

计算物理学

马文淦 张子平 编著

中国科学技术大学出版社

计 算 物 理 学

马文淦 张子平 编著

301/201/16



中国科学技术大学出版社

1992 · 合肥

内 容 简 介

本书既阐述了物理问题中常用的数值实验模拟和计算方法,例如蒙特卡洛方法、有限差分法、有限元素法、快速富里叶变换、量子力学问题求解以及实验数据处理方法,也注重阐述计算机符号处理系统、符号处理语言及其在理论物理研究中的应用。并且针对核与粒子物理领域中理论与实验研究的需要,以矩阵元及全截面计算为例,介绍了计算机数值计算与符号运算整体化的应用。

本书可以作为高等学校物理类大学生和研究生的教科书,也可供物理领域以外的其他师生及科研工作者参考。

(皖)新登字 08 号

计算物理学

马文淦 张子平 编著

*

中国科学技术大学出版社出版

(安徽省合肥市金寨路 96 号,邮政编码: 230026)

安徽省金寨县印刷厂印刷

安徽省新华书店发行

*

开本: 850×1168/32 印张: 10 字数: 259 千

1992 年 9 月第 1 版 1992 年 9 月第 1 次印刷

印数: 1 — 2500 册

ISBN7-312-00356-7/O·114 定价: 3.35 元

目 录

第一章 绪论	1
§ 1.1 计算物理学的起源与发展	1
§ 1.2 计算物理学的研究内容	3
§ 1.3 计算物理学的研究方法	4
§ 1.4 计算物理学研究的特点及意义	7
§ 1.5 计算物理学在核及粒子物理研究中的应用	9
第二章 蒙特卡洛方法	12
§ 2.1 蒙特卡洛方法的基本思想和基本概念	12
§ 2.2 随机数与伪随机数	18
§ 2.3 准蒙特卡洛方法	25
§ 2.4 伪随机变量的抽样	30
§ 2.5 蒙特卡洛计算中减小方差的技巧	61
第三章 蒙特卡洛方法在核及粒子物理中的若干应用	70
§ 3.1 蒙特卡洛方法在定积分计算中的应用	70
§ 3.2 事例产生器	76
§ 3.3 粒子输运模拟	80
§ 3.4 实验设计中蒙特卡洛方法的应用	85
§ 3.5 程序检验和事例污染中的蒙特卡洛方法的应用	88
§ 3.6 利用实验数据检验理论及判断共振态的存在	90
第四章 有限差分法	94
§ 4.1 有限差分法的基本思想和方法	94
§ 4.2 二维电磁场泊松方程和拉普拉斯方程的有限差分法求解	102
§ 4.3 抛物型和双曲型偏微分方程的有限差分法求解	116
第五章 有限元素方法	128
§ 5.1 引言	128
§ 5.2 有限元素法的变分原理基础	129

§ 5.3	两维平面场有限元素法的计算格式	132
§ 5.4	非齐次边界条件下的有限元方程	141
§ 5.5	有限元素法与有限差分法的比较	143
第六章	实验数据处理的常用方法	145
§ 6.1	误差理论简介	146
§ 6.2	最大似然法	149
§ 6.3	最小二乘法	153
§ 6.4	假设检验	159
§ 6.5	求最小值的方法	160
§ 6.6	一元函数的插值	161
§ 6.7	二元函数的插值	164
§ 6.8	样条插值和样条拟合	166
第七章	几类量子力学问题的求解	172
§ 7.1	一维方势阱薛定谔方程的解	172
§ 7.2	径向薛定谔方程的求解	175
§ 7.3	能量本征方程的矩阵求解	179
第八章	快速富里叶变换	188
§ 8.1	引言	188
§ 8.2	快速富里叶变换	190
§ 8.3	快速富里叶变换应用一例	197
第九章	计算机符号处理	201
§ 9.1	引言	201
§ 9.2	符号处理系统的特点和功能	205
§ 9.3	符号处理的基础知识	209
§ 9.4	符号处理系统在高能物理中的应用	215
第十章	REDUCE 符号处理语言	225
§ 10.1	REDUCE 语言简介	225
§ 10.2	REDUCE 的程序结构	227
§ 10.3	REDUCE 语句	235
§ 10.4	代换指令	238
§ 10.5	过程	241

§ 10.6	控制选择	243
§ 10.7	文件处理命令和会话命令	248
§ 10.8	矩阵运算	250
§ 10.9	高能物理计算	252
第十一章	高能物理过程的矩阵元和截面的计算	257
§ 11.1	费曼图与费曼规则	257
§ 11.2	矩阵元的计算	262
§ 11.3	截面计算	266
§ 11.4	相空间积分的数值计算	271
附录 A	一些常用的计算程序	285
A.1	高斯消去法解代数方程组	285
A.2	列主元高斯消去法	286
A.3	解三对角方程组的“追赶法”	287
A.4	超松弛迭代法	288
A.5	约当法求解线性方程组	290
附录 B	VAXIMA 语言简介	296
B.1	VAXIMA 系统的一般知识	296
B.2	VAXIMA 系统的基本指令	300
B.3	VAXIMA 语句	311

第一章 绪 论

计算物理学是英文“Computational physics”的中译文，通常人们也把它等同于计算机物理学(Computer physics)。它是一门新兴的边缘科学，是物理学、数学、计算机科学三者相结合的产物。如果要给计算物理学下一个定义的话，可以这样来概括：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。计算物理学也是物理学的一个分支，它与理论物理、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。

计算物理学作为一门新的学科，它必须具有其研究内容、方法上的特殊性。计算物理的基本学科特征是什么？它与理论物理、实验物理有什么区别和联系？计算物理学是怎样发展产生的？它在核及粒子物理研究中所占据的重要地位以及对其它学科所产生的影响，这就是本章要介绍的内容。

§ 1.1 计算物理学的起源与发展

本世纪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。这样计算机在物理学研究中的应用就成为不可避免的了。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，迅速将这种方法推广运用到物理学的其它领域，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等，而且还应用到气象预报、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，国际上为报导这些领域的研究成果相继召开了学术会议、出版发行书刊。1963年利沃莫尔(Livermore)实验室的伯尼、奥尔德(Berni, 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；1966年伯尼、奥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。中国的《计算物理》杂志(Journal of Computational Physics Sinica)于1984年9月正式出版，它是反映国内在该领域内最新研究成果的一个综合性学术刊物。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、快速富里叶(Fourier)变换，随机数产生、统计分析，实验数据的作图分析、量子场论计算等，它们都非常适宜于物理研究的需要。从60年代开始，一些先进国家研制计算机化的数据库获得成功，大量数据可以存贮在占空间很小的磁带、磁盘乃至光盘上，而且存贮、检查和更新都十分方便。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。由此可见,计算机,特别是大型快速计算机的出现,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。

在60年代以前计算机主要用于物理问题的数值计算和模拟。而到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和理论解析运算自动化方面。特别是在核及粒子物理实验研究中,目前离开了计算机就不可能进行高能粒子核子加速器和探测仪器的设计和实验的进行。因为对于价值昂贵的实验设备,没有事先计算机的辅助设计、实验过程模拟来对实验装置进行评估,就可能造成极大的经济损失;而对物理过程十分复杂、数据采集和处理的工作量极大,精度要求又高的实验,也必须采用来作在线控制和对数据的计算机处理分析。在其它科学技术领域也是如此,计算机已广泛应用到实验数据的获取、处理和实验设备的监视控制等各个方面。可以预计今后随着计算机科学的发展、计算物理学的研究和应用会更广泛,更深入。

§ 1.2 计算物理学的研究内容

传统的物理学分为理论物理和实验物理(应用物理包括在内)两大分支。理论物理是从一系列的基本物理原理出发(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、静电作用规律以及电磁感应规律等),列出数学方程,再用传统的数学分析方法求出显式的解析解。通过这些显式解析解所得的结论与实验观测结果进行对比分析,用以解释已知的实验现象并预测未来的发展。实验物理是以实验和观测为基本手段来揭示新的物理现象,并为理论物理对其作进一步研究,发现新的理论规律提供依据,检验理论物理推论的正确性及应用范围。计算

物理则是计算机科学、数学和物理学这三者间的交叉学科或边缘学科。计算物理学研究的主要内容是要采用计算科学的方法，应用大规模高速计算机作为工具，去解决理论或实验物理范畴的极其复杂的问题。例如：在高能物理实验研究中，由于实验技术的发展和测量精度的提高，实验规模越来越大，实验数据量惊人地增加，被测事例在单位时间内的产额非常高，因而单靠人力和通常的电子仪器已无法完成实验设备的管理和实验数据的处理工作。又如电子反常磁矩修正的计算，对4阶修正的手工解析计算已相当繁杂，而对6阶修正的计算已包含了72个费曼图，手工解析运算已不可能完成。类似这样大量的复杂计算工作，计算机的应用就成为不可避免的了。计算物理学对解决复杂物理问题的能力，使它成为物理学的第三分支并在物理学研究中占有重要的地位。

计算物理学的研究内容涉及面很广，它渗透到物理学的各个领域，与理论物理、实验物理互相联系、互相依赖，相辅相成。计算物理学对实验物理而言，是要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，而实验物理研究也为之提供实验结果以验证其计算结果的正确性。对理论物理而言，计算物理研究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，而理论物理的研究也为计算物理研究提供了物理规律、数学方程，进而验证计算物理研究所计算的结果。总之计算物理学是与物理学的具体领域密切相关，并随着具体的研究领域的发展而发展。它为理论物理研究开辟了新的途径，也对实验物理研究的发展起了巨大的推动作用。

§ 1.3 计算物理学研究方法

计算物理学研究的出发点应该是被研究的物理对象。研究的第一步是要对问题进行分析，抓住一些主要因素，忽略各种次要因

素，建立起相应的物理、数学模型。这一点上与理论物理的作法极为相似。在物理、数学模型确定之后，就是要选择算法并使之在计算机上实现。

我们首先讨论算法。对确定的数学模型，可以采用数值或非数值计算来求解。这项工作就是计算数学讨论的主要内容，也是计算物理的基础。由于现代程序存储式通用数字电子计算机的内在特点，它实质上只能做比加法略微多一些的运算和操作。而从实际中由复杂的物理模型得到的数学模型往往是以代数方程、微分或积分方程等形式表示出来的。表面上计算机所提供的处理能力与我们所要求解的问题的差距是相当大的。沟通这一鸿沟的就是算法。算法可以简单地认为是在解决具体问题时，计算机所能执行的步骤。算法将一个复杂问题化为简单的，简单的再化为基本的，基本的再化为计算机能够执行的运算。算法选取的好坏是影响到能否计算出结果、或精度的高低或计算量的大小的关键。以复数乘法为例，假定 x, y 为两个复数，它们可写为

$$x = a + ib, y = c + id$$

欲求 xy ，我们可以采用两种算法，第一种算法如下式：

$$xy = (a + ib)(c + id) = (ac - bd) + i(bc + ad)$$

这种算法包含了 4 个乘法，1 个加法，1 个减法（实部和虚部间的加号是形式上的）。如果考虑到

$$(a + b)c + (d - c)a = ad + bc = \text{Im}(xy)$$

$$(a + b)c - (d + c)b = ac - bd = \text{Re}(xy)$$

我们则只需做 3 个乘法（其中 $(a + b)c$ 的结果用了 2 次），但加减法则增加为 5 个。后一种算法由于比前者节省了 1 个乘法而优越。这就是一个算法分析的简单例子。再以快速富里叶变换 (FFT) 为例：假设离散化了待处理的点数为 N ，普通富里叶变换算法需 $O(N^2)$ 次操作；快速富里叶变换则需 $O(N \log_2 N)$ 次操作。当 $N = 10^6$ 时，后者比前者要快 5×10^4 倍。一般说来，算法分析是计算机科学和计算数学的研究范畴，计算物理工作者只要引用他

们的结果即可。但是如果计算物理学家自己提出一个新算法，就仍有必要进行算法分析。

第二个问题是算法的误差问题。一般来说，所有数值计算方法都存在误差。误差是不可避免的。它的来源有以下四个方面。

首先，将实际问题归结为数学问题时，总要忽略一些主观上认为是次要的因素，加上这样或那样的各种限制。这种理想化的“数学模型”，实质上是对客观物理现象的近似粗糙的描述。这种近似描述本身就隐含着误差，这就是模型误差。

第二，数学模型中常常包含着一些通过实验测量得到的物理参数，如：物质比重、比热、电磁耦合常数等等，这些实验测量参数不可避免地带有误差，这种误差称为观测误差。

第三，在求解过程中，往往由于数学模型相当复杂而不能获得它的精确解；或者有些运算只能用极限过程来定义，而计算机只能进行有限次运算，这就必然引入了误差。这种误差是因为采用这样的数值求解算法而使运算结果与模型的准确解产生误差，因而也称方法误差，或截断误差。

例如，指数函数 e^x 可以展开为幂级数形式，

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots$$

如果采用这种幂级数展开式来计算 e^x 的值，我们不可能在计算机上计算无穷项，而只能截取有限项，求出

$$S_n(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$$

采用 $S_n(x)$ 作为 e^x 的近似值时，其截断误差为

$$R_n(x) = \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} e^{\theta x}, \quad 0 < \theta < 1$$

第四，由于计算机的有限字长而带来的误差称为舍入误差，也称为计算误差。在计算机上进行千千万万次运算以后，其舍入误差的积累也是相当惊人的。

上述四方面所产生的误差是我们在进行任何一项计算中都必须考虑的，从而根据实际精度要求选择和设计出好的计算方法。例如在采用蒙特卡洛(Monte Carlo)算法，我们已经知道它的误差与模拟次数的平方根成反比，而且误差带有随机性。在采用它之前，我们需要根据问题精度的要求，以一定的置信水平来确定模拟的次数，以期以该置信水平达到给定精度的要求。

最后一个问题是计算的收敛性和稳定性问题。粗略地说，收敛性主要是研究算法误差的变化问题。有时随着计算的进行，误差越来越大，达到完全不可靠的程度，这时的收敛性就差或者发散。稳定性则更关注于舍入误差的问题，这是由于计算机的有限字长而引入的误差。在一定条件下，两者又可以是关联的、等价的。两者的关系往往表现很复杂，要弄清所采用方法的收敛性和稳定性往往也是相当困难的。实际上在处理问题时，我们不可能等待解决了收敛性和稳定性之后再去计算，而是通过用计算机进行计算，结合理论对计算结果进行分析，再作出结论。

§ 1.4 计算物理学研究的特点及意义

对算法，误差以及收敛性、稳定性的研究也是属于计算数学的基本内容，计算物理学是在吸收了计算数学的研究成果的基础上，采用具有自身学科特色的研究方法。它在研究上的主要特点表现在：

1. 计算物理工作者在选用计算方法时更多的考虑是在算法和计算结果的物理意义上；而计算数学工作者更感兴趣的是算法的逼近价，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就与计算数学并不总是一致的。计算物理有时采用较简单可靠，物理意义清楚的算法，对复杂物理问题作各种近似。例如对非线性问题用一系列线性化的问题去逼近；非均匀介质用

一批小的均匀介质的组合去逼近；不规则几何形体用一批规则几何形体的组合来逼近等等。

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，而可以不拘于数学上经严格证明得到的计算方法，采用自身特有的方法。例如流体力学中的冯诺曼“人为粘性法”，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象采用蒙特卡洛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，计算物理采用从物理问题直接得到的原始差分关系来进行计算。这也称为“天然差分方法”。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，再人为离散化为差分方程。

4. 计算物理工作者在使用计算机分析整理大量计算数据的基础上，还需得出物理结论，这些结论最好是以某种解析形式的近似解来表达。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。

计算物理学是计算机在自然科学的应用中发展较早的学科之一。虽然它研究的对象是物理科学，但是它的研究方法可以推广到其它自然科学，甚至包括社会科学、思维科学、决策和管理科学等。计算物理学研究方法的特点和优点，甚至它的一些研究成果都可以去支持“计算科学学”中的其它分支领域的研究。作为一个例子，我们将反应堆中中子运动的计算思想用于社会科学中人口计算做简单的说明：

反应堆中的中子增减过程很类似于人口增减过程。中子引起的核裂变产生更多的中子，类似于人类结婚生子。中子被吸收类似

于人的死亡。中子逸出类似于人的出境。外面中子的入射类似于人的入境等等。计算物理工作者知道中子输运方程是一个偏微分积分方程。将这个思想用到人口问题上便应当也得到偏微分积分方程。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial N(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial N(x, t)}{\partial t} + \sqrt{2} \alpha(x, t) N(x, t) \\ &= s(x) \int_0^{\infty} \sqrt{2} \beta(x, t) N(x, t) dx + \sqrt{2} f(x, t). \end{aligned}$$

其中 $s(x) = \begin{cases} 1 & \text{当 } x=0 \\ 0 & \text{当 } x \neq 0. \end{cases}$

$N(x, t)$ 为在 t 时刻，年龄为 x 的人口数， $\alpha(x, t)$ 和 $\beta(x, t)$ 为死亡及新生系数。 $f(x, t)$ 为人口流入，流出数。从反应堆理论可知，不加反馈控制的堆临界的可能性为零。一般为超临界或次临界，即

$$N \sim N_0 e^{\lambda t}$$

$\lambda > 0$ 为超临界， $\lambda < 0$ 为次临界。不论哪一种情况都会对人口问题带来灾难的后果，即要么人口爆炸，要么种族灭绝。由此可见，对人口增减不加控制会造成历史性灾难。这反映计算物理学中一些已经成熟的知识 and 计算可以立即移植到社会科学中去。在其它方面的应用也可以探索。毫无疑问计算物理学的发展将对其它领域的计算机应用研究起重大的推动作用。

§ 1.5 计算物理学在核及粒子物理研究中的应用

核及粒子物理的研究是应用计算物理学极为广泛和深入的学科领域。从 60 年代起，计算机技术就已开始应用到物理实验中。1962 年，在低能物理实验中就实现了计算机与实验的联机工作。1964 年，在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，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。目前计算机在粒子物理实验中的应用可分为两个部份,即计算机的在线分析和离线分析。

在实验装置运行中由计算机实现数据获取和数据分析就称为实验的在线分析。在粒子物理实验中,在线分析的任务包括四个方面:

1. 控制系统运行。根据物理实验对物理事例的选择要求和对在线系统各构成部份的管理需要,设计一定的程序逻辑,采用计算机实现对整个在线系统运行的控制。

2. 采集实验数据。将探测器记录到的事例信息,加速器运行中的束流状态及某些仪器设备的工作状态信息,采集送入计算机,计算机又以规定的格式将这些实验数据记入到计算机的外部存储设备(磁盘或磁带)中。

3. 监测仪器状态。计算机定时或不定时地监视探测器工作状态的情况,加速器束流的流强变化等。一旦出现不正常情况,计算机将送出状态信息,通知值班人员,或自动作出预先规定好的处理。

4. 数据在线分析。在实验进行期间,对在线系统获取的数据信息,由计算机按各种方式进行取样分析。数据分析的范围是由在线系统的分析能力决定的。在一个能力较强的系统中,数据分析还包括按一定的物理要求对事例进行判别与选择,实现粒子作用事例的图象重建。这些分析的目的是为了观察仪器设备安排和事例选择方案的实施情况,以便在实验运行期间研究和发现问题,改善实验设计。

为了不丢失所有感兴趣的过程,在线分析中使用的判选条件是很松的。同时由于记录速度的要求,在线分析工作也十分简单。将实验数据作进一步的浓缩、过滤和分析是在实验装置外的计算中心进行的。对物理过程的理论模拟,探测器模拟,本底分析,理论与实验事例的分析、对照等都属于离线分析范畴。一般来说离线分析是分两部份工作来进行的。一个是事例模拟,另一

个是物理分析。事例模拟包括对所研究过程及可能形成该过程本底的背景过程的模拟。这个模拟过程是从理论模拟产生出终态产物的各物理参数(包括能量、动量、方向、粒子种类,……等)开始,再通过探测器模拟,得到格式与实验数据记录相同的模拟数据。探测器模拟包含了终态粒子通过实验装置时,在各探测器上留下的能量和时间的数字化信息。物理分析工作主要包括事例的径迹重建,各类事例的筛选和物理参数的分析。分析的数据对象既包括实验数据,也包括模拟数据。

另一个计算物理在核及粒子物理中应用的重要方面是理论研究领域。除了通常利用计算机进行数值计算外,还利用计算机进行非数值计算和公式推导。在核及粒子物理研究中目前已广泛采用计算机符号运算系统来处理高阶电磁-弱作用的费曼(Feynman)图计算。可用于核及粒子物理研究的计算机代数系统如SCHOONSCHIP, REDUCE, VAXIMA等,还发展了相应的用于高能物理研究的程序包,以用于计算机算费曼图。当前比较常见的工作方式是采用计算机数值与非数值计算相结合的方法来处理理论问题。这样可以解决一些对计算机符号运算来说也同样困难的问题计算,例如复杂的相空间积分运算。