

计算物理学

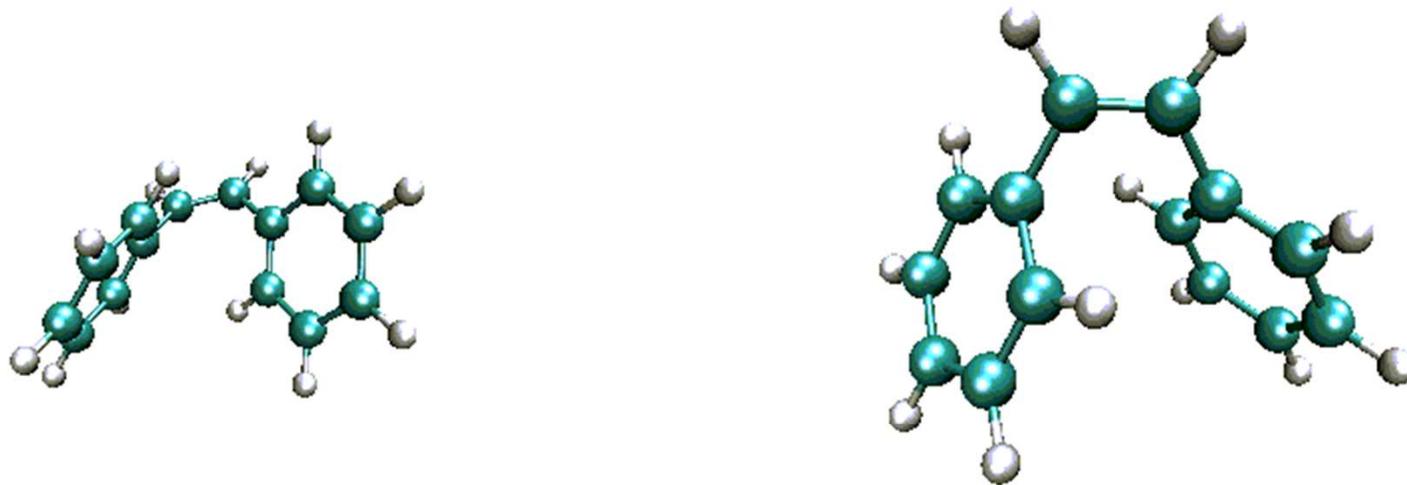
「美」 Steven E. Koonin 著
秦克诚 译

高等教育出版社

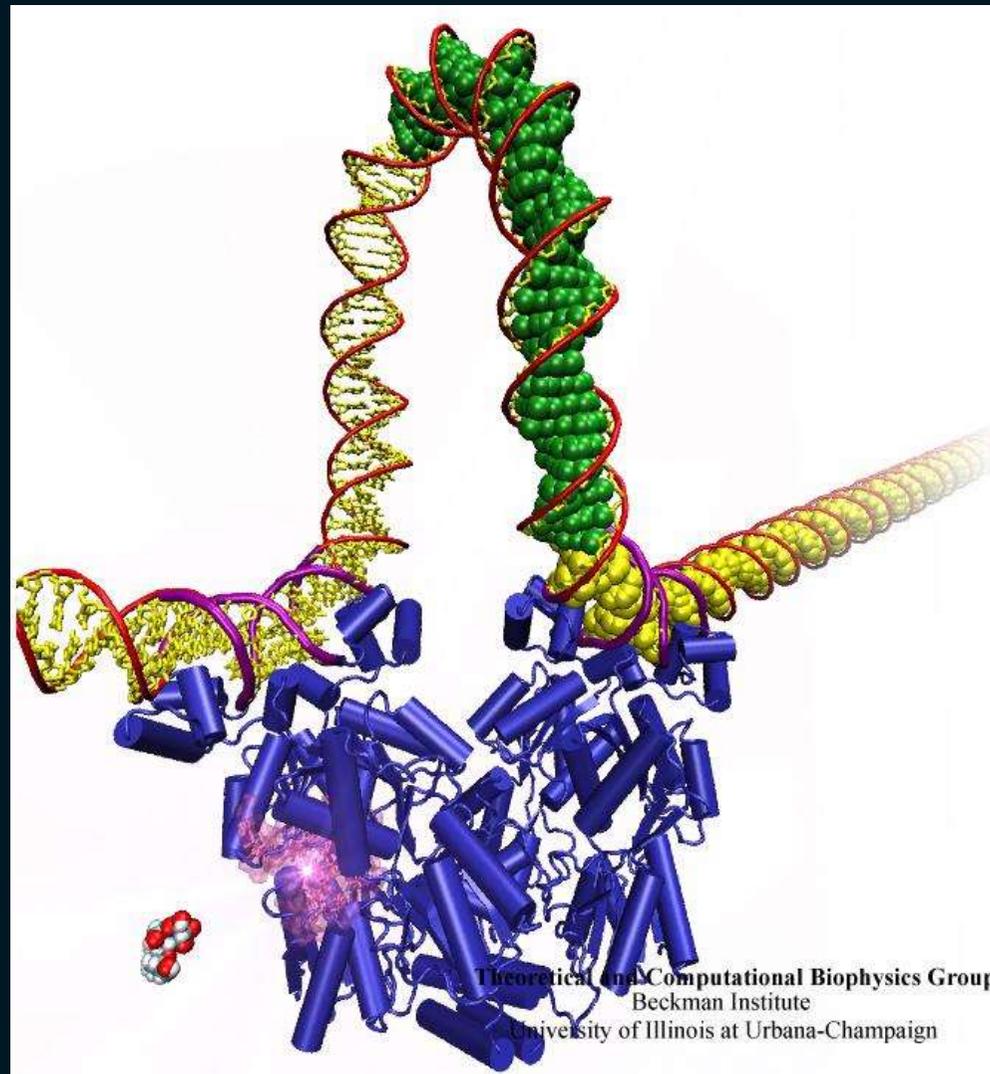
Computational Physics

徐忠锋

西安交通大学 物理学院

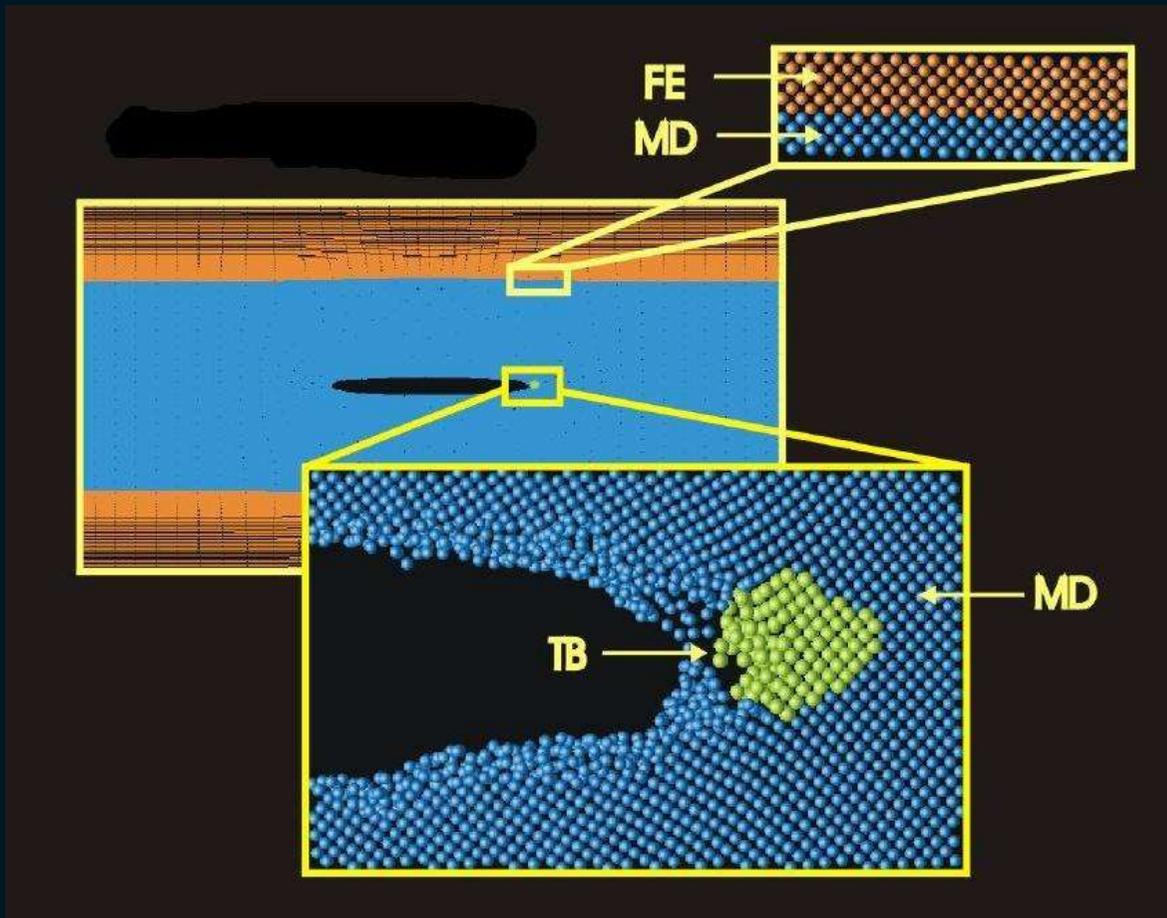


激光脉冲引起的二苯乙烯分子的异构化反应的
分子动力学模拟结果：(左)顺反异构化；(右)
顺顺异构化。分子动力学方法应用举例



蛋白质折叠的分子动力学模拟研究

314,000 atom simulation at UIUC



Modeling materials on different length scales:

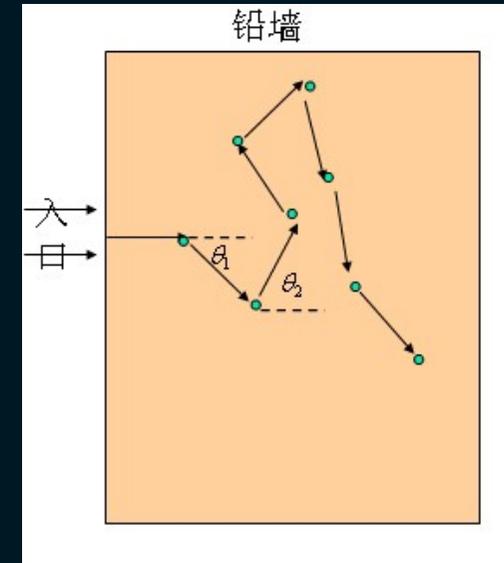
- quantum mechanics (tight binding)
- classical forces (molecular dynamics)
- continuum mechanics (finite element)

硅单晶中的断裂部位的传播
(分子动力学方法应用)

基于蒙特卡罗方法的中子屏蔽问题模拟

模型的建立

假设铅墙厚度为**5**，中子在铅中的平均自由程为**1**，中子与铅原子碰撞后各向同性散射。令碰撞**8次**后中子能量耗尽



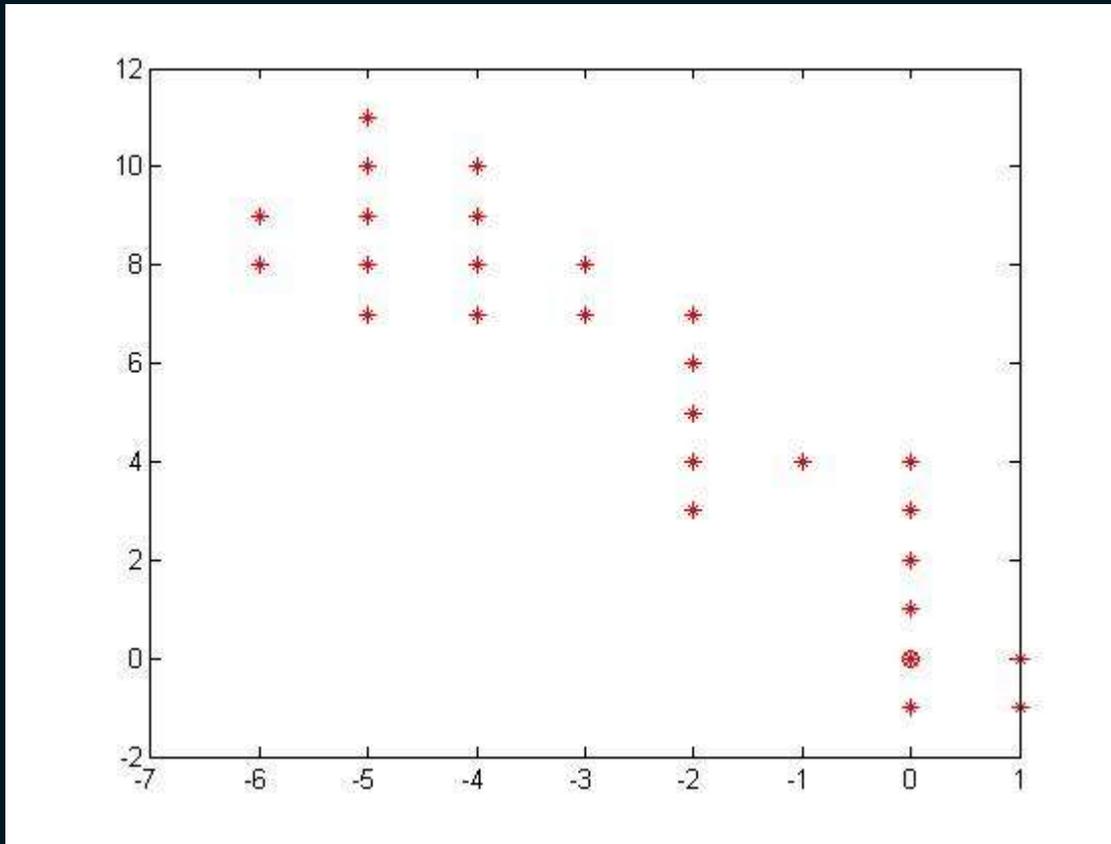
中子的水平位移**S**为

$$1 + \cos \theta_1 + \cos \theta_2 + \cos \theta_3 + \cos \theta_4 + \cos \theta_5 + \cos \theta_6 + \cos \theta_7$$

当中子的水平位移**S**大于**5**时，中子则穿透了铅墙；小于**0**时，则表明中子反射回来了；位移**S**的值在**0到5**之间时，则表示中子被铅墙吸收了。程序见**monte_carlo_neutron.m**

蒙特卡罗方法应用实例：随机行走问题

一醉汉从原点随机选择（上，下，左，右）方向开始移动，经过N步移动后（每步移动的距离为1），求距原点的距离



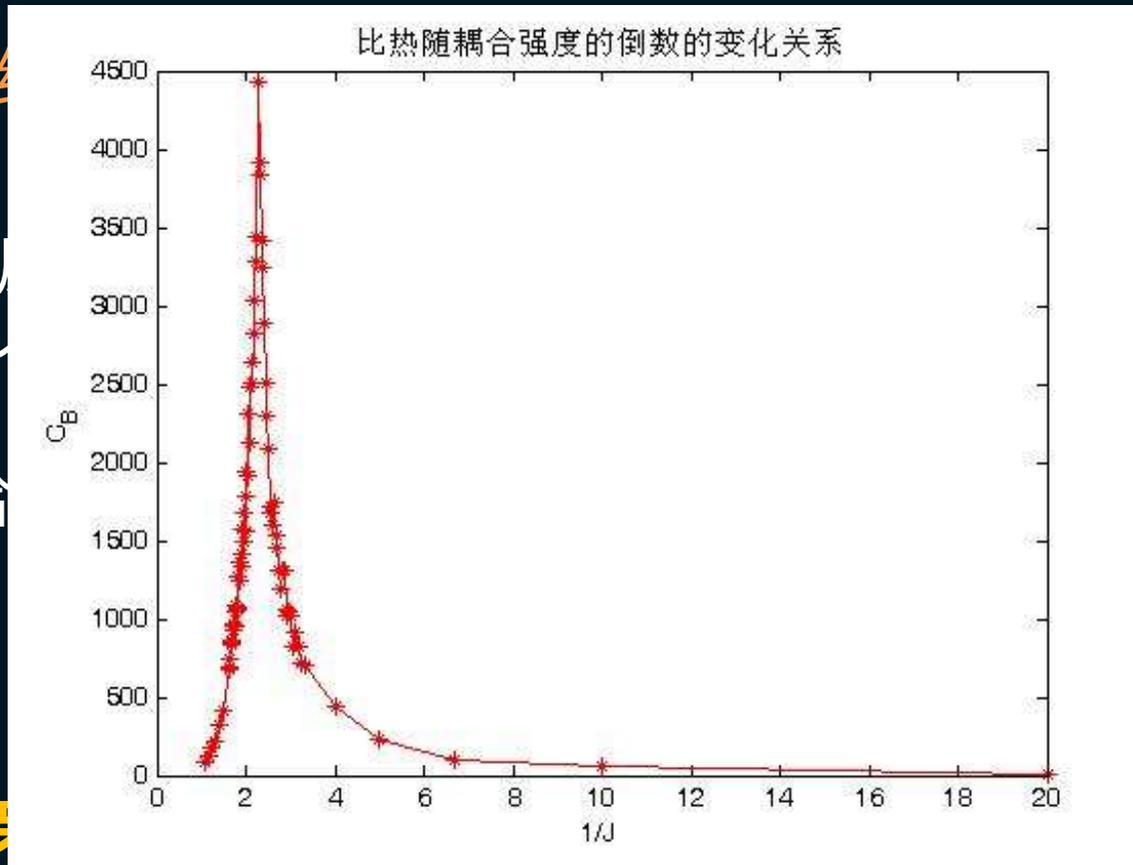
见Matlab程序
Random_walk.m

蒙特卡罗方法应用实例：Ising模型的数值求解

用磁学的语言来说，Ising模型是由一组自旋自由度组成，这些自旋自由度彼此相互作用并和一个外磁场相互作用。这些自旋自由度可以代表固体中原子的磁矩。

经典的二...
每个结点...
经典自由...
还存在一...
系统的哈...

蒙特卡罗



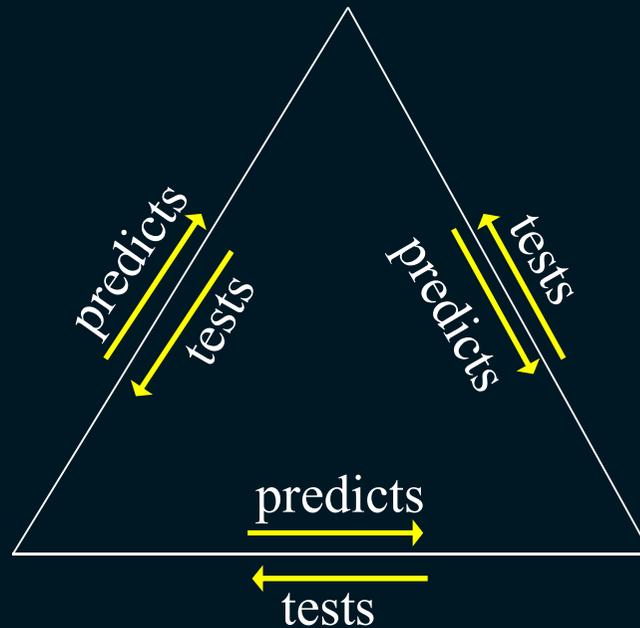
ny尺度) 上,
此处自旋为
作用, 此外

计算物理

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，解决复杂的物理问题的一门应用科学

Computational Physics

Performs idealized "experiments" on the computer, solves physical models numerically



Theoretical Physics

Construction and mathematical (analytical) analysis of idealized models and hypotheses to describe nature

Experimental Physics

Quantitative measurement of physical phenomena

一. 计算物理的起源与发展

- 20世纪40年代初，二战时期核武器研制中涉及的复杂问题，使得计算机介入物理学的研究在所难免
- 计算机的飞速发展
- 为报导计算物理领域的研究成果，召开学术会议、出版发行学术期刊
 - 1963年 Livermore实验室的Berni & Alder编辑出版 *Methods in Computational physics*
 - 1966年 美国的 Berni & Alder 主编创刊 *Journal of Computational physics*
 - 1969年 英国的 Burki 主编在西欧创刊 *Computer physics Communication*
 - 1984年9月中国出版《计算物理》杂志

二. 计算物理的研究内容和方法

- 程序设计语言
- 计算机算法
- (结构化) 程序设计
- 计算机解题过程

采用计算科学的方法，应用大规模高速计算机作为工具，解决理论或实验物理范畴的极其复杂的问题。

- 对理论物理而言
- 对实验物理而言

$$I(x) = \int_a^b e^{-x^2} dx$$

➤ 研究的**首要问题**是建立起相应的物理、数学模型，选择算法并使之可在计算机上实现

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_1^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = 0.1573$$

见Harmonic_integration.m

➤ **第二个问题**是算法的误差问题

谐振子处于基态时在经典禁区外出现的概率

- **模型误差** —— 次要因素的忽略、各种限制等
- **观测误差** —— 模型中常包含一些通过实验测量而获得的物理参数。如：比重、比热等等

- **方法误差** —— 数学模型一般相当复杂，不能获得其精确解，或有些运算只能用极限过程定义，而计算机只能进行有限次运算(**截断误差**)

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \Rightarrow S_n(x) = \sum_{i=0}^n \frac{x^i}{i!}$$

- **舍入误差** —— 计算机的有限字长(**计算误差**)
- **最后一个问题**是计算的**收敛性**和**稳定性**问题
收敛性主要研究算法误差的变化问题，
而稳定性则更关注于舍入误差的问题

如何评价一个算法的好坏

- 计算结果的精度，即误差大小
- 得到结果需要付出的代价 —— **时空复杂性**

例: $P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$

直接计算

计算量: 乘法: $x^i: 2 \sim n$, $n-1$ 次 x^i 与系数相乘: n 次
 加法: n 次

存储量: $x^i: n$ 个 系数: $n+1$ 个

计算量: 共 $2n-1$ 次乘法, n 次加法 存储量: $2n+1$

秦九韶算法

$$P_n(x) = (\cdots ((\underline{a_n x + a_{n-1}})x + \cdots + a_1)x + a_0$$

计算量: 1 次乘法和 1 次加法, 共 n 个括号

存储量: $x^i: 1$ 个 (x) 系数: $n+1$ 个

计算量: 共 n 次乘法, n 次加法 存储量: $n+2$

三. 教学计划

◆ 教材

主要参考教材:

《计算物理学》 [美] Steven E.Koonin 著 秦克诚 译
高等教育出版社

◆ 参考书:

- ✓ 《计算物理学》，顾昌鑫，复旦大学出版社
- ✓ 《An Introduction to Computational Physics》, Tao Pang, Cambridge University Press
- ✓ 《精通Matlab R2011a》，张志涌，北京航空航天大学出版社。
- ✓ 《计算机模拟方法在物理学中的应用》，Harvey Gould等，高等教育出版社
- ✓ 《计算物理基础》，彭芳麟，高等教育出版社

◆ 答疑 每周X晚上 7:00 — 9:00，创新港4-3131/3129
QQ群

三. 教学计划

◆ 教学团队

徐忠锋 (16) 栗建兴 (12) : 负责算法理论讲授

弯峰 (6) 赵前 (6) : 负责课内外算例讲授及课堂、
课外编程计算, 过程化考核和结果考核

张啸林: 负责《思源学习空间》课程资源建设与维护

联系方式:

徐忠锋: 133 0929 8803

弯 峰: 157 7191 0192

赵 前: 189 3031 8061

栗建兴: 151 2927 3796

张啸林: QQ号1828805459

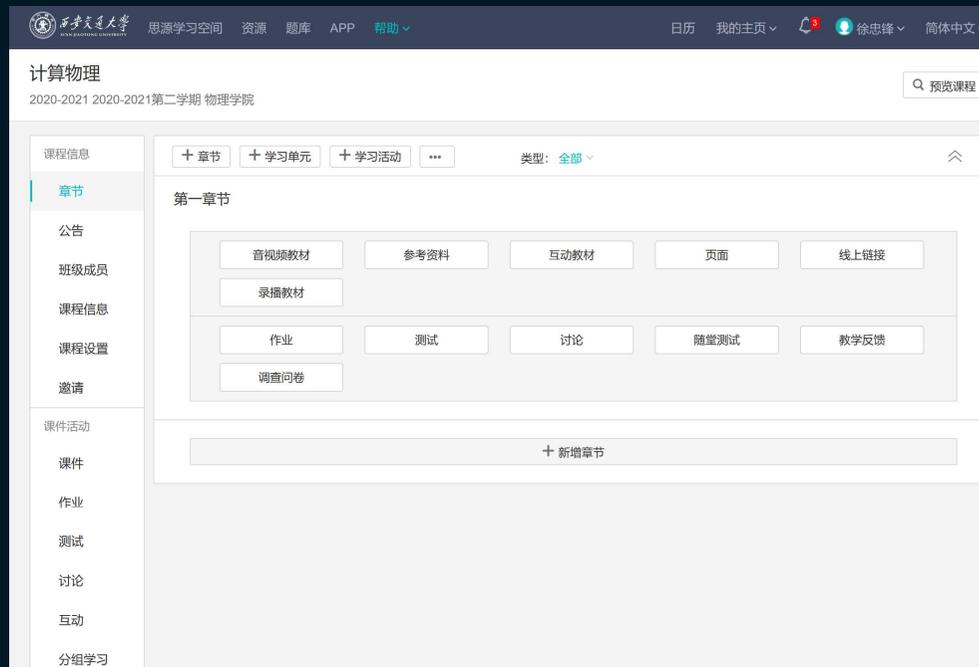
◆ 作业

课堂布置: 算法巩固与应用

算例: 3/5 (5个任选2个, 第十周上课前向弯/赵
老师报备)

◆ 学习资源

➤ 网址 <http://ispace.xjtu.edu.cn/course/7478/content#/>



- 教学资源与活动：思源学习空间
平时作业（课堂算法、5个算例）、大作业提交等
- 交流：QQ群



计算物理2021年春下

QQ群号：182538111

◆ 考核

类别	比例	说明
课堂作业	20%	每章布置算法作业
讨论课	10%	根据课堂讨论表现
算例	20%	5个算例任选2个，10分/个
大作业	50%	个人根据自己的研究方向选择

- ◆ 平时作业 — 以常用算法训练为主
- ◆ 讨论课 — 每位同学1次课堂算例展示
- ◆ 算例/大作业 — 每算例/大作业最多可3人合作，老师首先评定算例/大作业得分，即首位得分，排第2减5分，第三减10分；也可根据同学们提交时按分工任务设定的比例计算。如某算例/大作业得分90分，3人得分分别为：**方法一** 90/85/80；**方法二**（假设比例为**4:3:3**）100/76.5/76.5

《计算物理》教学内容及安排

章次	内 容	课内学时	课外学时
	绪论	2	
1	基本数学运算 (数值微分、积分、方程求根)	5	(4)
2	常微分方程的初值问题	5	(4)
3	常微分方程的边值和本征值问题	6	(5)
4	偏微分方程 (椭圆、抛物、双曲型方程)	4	(3)
5	Monte Carlo方法	6	(4)
6	分子动力学模拟	4	(2)
	算例: 双原子分子的振动能级 动力学中的有序和混沌 一维Schrodinger方程的定态解 一维含时Schrodinger方程的数值求解 二维 Ising 模型	8	(8)