

WULIXUEZHONG DE SHUZHISUAN
FANGFA YU YINGYONG

中小学教师
继续教育用书

物理学中的数值计算 方法与应用

赵超先 编著



东北师范大学出版社

中小学教师继续教育用书

WULIXUEZHONGDESHUZHISUAN
FANGFAYUYINGYONG

■ 东北师范大学出版社
长 春

物理学中的数值 计算方法与应用

■ 赵超先 编著

图书在版编目 (CIP) 数据

物理学中的数值计算方法与应用/赵超先编著. —长春:
东北师范大学出版社, 2002.4

ISBN 7 - 5602 - 3002 - 4

I. 物... II. 赵... III. 物理学—数值计算—计算方法—
师资培训—教材 IV. 0411

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2002) 第 024619 号

☐ 出 版 人: 贾国祥

☐ 责任编辑: 王忠山 ☐ 封面设计: 未 名

☐ 责任校对: 方 军 ☐ 责任印制: 张允豪

东北师范大学出版社出版发行
长春市人民大街 138 号 (130024)

电话: 0431—5687213

传真: 0431—5691969

网址: <http://www.nnup.com>

电子函件: sdcbs@mail.jl.cn

东北师范大学出版社激光照排中心制版

长春市绿园区教育工会印刷厂印刷

2002 年 4 月第 1 版 2002 年 4 月第 1 次印刷

开本: 850mm×1168mm 1/32 印张: 5 字数: 110 千

印数: 0 001 — 3 000 册

定价: 6.00 元

序

物理学作为自然科学的基础，对于人类物质文明的进步起了重要的推动作用，它在 21 世纪，无疑仍然是整个科学技术领域的带头学科。

物理学使人们受到科学态度、科学精神和科学思维的熏陶。就科学教育而言，不重视物理教育和普及的民族将在世界上处于落后地位。随着科技进步和社会的发展，教育改革已成为全球的浪潮，物理教育改革同样得到了人们的普遍关注。它的范围从基础教育到高等教育，包含了培养目标、教育理念、教学内容、教学方法、教学手段、课程设置等诸多方面，而教学内容和课程体系改革又是重点和难点。

就普通物理的教学而言，已经出版了不少面向 21 世纪的课程教材，其中，北京大学赵凯华先生和中山大学罗蔚茵先生的《新概念物理学》，南京大学卢德馨先生的《大学物理学》，皆有较大的影响；此外，涉及交叉学科领域的教材或专著也有一些。然而，把计算物理列入物理专业课程改革体系的作品，较为少见。随着科学研究的深入和计算机技术的发展，计算机的应用与计算物理的发展受到愈来愈大的重视。物理专业的学生应该懂得基本的数值计算和计算软件的应用。赵超先老师的这本书正是适应这个需

要编著的。

赵超先老师从事物理教学与科研多年，她编著的这本书推陈出新，各章编写从物理实例到理论计算，使学生置身于数值计算的动态环境中。她不但注意到创新，而且注意到可接受性，让学生在学中做，在做中学，从实践中掌握知识。本书不少章节的内容，是以专题的形式切入的，既扩大了学生的视野，又激发了他们的学习的兴趣，令人耳目一新。

本书是多年教学科研的结晶，既新颖独到，又脚踏实地，可作为物理系学生的选修课教材，亦可作为在职教师参考读物。相信随着科学技术的发展和实践经验的积累，它的内容会日臻完善。

王泽农

2001年8月28日

前 言

随着计算机技术的飞速发展，物理学的一大分支——计算物理学已经在物理学的研究和发展中起着越来越重要的作用。由于计算物理学的性质、研究方法和它所需要的设备与实验物理和理论物理之间有着明显的差异，因而逐渐形成物理学的一个独立分支。许多著名的物理学家认为，计算物理现已是与理论物理和实验物理并列的现代物理学的三大支柱之一。

科学技术的发展使所研究的体系越来越复杂，例如，从研究具有较少自由度的体系到研究具有较多自由度的体系，从对标量系统的研究扩展到对矢量或张量系统的研究，从线性系统发展到非线性系统的研究。复杂性是科学进展的必然结果，问题的复杂性使解析方法失去了原有的威力，而数值计算或计算机模拟实验往往是惟一可能的方法，计算物理学的产生和发展也就成了必然趋势。

20 世纪 60 年代，物理学对混沌孤子等的研究取得了突破性的进展，开创了非线性领域研究蓬勃发展的局面。物理学的很多方面已向非线性发展，如非线性光学、非线性声学等。传统的研究方法已受到严峻的挑战，因为用传统方法讨论非线性问题，只能讲方程建立、用小参量展开研究弱非线性问题和给出一些定性

结果。一般来说,非线性方程没有求解析解的通用方法,只能用计算机求数值解。

计算物理学在凝聚态物理方面发挥了极大的作用,特别是在探索各种材料的原子结构和电子结构方面,无论是实验研究还是理论研究都是不可或缺的。对于对称性破缺的不完整固体,例如固体表面,电子态的物理模型的研究将归结为求解 200 阶以上的矩阵的特征值问题,如果不借助电子计算机将一筹莫展。近年来新型材料的研究是一个相当活跃的领域,但也要涉及大原胞的计算。因此,提高计算能力、革新计算技巧,已成为凝聚态物理理论研究的迫切需要。

此外,诸如流体力学、薛定谔方程和狄喇克方程在非中心或多体条件下的求解、广义相对论的偏微分方程组求解等等,都要借助计算机进行研究。

计算物理不仅为理论研究开拓了新的途径,而且使实验研究进入了新的阶段。实验结果必须同理论计算曲线相比较,才能对实验曲线给出满意的解释,另外,对实验数据作数学处理,也是计算物理的内容。

为适应 21 世纪科技发展的需要,当物理教学的内容不断更新,不断接触到科学发展的前沿时,区别于传统的物理学研究方法的这种新的方法——物理问题的数值计算和计算机模拟,也应列入教学内容。

本书可作为在职中学物理教师、在校本科生接触计算物理这一物理学新分支的入门教材或参考书,他们大多学过一门计算机语言,具有一定的编写基本程序的能力。

本书对常遇到的一些数值计算方法作简明的介绍,但只介绍方法本身和它们的应用,而对这些方法的推导和严格论证则一般不作深入讨论。这样做的目的是让读者在数值计算方法方面有一个初步概念和处理一些简单问题的能力。本书对一些具体的物理

问题，应用所介绍的数值处理方法进行较深入的讨论，有些并给出编程的流程图和结果，以给读者一些切实的体验。

由于作者水平有限，加之编写时间仓促，书中错误在所难免，诚恳希望广大读者给予批评指正。

编 者

2002 年 4 月

目 录

第一章 绪 论 / 1

- § 1.1 计算物理学概况 / 1
 - 一 计算物理的起源 / 1
 - 二 计算物理的性质和任务 / 2
 - 三 计算物理、理论物理和实验物理的关系 / 3
 - § 1.2 物理学中数值计算的研究方法 / 4
 - 一 物理模型和数学模型的建立 / 4
 - 二 数值计算的误差 / 5
 - 三 计算方法的选取 / 7
-

第二章 非线性代数方程的求解 / 8

- § 2.1 迭代法 / 8
- § 2.2 牛顿迭代法 / 11
- § 2.3 求代数方程根的其他方法 / 12
 - 一 割线法 / 12

二 牛顿下山法/13

三 求复根/15

第三章 线性代数方程组/16

§ 3.1 影响结果精确性的因素/18

§ 3.2 高斯消元法/20

§ 3.3 线性方程组的迭代解法/23

一 迭代法/23

二 高斯-塞德尔法/25

第四章 数值积分/27

§ 4.1 梯形求积公式/28

§ 4.2 辛普生公式/31

§ 4.3 牛顿-柯特斯公式/33

§ 4.4 龙贝格积分/35

第五章 插值和曲线拟合/37

§ 5.1 插值法/37

一 线性插值/38

二 拉格朗日插值多项式/40

三 有限差分的概念/41

四 等距节点牛顿插值公式/42

§ 5.2 数据的曲线拟合——最小二乘法/44

一 直线拟合——一元线性回归/45

二 m 次代数多项式拟合/47

第六章 常微分方程/49

§ 6.1 欧拉方法/50

§ 6.2 改进的欧拉方法/51

§ 6.3 龙格-库塔法/53

§ 6.4 线性多步法/55

第七章 偏微分方程/58

§ 7.1 偏微商与有限差分/61

§ 7.2 椭圆型偏微分方程/63

一 拉普拉斯方程的差分格式/63

二 泊松方程的差分格式/65

三 用差商代替偏微商的截断误差/65

四 边界条件的处理/66

五 差分方程的求解/67

§ 7.3 抛物型偏微分方程/68

§ 7.4 双曲型偏微分方程/69

第八章 蒙特卡罗方法/72

- 一 产品合格率的计算/72
 - 二 投针问题/73
 - 三 打靶游戏/75
 - 四 求解三维椭圆型偏微分方程的边值问题/76
-

第九章 科技应用软件简介/79

§ 9.1 MATLAB/80

- 一 MATLAB 的发展史/80
- 二 Matlab 语言的特色/81

§ 9.2 Maple/82

- 一 Maple 的工作窗口/83
- 二 符号运算/84
- 三 数值计算/85
- 四 图形功能/86

§ 9.3 Mathematica/86

§ 9.4 Mathcad/89

- 一 Mathcad 的工作窗口/90
- 二 数值计算/91
- 三 符号运算/91
- 四 绘图/92

第十章 混沌理论与计算机图像/93

§ 10.1 有关混沌现象的几个例子/93

- 一 三体问题/93
- 二 洛伦兹的“蝴蝶效应”/95
- 三 简单电子电路中的混沌/95
- 四 周期 3 意味着混沌/96

§ 10.2 一种弹簧振子的非线性振动混沌现象/97

§ 10.3 从倍周期分岔到混沌/103

第十一章 分形的计算机图像/107

§ 11.1 有关分形的一些概念/107

- 一 自相似/107
- 二 分形维数/109

§ 11.2 几种分形曲线的维数/113

- 一 柯赫(Koch)曲线及分形维数/113
- 二 谢尔宾斯基垫片/114

§ 11.3 用计算机作图来画分形曲线/115

- 一 柯赫曲线/115
 - 二 迭代函数系统(IFS)构造谢尔宾斯基垫片/117
-

第十二章 蒙特卡罗方法的应用/120

§ 12.1 蒙特卡罗方法计算积分/121

§ 12.2 蒙特卡罗方法在粒子输运等问题中的应用/128

第十三章 MATLAB 在物理问题数值计算中的应用/133

- 一 非线性方程 $f(x)=0$ 的解/133
 - 二 求解线性方程组/135
 - 三 定积分的数值计算/136
 - 四 微分方程的数值解/138
 - 五 用 MATLAB 绘电场图/140
-

参考书目/142

第一章

绪 论

§ 1.1 计算物理学概况

一、计算物理的起源

传统的物理学分为理论物理和实验物理两大分支。

理论物理是从一系列基本原理，如运动定律、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，用这些解析解所得的结论与实验观测的结果相比较，去解释物理现象，预见运动的发展，指导具体的实践。

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证据，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，推动着物理学的蓬勃发展。然而，它们无论谁都离不开数值计算。长期以来，数值计算一直是解决物理科学的问题的一种强有力的手段，如海王星的发现及其轨道计算就是一个典型的例子。此外，对原子和分子结构问题，早就有人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，其功能或效率都很低。

20 世纪 40 年代初，在核武器研制工作中，美国科学家研究的由流体动力学过程、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，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，需要在短时间内进行大量复杂的数值计算，这样，计算机的需要就是很迫切的了。1944 年，世界上第一台继电器控制的计算机问世。1946 年第一台电子管计算机 ENIAC 投入运行，速度为每秒 5000 次加法。从此，物理问题的计算与计算机紧密相关，为计算物理奠定了基础。科学家们从原子弹设计中使用计算机求解复杂问题得以成功而受到启发，将计算机推广应用到物理学的其他领域，如天体物理、大气物理、凝聚态物理、统计物理和基本粒子物理等。而且，还应用到气象预报、海洋、地震、化工甚至人体科学、经济科学等各个科技领域，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，内容包括数学物理的特殊函数、线性代数、数值积分、实验数据的作图分析、快速傅里叶变换、随机数产生、统计分布等。

计算机，尤其是大型高速计算机的出现，武装了物理工作者，使一门新的物理学分支形成，成长，壮大。

二、计算物理的性质和任务

电子计算机的发展给物理学的原有方法、计算和验证带来了革命性的变化，适用于电子计算机的离散化方法，如有限差分法、有限元素法、快速傅里叶变换等，得到越来越广泛的应用。计算机已不再被认为仅用来代替繁琐重复劳动的工具，而是成为一种解决过去无法解决的困难问题的有效途径。例如，著名的三体问题和多体问题、复杂结构的应力分析问题、非定常流体动力学问题、核反应堆设计和运行中的中子输运问题等，若用经典的解析

方法来研究，令人望而生畏，束手无策，而用电子计算机来进行数值分析和数值模拟，却是得心应手，应付自如。不仅如此，还将会有一些尚未被人们发现的物理现象在数值模拟中被发现。今后，随着计算物理的发展必将不断发现和解决各种重要的物理问题。所以可以说，计算物理学是伴随着电子计算机的出现和发展而逐步形成的一门边缘学科，是以电子计算机为工具，运用各种数学方法，探索和解决物理问题的一门应用科学。它通过物理模型、数值分析方法和计算机软件三者的综合运用，达到解决物理问题的目的。

三、计算物理、理论物理和实验物理的关系

理论物理经过长期的发展，已经建立了许多完整的理论和方法，求得了不少线性的、具有对称性的、自变量少的问题的解析解。但是，随着对自然界探索的不断深入，要求解决的问题越来越复杂。非线性、非定常及各种不规则的边界问题亟待解决，精度要求也越来越高。理论物理的解析方法，虽有其突出的优点，但远不能满足科技发展的需要。

在实验物理方面，随近代科技的发展，一些大型实验设备对解决问题的能力已大大提高，发挥了巨大的作用。但是，由于耗资、耗电量大、试验费用昂贵等原因，大型设备不可能很多，试验次数也受到限制，而且往往研制周期长，同样不能满足实际需要。

于是，为了弥补两者的不足，计算物理作为物理学中的一个新兴分支应运而生。有人说，计算物理是用计算机作为实现手段的实验物理，同时又是用计算机武装起来的理论物理。但是，计算物理也和其他学科一样，有它的局限性。

一方面，迄今为止，计算机只能用来求解物理理论的数学公式，得出实际问题所需要的数值结果，而对物理定律的建立和物