

计算物理引论

编著：况蕙孙
蒋伯诚
张树发

JISUAN
WULI
YINLUN

湖南科学技术出版社

计算物理引论

况蕙孙 蒋伯诚 张树发 编著

湖南科学技术出版社

计算物理引论

况蕙孙 蒋伯诚 张树发 编著

责任编辑：曾平安

*

湖南科学技术出版社出版

(长沙市展览馆路8号)

湖南省新华书店发行 湖南省新华印刷二厂印刷

*

1987年7月第1版第1次印刷

开本：850×1168毫米 1/32 印张：14.875 字数：388,000

印数：1—2,800

ISBN 7-5357-0256-2/O·36

统一书号：13204·171 定价：4.75元

湖目86—22

序

JYI / 200 / 14

计算物理是物理学的新兴领域。它是一门以电子计算机为工具，应用各种数学方法来解决物理问题的应用科学。随着电子计算机技术的飞速发展和新技术革命的不断深入，计算物理已广泛地应用于自然科学研究的各个领域和工程技术的各个部门，且越来越显示出它的重要作用。为了促进计算物理学科在我国的发展，使计算物理更好地为社会主义“四化”建设服务，很有必要出版计算物理方面的书籍，以满足广大科技工作者的迫切需要。

《计算物理引论》一书，是作者根据自己多年来的教学和科研的经验积累，通过整理加工后而成的。该书从实际问题出发，由浅入深、循序渐近、分寸适宜，初学者易于理解和掌握。

本书在绪论中阐明了什么是计算物理，并对其特点、作用，以及它与理论物理、实验物理、计算数学和计算机软件的关系进行了概述。在绪论中还指出：计算方法的选择对计算效果影响极大。由于计算方法的选择不当，甚至可以导出谬误的结果，也可以将能算的课题转变成不可能算的课题。这就澄清了这样的模糊认识，即以为“有了正确的物理设想和数学描述，只要算，便能得出正确结果”的这种观点是错误的。实际上，在计算一个复杂的物理问题时，往往需要物理、数学和软件程序往返交织试运算，排除不

合理的环节（有数学上的，有程序上的，也有物理本身上的），经过艰苦的研究才能达到目的，并非一目了然，简单易行。缺乏正确的认识，往往使得计算技术不能在具体物理问题中发挥其应有的作用，或者使计算工具闲置起来。作者以其切身体验，在本书内容中总结提出上述问题，是十分有益的。

本书介绍了物理学中常见的偏微分方程的数值计算方法及其在各种物理问题中的应用；并分别讨论了初值和边值的处理方法；还用实际的例子来说明了计算过程的全貌和强调了要注意的几个重大问题，如误差、收敛性和稳定性等。这些问题在具体计算中是不容忽视的，否则，将困扰计算的顺利进行和计算结果的正确性。

该书以深入浅出的方法，从引用简易的例子入手，介绍了各种重要的计算物理方法：如有限差分法、变分有限元法、蒙特卡罗方法、快速傅里叶变换和矩阵计算等。并在实际算例中揭示了计算方法的实质，使读者印象较深，易于学习。

该书作者有其充实的物理知识，并在实际应用和科研工作中经受过严格的考验，又在教学上有丰富的经验。因此，书的内容切合实际要求，将会受到读者的欢迎和好评。

希望本书所述的成果与内容在进一步推广应用中获得成功，也希望本书自身的内容进一步地充实和提高，以求在计算物理领域中作出更大的贡献。

程开甲

1985年7月

前 言

本书初稿曾于一九八四年十一月提供“全国计算物理教材编辑与科普教育工作会议”交流。经会议讨论，推荐为理工结合型院校“计算物理”课程的试用教材，亦可供有关专业的师生和科技工作者参考。

本书基本内容已为国防科技大学应用物理系各专业高年级本科生和研究生讲授过多遍。现在出版的这本书，是在教学实践的基础上，再结合我们在科研中所作过的一些实际工作，经过加工整理后而成的。

计算机的发明是科学技术发展史上极为重要的事件，其意义完全可以与热机的发明和人类掌握电磁技术等事件相比拟。它已经对社会文明建设的进程带来了广泛而深入的影响，而且这种趋势还在发展。物理学在过去以自己的成就为计算机的发明和发展提供了最根本的技术基础，相信在未来，还会由于诸如半导体物理、现代光学等学科分支的新发展，而为新一代计算机的诞生提供更好的基础；另一方面，计算机特别是大型高速计算机的出现，又反过来对物理学自身的研究方法和发展进程提供了强有力的新工具，从而带来了重大的变化。计算物理这一新兴学科分支的出现和发展，便是明显的例证。因此，我们认为：新一代物理工作者，无论是从事基础研究或应用研究的，都应该有相当一部分人了解和掌握计算物理的概念和方

法，这对将来的工作无疑是大有裨益的。这就是我们撰写本书的主要目的。

本书侧重于偏微分方程的数值解法及其在物理学上的应用。我们假定读者已具备线性代数、数理方法和理论物理等方面的基本知识，并且对计算数学和计算机语言程序也已有了初步了解。在此基础上讨论抛物型、双曲型、椭圆型偏微分方程和偏微分方程组的各种数值解法，并且着重于数值计算和物理问题的结合，介绍物理上的各种应用。

由于计算物理学科发展很快，理论研究逐步深入，需要较深的数学知识，特别是在收敛性、稳定性问题的讨论中，愈来愈多地涉及现代数学，如近世代数、泛函分析等方面的一些内容。受篇幅限制，对这些内容，我们只给出有关结论。在应用方面，受我们实践经验的限制，本书只着重讨论了在热传导、流体力学、电磁场和粒子输运等宏观物理方面的应用；对微观物理，如原子分子结构、原子核物理、量子场论等方面，本书未作讨论。

本书的编著方案和主导思想是我们三人共同商讨后由况蕙孙确定的。第一章由况蕙孙和蒋伯诚合写，第二、三、四、五、六章初稿由蒋伯诚提供，第七、八章初稿由张树发提供，最后由况蕙孙同志整理、补充、修改后定稿。书中所用的计算实例以及某些程序，都是我们自己在实际工作中积累起来的。由于我们水平有限，错漏之处在所难免，敬请读者批评指正。

中国科学院学部委员程开甲教授审阅了全书，并写了序言；核工业部计算机应用研究所副研究员彭清泉同志也仔细地校阅了原稿，并提出了一些宝贵的意见；国防科技大学二系陈吉斌同志调试和验算了附录中的全部程序，并

校核了部分计算公式。对于他们的热情支持和辛勤劳动，
谨致深切的谢意。

作 者

一九八五年七月于长沙

目 录

第一篇 绪 论

第一章	计算物理的特征和研究方法	(1)
§ 1	计算物理的特征	(2)
§ 1—1	计算物理的起源与形成	(2)
§ 1—2	计算物理的性质与任务	(4)
§ 1—3	计算物理与理论物理和实验物理的关系	(7)
§ 2	计算物理的研究方法	(10)
§ 2—1	物理模型和数学模型的建立	(10)
§ 2—2	计算方法的选取	(13)
§ 2—3	数值计算的误差	(19)
§ 2—4	收敛性与稳定性	(23)
§ 2—5	计算物理方法的特点	(26)
§ 2—6	编制程序和上机计算中值得注意的若干问题	(30)
§ 2—7	计算结果的分析与结论	(32)

第二篇 数学物理方程的数值解法

第二章	抛物型方程的差分解法	(35)
§ 1	差分格式的建立	(36)
§ 2	差分格式的稳定性	(43)
§ 2—1	问题的提法和初步分析	(43)
§ 2—2	稳定性条件	(48)
§ 2—3	分离变量法	(52)

§ 3	多维问题和交替方向法	(57)
§ 3—1	二维抛物型方程的差分方法	(58)
§ 3—2	P—R格式	(60)
§ 3—3	Douglas格式	(62)
§ 3—4	预校格式	(64)
附录	离散方程的系数矩阵的特征值计算	(65)
第三章	双曲型方程的解法	(67)
§ 1	预备知识	(67)
§ 1—1	特征概念	(67)
§ 1—2	二阶双曲型方程与一阶双曲型方程组的联系	(70)
§ 2	线性双曲型方程的差分方法	(71)
§ 2—1	微分方程的差分逼近	(72)
§ 2—2	初值条件和边值条件的差分近似	(74)
§ 2—3	稳定性分析	(75)
§ 3	一阶双曲型方程的差分方法	(79)
§ 3—1	偏心格式 (迎风格式)	(80)
§ 3—2	Lax格式	(82)
§ 3—3	Lax—Wendroff格式	(83)
§ 3—4	Leapfrog格式	(84)
§ 4	双曲型方程组的差分方法	(85)
§ 4—1	显式格式	(86)
§ 4—2	隐式格式	(87)
§ 4—3	Lax格式	(90)
§ 4—4	Lax—Wendroff格式	(91)
§ 5	双曲型方程组的特征线法和特征—差分格式	(94)
§ 5—1	特征与特征上的微分关系	(94)
§ 5—2	特征—差分方法	(96)
§ 5—3	对方程组的推广	(101)
§ 6	非线性双曲型方程的解与线性双曲型方程的解的 本质区别	(105)
第四章	边值问题的差分方法	(109)
§ 1	常微分方程边值问题的差分方法	(110)

§ 1—1	差分方程的建立	(116)
§ 1—2	差分方程的可解性与收敛性	(112)
§ 1—3	解差分方程组的追赶法	(116)
§ 1—4	打靶法(shooting)简介	(117)
§ 2	二阶椭圆型方程边值问题的差分方法	(118)
§ 2—1	微分方程的差分逼近	(118)
§ 2—2	边界条件的处理	(121)
§ 2—3	离散方程的基本特征	(123)
§ 3	椭圆型差分方程组的迭代解法	(127)
§ 3—1	一般二阶椭圆型差分方程的迭代解法	(127)
§ 3—2	迭代法的收敛速度	(130)
§ 4	解Poisson方程的直接法	(134)
§ 4—1	离散傅里叶变换及其快速算法	(135)
§ 4—2	矩阵分解法	(144)

第三篇 计算物理基础

第五章	热传导问题的数值分析	(148)
§ 1	热传导方程与定解条件	(148)
§ 1—1	温度场、热流场与Fourier定律	(149)
§ 1—2	热传导方程	(151)
§ 1—3	边界条件	(155)
§ 2	定常热传导问题的数值分析	(160)
§ 2—1	算例	(160)
§ 2—2	守恒型差分格式	(163)
§ 2—3	非规则边界的三角形网格法	(170)
§ 3	非定常热传导问题的数值分析	(172)
§ 3—1	无限大平板内温度响应问题的数学模型	(173)
§ 3—2	边界条件的处理	(175)
§ 3—3	关于差分格式稳定性的讨论(物理解释)	(182)
§ 3—4	计算举例	(184)
第六章	非定常流体动力学的差分方法	(187)
§ 1	一维非定常流体动力学的差分方法	(188)

§ 1—1	守恒型方程的广义解(弱解).....	(188)
§ 1—2	一致差分格式.....	(193)
§ 1—3	间断的处理——粘性問題.....	(198)
§ 1—4	稳定性問題.....	(203)
§ 1—5	界面处理.....	(206)
§ 1—6	实例: 热激波在分层介质中的传播.....	(210)
* § 2	二维流体动力学差分方法简介.....	(221)
附录	流体动力学基本方程组.....	(231)
第七章	电磁场问题的数值分析	(239)
§ 1	物理基础与基本方程	(239)
§ 1—1	麦克斯韦方程组和洛伦兹力公式.....	(240)
§ 1—2	电磁场波动方程.....	(244)
§ 1—3	恒定电磁场.....	(246)
§ 1—4	带电粒子在静场中的运动.....	(247)
§ 1—5	旋转对称电磁场.....	(250)
§ 1—6	空间电荷效应.....	(254)
§ 1—7	带电粒子的发射.....	(256)
§ 2	电磁场计算的有限差分法.....	(257)
§ 2—1	轴对称电场的差分公式.....	(259)
§ 2—2	平面分布电场的差分公式.....	(263)
§ 2—3	边界条件的处理.....	(264)
§ 2—4	等位线、电位和场强的计算.....	(265)
§ 2—5	磁场的计算.....	(267)
§ 3	带电粒子轨迹的计算	(268)
§ 3—1	粒子运动方程的解法.....	(269)
§ 3—2	空间电荷密度的计算.....	(274)
§ 3—3	发射面形状与位置的确定.....	(277)
§ 3—4	粒子束的包络线及其他.....	(277)
§ 4	解电磁场问题的有限元法.....	(278)
§ 4—1	泛函及其变分.....	(279)
§ 4—2	一维场的有限元法.....	(284)
§ 4—3	二维场的有限元法.....	(291)

§ 5	计算举例: 强流相对论性电子束二极管的模拟 计算	(305)
第八章	粒子输运的数值模拟	(315)
§ 1	物理基础	(317)
§ 1—1	输运方程	(317)
§ 1—2	输运方程的定解条件	(318)
§ 1—3	等价的积分方程	(319)
§ 1—4	输运方程中的核函数	(321)
§ 1—5	问题分类和虚拟临界	(330)
§ 2	离散纵标法(SN法)	(334)
§ 2—1	多组近似	(335)
§ 2—2	离散纵标法的一般叙述	(336)
§ 2—3	一维平几何的离散方程	(341)
§ 2—4	一维球几何	(346)
§ 2—5	一般几何中的离散纵标法	(354)
§ 3	蒙特卡罗方法	(355)
§ 3—1	方法的基本原理	(356)
§ 3—2	MC方法的误差	(359)
§ 3—3	MC方法与粒子输运	(361)
§ 3—4	随机变量抽样值的产生	(363)
§ 3—5	应用例子	(380)
§ 4	计算举例	(390)
§ 4—1	SN法计算举例	(390)
§ 4—2	MC方法计算举例	(391)
	参考文献	(395)

附录	常用程序选编	(398)
(1)	超松弛迭代法	(398)
(2)	解三对角方程组的追赶法	(402)
(3)	全主元高斯消去法	(404)
(4)	求矩阵绝对值最大的特征值和特征向量的幂法	(408)
(5)	解常微分方程组的初值问题的改进欧拉法	(410)

- (6) 解常微分方程组的初值问题的龙格—库塔法.....(413)
- (7) 解常微分方程组的初值问题的哈明方法.....(417)
- (8) 一维复数据的快速傅里叶变换算法.....(422)
- (9) 二维复数据的快速傅里叶变换算法.....(426)
- (10) 解一维抛物型方程的Crank—Nicolson法.....(431)
- (11) 解二维抛物型方程的交替方向法.....(436)
- (12) 解椭圆型方程的超松弛迭代法.....(443)
- (13) 解泊松方程的矩阵分解法(448)
- (14) 解一维非定常流体力学方程组的拉格朗日法.....(454)

第一篇 绪 论

第一章 计算物理的特征和研究方法

什么是“计算物理”？也许有人会顾名思义地说：“通过计算求解物理问题，就是计算物理。”这话似乎有理，但仔细考究，却是不严格、不确切的。理论物理的研究离不开计算，实验物理中的数据处理要通过计算，即使做个普通物理习题，一般也要作些简单的计算。如果说，通过计算求解物理问题就是计算物理，那么，人们就可能误认为从物理学一开始就应该有计算物理这一分支；或者，根本就无所谓计算物理。这显然是不符合实际的。

任何一门学科都有其自身的特征、目的、任务和研究方法，学科的划分主要就在于矛盾的特殊性。计算物理，作为研究物理学的一门新兴学科，它有何特征？它与理论物理和实验物理到底有什么区别？什么时候才开始有计算物理这门学科的呢？在学习和研究计算物理的时候，首先应该对它有个基本的认识。

§ 1 计算物理的特征

§ 1—1 计算物理的起源与形成

传统的物理学分为理论物理与实验物理两大分支。

理论物理是从一系列基本原理，如各种运动定律、守恒定律、各种物质间的相互作用原理等出发，列出数学方程（较多的是微分方程，此外，也有积分方程和代数方程等），并用传统的数学分析方法求出显式的解析解；然后，利用这些解析解所得的结论与实验观测的结果相比较，解释物理现象，预见运动的发展，指导具体实践。

实验物理则是从实验观测出发，发现新的物理现象，为理论物理提供新的物理规律的素材，检验理论物理的假设或理论的正确程度和适用范围等。

这两大分支相辅相成地推动着物理科学的蓬勃发展。然而，无论是理论物理还是实验物理，都离不开数值计算。利用复杂的数值计算来解决物理科学的问题是有长久历史的，如海王星的发现及其轨道计算就是一个典型的例子。此外，象R. D. Hartree对原子结构问题，W. Heitler与F. London对分子构造问题等，早在本世纪二十年代初，便做了大量的数值计算工作。但由于当时仅仅是使用人力或简单的计算工具，其功能和效率都极为有限，所以，在那时候，计算物理还不可能成为一门独立的学科。新的学科总是随着科学技术的发展和时代的需要而出现的。

本世纪四十年代初，由于战争的需要而发展起来的核武器研制工作，美国科学家们研究的由流体动力学过程、核反应过程、中子输运过程、辐射输运过程和物态变化过程等交织在一起的一系列问题，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，这需要在短时间内进行大量复杂的数值计算。这样，计算机的应用便提上日程。1944年，世界上第一

台“自动序列受控计算机”(即Mark I)制成,它的主要部件是普通的继电器,速度仅每秒3次加法。但由于它能“不知疲倦”地连续工作,在美国原子弹研制中起了重要作用,因此,在Los Alamos实验室的历史上专为它写了一页。1946年初,世界上第一台电子管计算机ENIAC投入运行,速度为每秒5000次加法。电子计算机的出现,为计算物理奠定了物质基础,从此,物理问题的计算与计算机相互促进,开始蓬勃发展。1950年,全世界还只有15台计算机,到1962年9月,仅美国就装备了16000余台。科学家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应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、统计物理和基本粒子物理等等,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,报道这些领域的研究成果的书刊相继出版发行。1963年,美国Livermore实验室的Berni、Alder等人开始编辑出版《计算物理方法》丛书(*Methods in Computational Physics*),内容包括统计物理、量子力学、流体力学、核物理、天体物理、固体物理、等离子体物理、受控热核反应和地球物理等各个方面,已出版了17卷;1966年,《计算物理杂志》(*Journal of Computational Physics*)在美国创刊,至今已出刊50多卷;1969年,《计算物理通讯》(*Computer Physics Communication*)在西欧创刊,至今也已出刊30余卷。与此相应的专为计算物理工作者服务的许多程序库和数据库也相继建立。例如,据报道,欧洲联合核子研究所CERN计算中心的标准程序库,到1980年底已有350多个程序包,1500个子程序。内容包括数学物理的特殊函数、实验数据的作图分析、线性代数、数值积分、快速傅里叶变换、随机数产生、统计分布等,都非常适宜于物理研究的需要。从六十年代开始,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、检索和更新都十分方便。仅以核数据为例,据国际原子能机构(IAEA)的