. 误差、误差改善与误差估计.....	(118)
§ 8. 传热导与扩散过程的差分法.....	(123)
第五章 薛定谔方程及其解法	
§ 1. 一维方势阱的计算.....	(136)
§ 2. 粒子在势力场中运动和诺默若夫方法...	(147)
第六章 薛定谔方程的矩阵解	
§ 1. 本征值方程的矩阵表示.....	(154)
§ 2. 雅可比方法及其收敛性.....	(157)
第七章 实验数据处理	
§ 1. 插值法.....	(171)
§ 2. 样条函数、插值和数值求积.....	(184)
§ 3. 实验数据的曲线拟合—最小二乘法.....	(198)
第八章 蒙特卡罗方法	
§ 1. 蒙特卡罗方法的基本思想、特点及其局限性.....	(211)
§ 2. 蒙特卡罗方法计算积分.....	(224)
§ 3. 蒙特卡罗方法在粒子输运等问题中的应用.....	(231)
第九章 谐波分析与快速傅里叶变换	
§ 1. 引言.....	(239)

§ 2.	离散傅里叶变换·····	(240)
§ 3.	快速傅里叶变换·····	(242)
§ 4.	快速傅里叶变换计算步骤举例·····	(245)
第十章 加速求积法在计算环形电流的势和场中的应用		
§ 1.	引言·····	(264)
§ 2.	公式推导·····	(265)
§ 3.	加速求积法及其应用·····	(269)
§ 4.	数值例子·····	(270)
第十一章 多重积分的数论网格法		
§ 1.	引言·····	(275)
§ 2.	求积公式·····	(276)
§ 3.	框图和程序·····	(283)
§ 4.	应用实例·····	(286)
第十二章 福克—普朗克方程的数值解		
§ 1.	基本方程和定解条件·····	(293)
§ 2.	数值解法·····	(299)
§ 3.	计算结果及讨论·····	(306)
第十三章 轴对称自由边界磁流体平衡		
§ 1.	隐式交替方向加三段迭代法·····	(310)
§ 2.	积分法·····	(320)
§ 3.	直接法·····	(326)
第十四章 一类常微分方程边值问题的数值解法		
§ 1.	基本方程和边界条件·····	(340)
§ 2.	数值解法·····	(341)
第十五章 线性非线性撕裂模演化的数值研究		
§ 1.	线性双撕裂模演化的数值方法·····	(348)

§ 2. 撕裂模非线性演化的数值解法·····	(361)
上机实习题·····	(377)

第一章 计算物理学概况

§ 1. 计算物理学的内容

计算物理学起源于第二次世界大战中美国研制核武器的工作，它是随着电子计算机的出现和发展而迅速发展起来的一门新兴的边缘学科，是介于理论物理与实验物理之间的一个新分支。顾名思义，计算要借助电子计算机，要选用计算方法，所以计算物理学是以电子计算机为工具，应用各种数学方法解决物理问题的应用科学，是物理、数学、计算机三者相结合的产物。计算物理学的出发点是物理问题，计算机是工具，计算方法和技巧是手段，归宿点是为了解决物理问题。

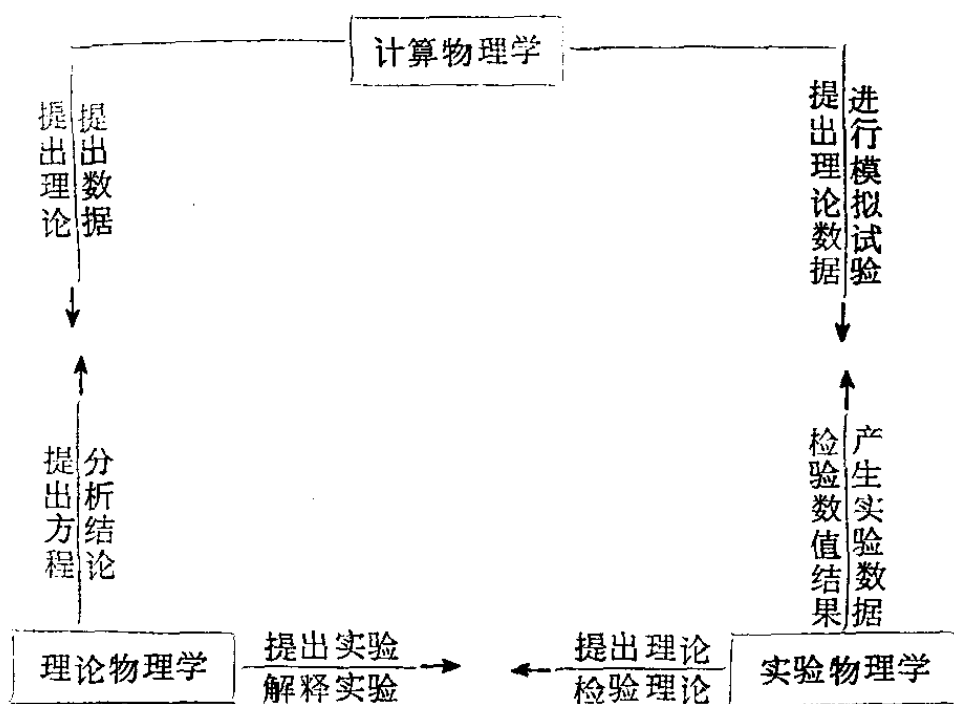
我们知道，传统的物理学（包括力学、天文学、物理学、化学等）分为理论物理和实验物理（包括应用物理）两大分支。理论物理是从一系列的基本物理原理（例如质量守恒、能量守恒、动量守恒、角动量守恒、电荷守恒、万有引力规律、电荷的吸引与排斥规律以及电磁感应规律等）出发，列出数学方程，并用传统的数学分析方法求出显式的解析解，利用这些显式解析解所得出的结论与实验和观测结果对比，用以解释已知的自然现象，并预测未来的发展。实验物理则以实验和观测为手段来发现新的物理现象，为理论物

理提供新的理论规律的素材，并检验理论物理推论的正确程度及应用范围等等。

然而自然界的现象是极其复杂的，很多实际问题用传统的物理学是难以解决或者无法解决的，所以要发展计算物理学。例如，由于天体物理学的发展，本世纪卅年代开始研究核能作为恒星能源以及恒星的演化问题。对这个问题，从实验物理的角度要观测多少亿年，而且在实验室内要放一个太阳也是不可能的；从理论物理的角度看，这要牵涉到核能释放、中微子输运、流体运动、热的辐射、传导与对流、重力场的约束等复杂的物理机制，虽然方程可列出一大片，但很难求解。四十年代初，在核武器的研制过程中，又遇到了极其复杂的理论和技术上的问题，如在原子弹的设计过程中碰到几何形状、尺寸大小、材料分配等一系列问题。这些问题列出的方程，都是极其复杂的非线性方程组，用传统的分析方法求解是根本不可能的。因此大量复杂的计算不得不乞求于电子计算机，这样便推动了计算机的发展。计算机的发展反过来又促进了计算物理学的产生和发展。

因此，可以形象化地说，计算物理学是用现代大型快速计算机武装起来的理论物理学和“纸上的”实验物理学。

所以，可以认为当前物理学的发展，在某种意义上，是在三个分支上向前发展：理论物理、实验物理和计算物理。虽然这三大分支是互相联系，互相依赖，相辅相成的，但也有相对的独立性。它们三者间的相互关系可用下面的图来说明。



§ 2. 计算物理学的性质和任务

由于计算物理学使用了计算机这一现代化的计算工具，所以从原则上说，凡是局部瞬时的物理规律为已知，或已被作为假设，就可研究大范围的长时间的物理现象。具体地说，大范围的数据靠计算机的大存贮量来记录，瞬时过程积累为长期过程靠计算机的高速运算来模拟。这样，人们便可从已知或已被假设的局部瞬时的物理规律，得出大范围长时间物理现象的变化过程。这便是计算物理学要进行工作的领域。

首先，以天体力学为例。我们知道三体问题（日、地、月）和多体问题（太阳系的行星和卫星）至今还没有显式的解析解。从局部瞬时的物理规律看来，这牵涉到的只是牛顿运动定律和万有引力定律等。这些规律都是已知的，方程组早已列出，问题只在于求解。因此，这是计算物理学可以起重要作用的领域。事实上，登月飞船的轨道以及一般的导弹的轨道选取和及时控制，都是通过快速计算机来进行的。

其次，以流体力学（包括空气动力学、气象学、海洋学等）为例。牵涉到的局部瞬时的物理规律是质量守恒、能量守恒、动量守恒以及物质状态方程（压强、温度和密度的关系），这些局部瞬时的物理规律都是已知的，但由于初始条件和边界条件的不同，情形千变万化，这组偏微分方程的定解问题是无穷无尽的。但从原则上说，这些问题可以利用电子计算机来求解。气象部门大量应用大型快速计算机就是明显的例子。

再以中子输运为例。在原子反应堆的设计与运行过程中，要研究千千万万个中子与特定原子核发生碰撞问题，其问题可用微分积分方程——Boltzmann 方程来描述。但由于堆内物质的分布不同，边界不规则，要解这种微分积分方程是极其困难的。但是，由于局部瞬时的物理规律已知，例如碰撞概率，碰撞后可能产生的散射、吸收以及引起裂变等概率，都可通过实验给出，因而要求出全局和长期的物理过程，这正是计算物理学的研究领域。

许多重大科技问题都是综合性很强的课题，例如天体物理学、受控核聚变与等离子体物理等都牵涉到许多物理过程，包括流体运动、粒子输运、热传导、核反应、电磁效应、重力影响等等。但只要局部瞬时的物理规律已知，极其复杂的过程也可以利用大型快速计算机来进行过程模拟，并求出大范围长时间的发展过程。

所以，可以说计算物理学已广泛地应用到自然科学研究的各个领域，工程技术的各个部门，它是一门与国民经济、科学研究、国防建设有密切联系，解决实际问题的应用科学。

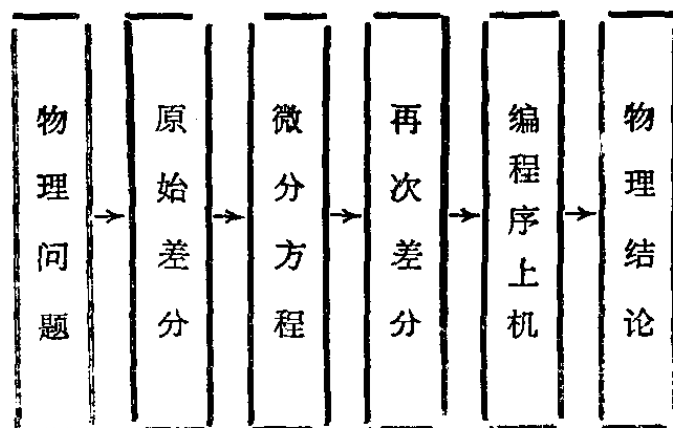
§ 3. 计算物理学所用方法的特点

计算物理学所使用的方法与纯粹研究计算方法的工作者所欣赏的方法并不一定都是相同的。它一方面吸取专门从事研究计算方法的工作者所创造出来的好办法，另一方面有结合需要解决物理问题本身所创造出来的富有特色的实用的计算方法。其特点大致如下：

（一）利用某些直观的物理现象，加上逻辑推理、判断和实验，而不拘于数学上的严格证明创造出的新的计算方法。例如计算流体力学中的冯·诺伊曼“人为粘性法”，解非定态中子输运方程的“人为次临界法”等。

（二）有时采用较简单可靠的物理意义清楚的算法，对复杂物理问题本身作种种近似。如非线性问题用一系列线性化的问题去逼近；非均匀介质问题用一批小的均匀介质的组合去逼近；变系数问题用一系列常系数问题去逼近；不规则几何形体用一批规则的几何形体的组合去逼近等等。

（三）计算物理以物理问题为出发点和归宿点，因此其思维方法有时与习惯作法有所不同。人们习惯的作法，常见的模式是：



由于计算机的计算是离散的数字计算。所以，可将上述过程中的中间两步省略。这种思维方法，取名为“天然差分”。如蒙特卡罗计算对物理问题直接模拟所采用的方法便是。

(四) 计算物理工作者在使用计算机计算的同时，在得到大量数值结果基础上，将得出的物理结论以某种解析形式的近似解来表达，这对于理论推广和实际使用是必要的。

§ 4. 目前国内外发展简况

国际上除对计算物理学开设课程、出版书籍、召开学术会议外，还有三种系统的出版刊物：

(一) 《计算物理学方法》丛书(Methods in Computational Physics)。1963年起由Livermore实验室的Berni Alder等人开始编辑，每年约一辑。到1977年已出版了17卷，其范围包括统计物理、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、等离子体物理、原子与分子散射、地震波、地球物理、射电天文、受控热核反应、大气环流等等。

(二) 《计算物理杂志》(Journal of Computational Physics)。1966年由Berni Alder等人主编创刊，到1983年底已出刊52卷。

(三) 《计算物理通讯》(Computer Physics Communication)。1969年由英国的P.G.Burki主编创刊，主要报导西欧各国的工作，到1983年底已出刊30卷。

中国的《计算物理》学报(Chinese Journal of Computational Physics)于1984年9月正式出版了。它是反映

计算物理学科领域内最新研究成果的一个综合性学术刊物。
主要刊登：为解决物理、化学、生物、工程、力学、原子能、气象、地质、海洋、石油、航天、医学、能源、经济等方面的问题，用相应的计算方法，借助电子计算机求解而获得的各种研究成果及学术论文；此外，还刊登学术研究简报、有关计算物理方面的应用软件介绍等。

我国的计算物理学是从六十年代初期随着计算技术的发展而发展起来的，现在已形成了一支年轻的计算物理学科的技术队伍。这支队伍为我国的原子弹和氢弹的研制，人造卫星的上天，远程运载火箭的发射以及石油的开发等都作出了显著的贡献。今后，计算物理学必将更广泛地应用在原子能、航空、石油、气象、水利等各个领域。社会主义四化建设需要这门科学为它服务，计算物理学也必定会在为四化建设服务的过程中得到更快的发展。

第二章 几个简单计算和 计算正确性的检验

本章通过一些实际例子，说明用计算机处理这类问题相当方便，并归纳出求解问题的大致过程和步骤。同时，介绍计算正确性的检验。

§ 1. 电场强度和超越方程根的近似计算

考虑静电问题。求相距为一米的两个点电荷 q_1 和 q_2 之间联线上场强为0的地点。

分两种情形进行讨论

1. q_1 和 q_2 同号（无妨设皆带正

电荷，见图1）设向右方向为正，则 p 点的场强

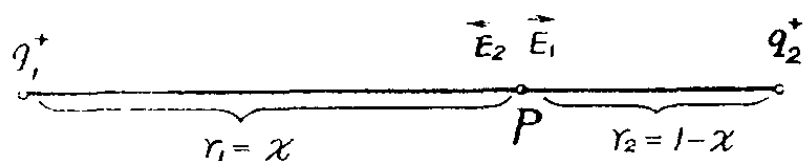


图 1 q_1 和 q_2 同号情形

$$E_p = \frac{q_1}{\epsilon r_1^2} - \frac{q_2}{\epsilon r_2^2}$$

其中 ϵ 为介电系数。由 $E_p = 0$ ，即

$$\frac{q_1}{x^2} - \frac{q_2}{(1-x)^2} = 0$$