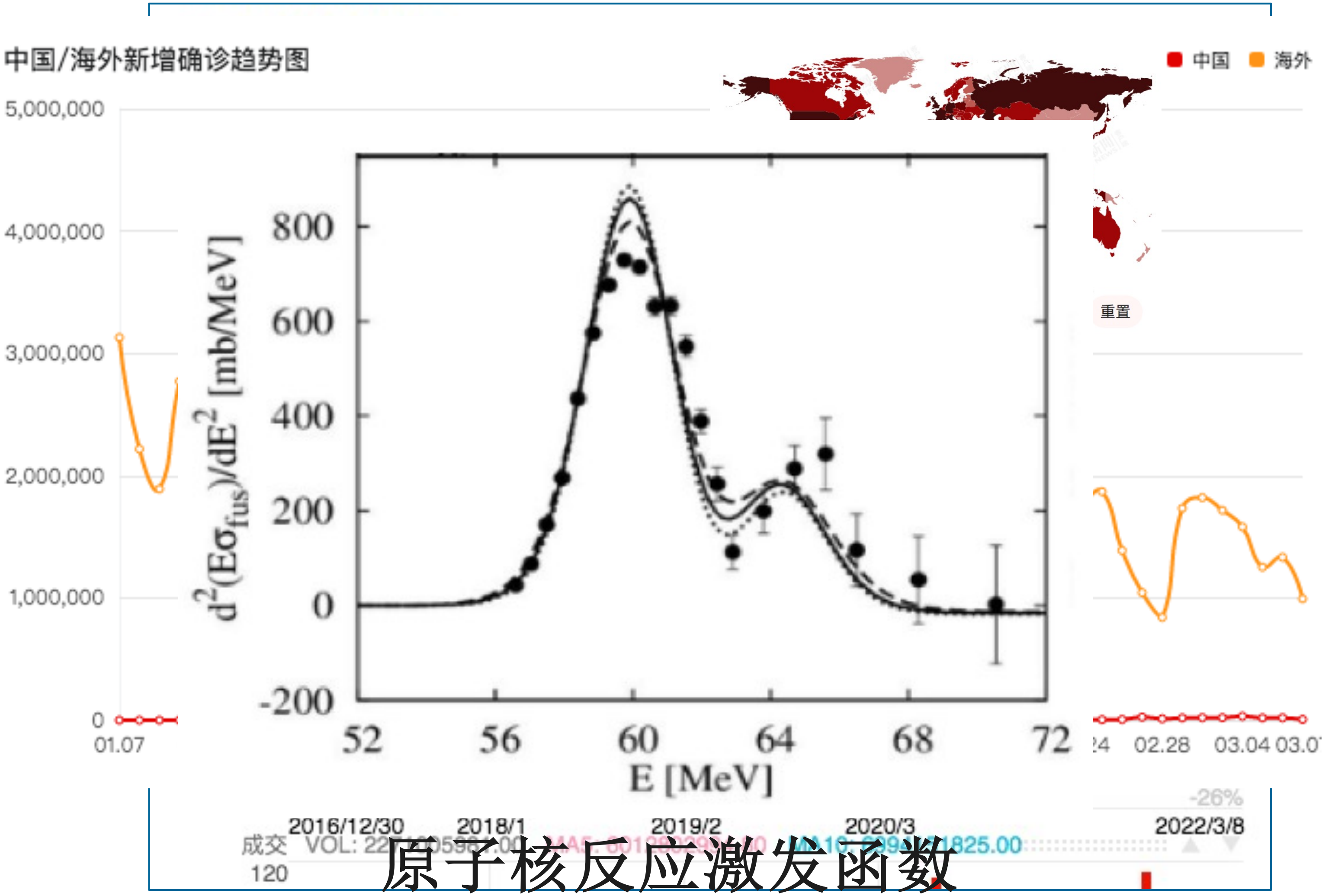
计算物理·数值计算

李文飞
南京大学物理学院
E-mail: wfli@nju.edu.cn

2025-03-5

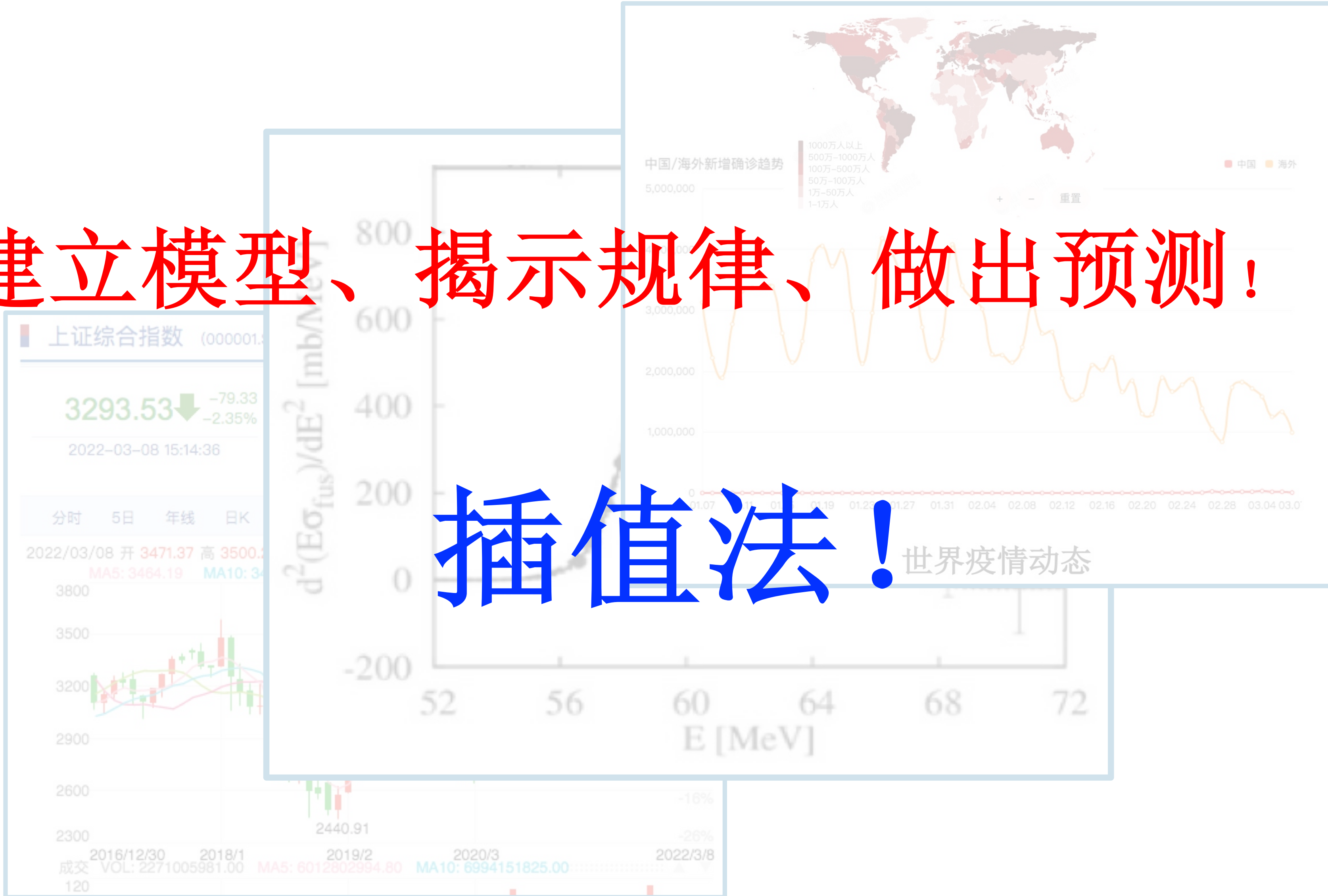


原子核反应激发函数

中国与海外新冠疫情动态

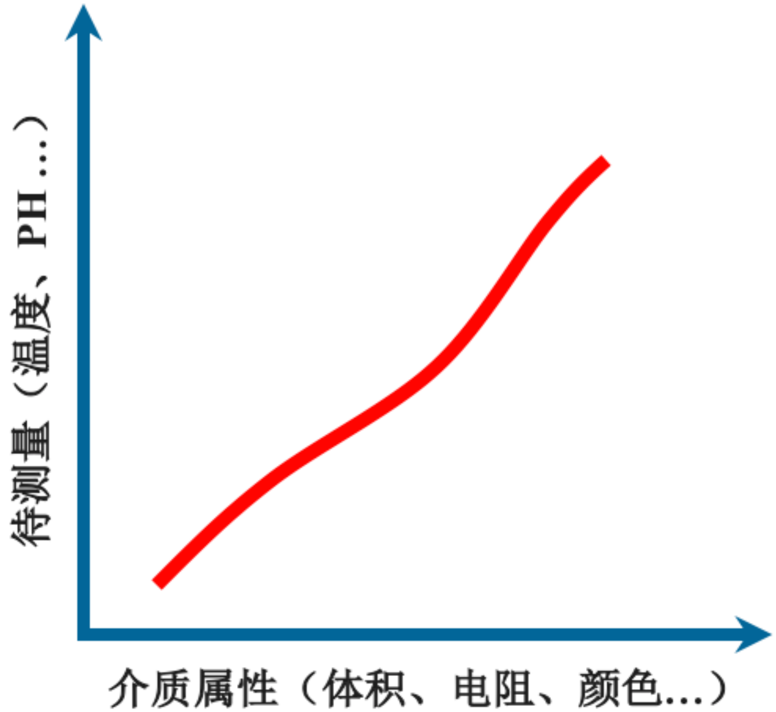
股票市场

建立模型、揭示规律、做出预测！



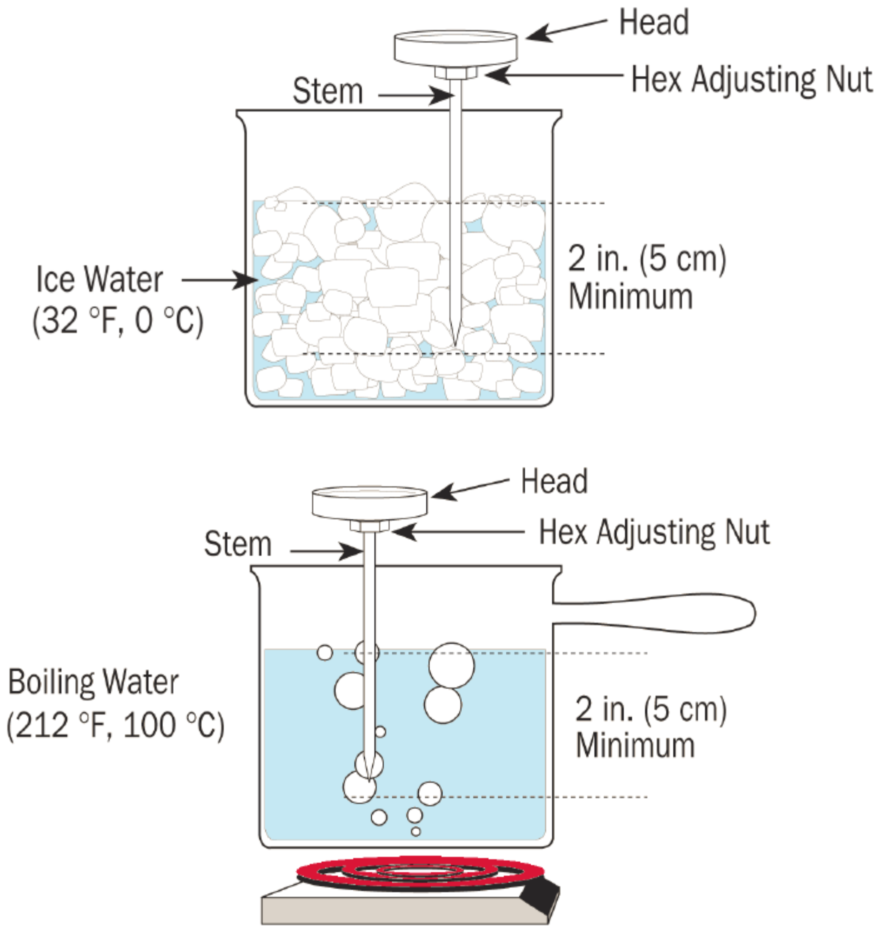
插值法！

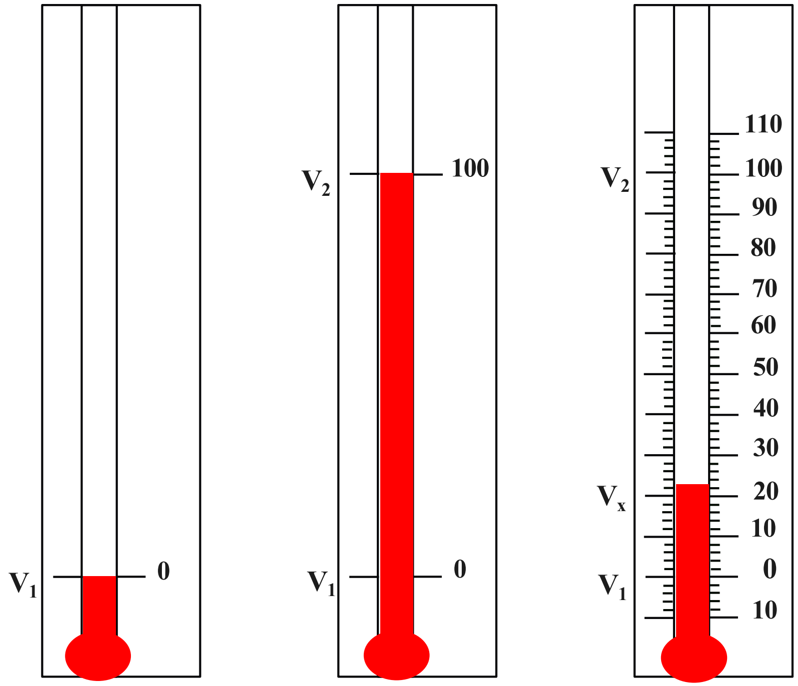
测量仪器定标



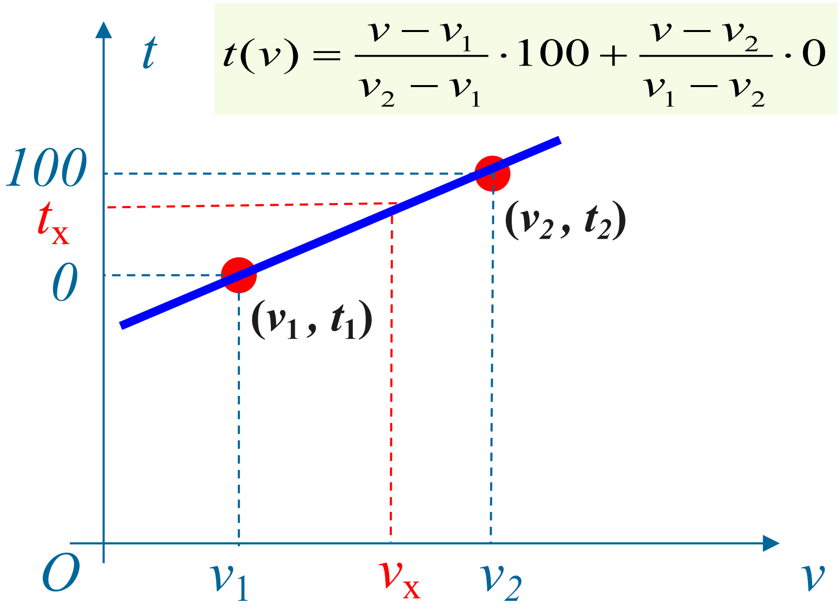
测量仪器定标 --- 插值法

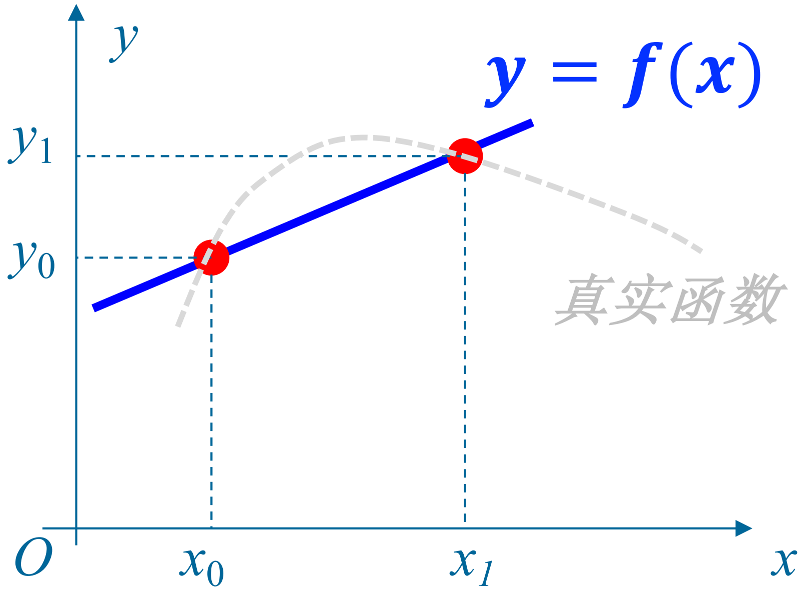
液体温度计刻度





线性插值！





插值问题：构造通过已知离散数据点的解析函数表达式，来近似描述数据点的变化规律，以便计算(预测)任何连续点的函数值及其导数值。

- **拉格朗日(Lagrange)插值**
- **样条插值**

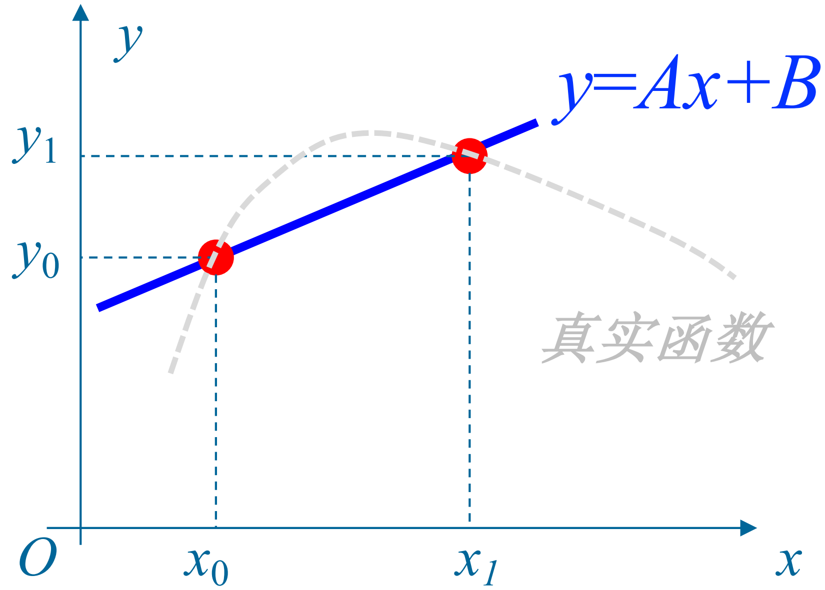
约瑟夫·路易斯·拉格朗日 (1736-1813)：
法国著名数学家、物理学家

拉格朗日(Lagrange)插值

线性插值：（已知2个数据点）

由两点式直线方程可得：

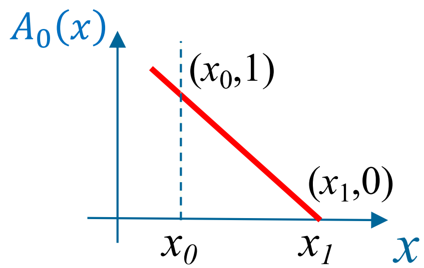
$$y(x)=\underbrace{\frac{x-x_1}{x_0-x_1}}_{A_0(x)}y_0+\underbrace{\frac{x-x_0}{x_1-x_0}}_{A_1(x)}y_1$$

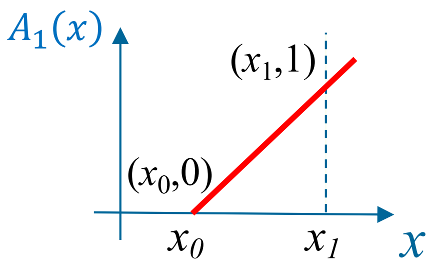


$y(x)$可看作是$A_0(x)$和$A_1(x)$的线性组合：

$$\boldsymbol{y(x)=A_0(x)y_0+A_1(x)y_1}$$

其中：$A_0(x)=\dfrac{x-x_1}{x_0-x_1}$　$A_1(x)=\dfrac{x-x_0}{x_1-x_0}$





$A_0(x)$和$A_1(x)$ 分别对应x_0和x_1点的插值基函数。

$$\begin{cases}A_0(x_0)=1;A_0(x_1)=0\\A_1(x_0)=0;A_{01}(x_1)=1\end{cases}$$

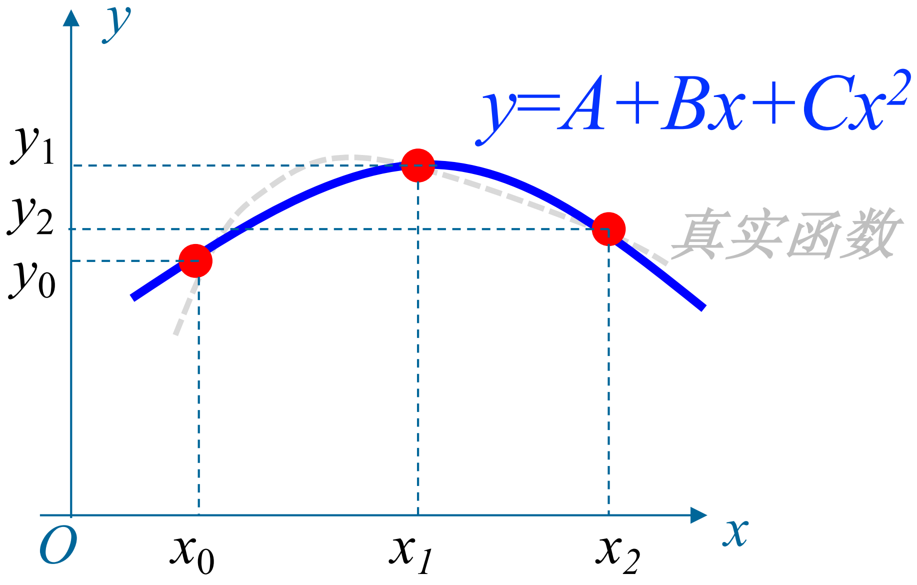
二次插值：（已知3个数据点）

$$\boldsymbol{y(x) = A_0(x)y_0 + A_1(x)y_1 + A_2(x)y_2}$$

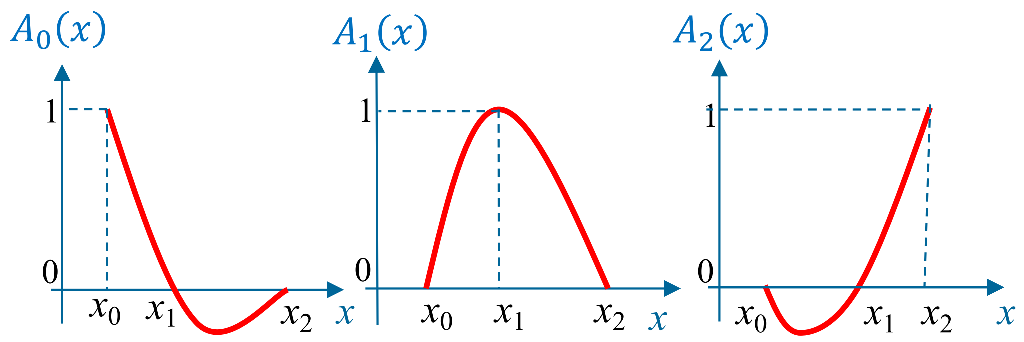
$$A_0 = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

$$A_1 = \frac{(x-x_2)(x-x_0)}{(x_1-x_2)(x_1-x_0)}$$

$$A_2 = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$



$$\begin{cases} A_0(x_0)=1;\ A_0(x_1)=0;\ A_0(x_2)=0 \\ A_1(x_0)=0;\ A_1(x_1)=1;\ A_1(x_2)=0 \\ A_2(x_0)=0;\ A_2(x_1)=0;\ A_2(x_2)=1 \end{cases}$$



n次插值：

（已知 $n+1$ 个数据点）

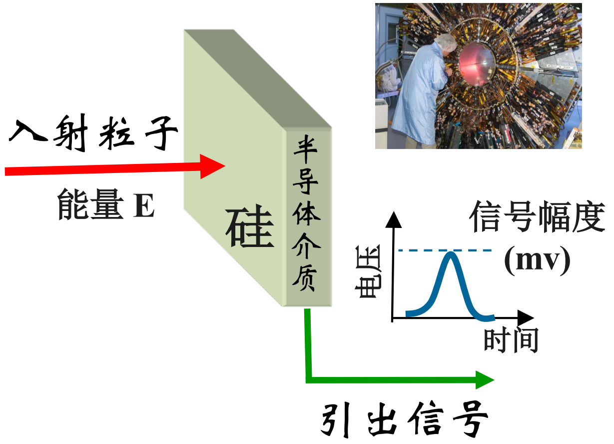
以上的拉格朗日插值可以推广到n次插值：

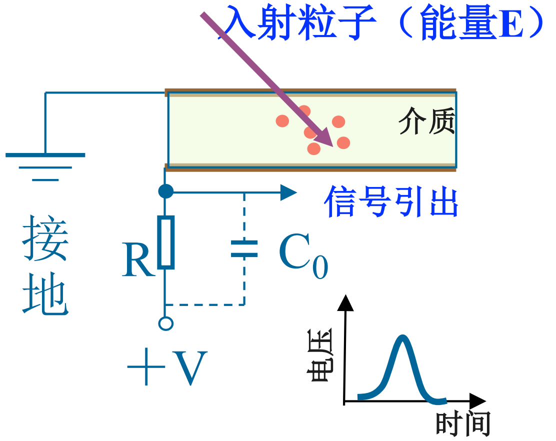
$$y(x)=\sum_{j=0}^{n} A_j(x)y_j$$

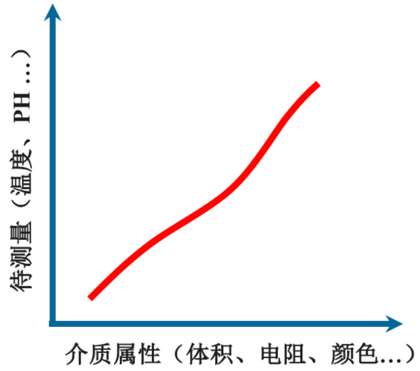
其中插值基函数可表示为：

$$A_j(x)=\prod_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{n}\frac{x-x_i}{x_j-x_i}$$

带点粒子能量探测器刻度定标

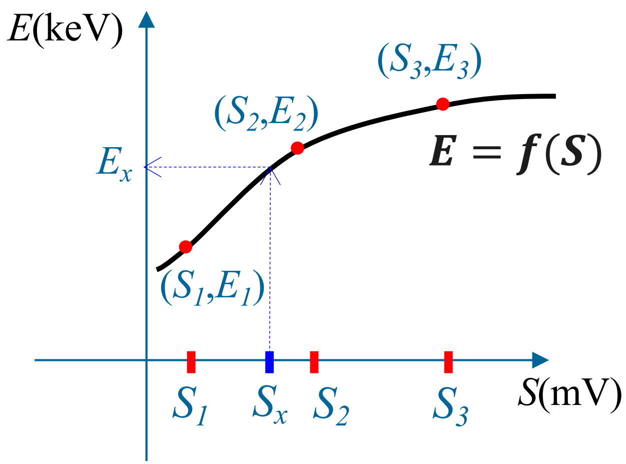






问题：如何由信号幅度确定粒子能量 E?　　**探测器刻度!**

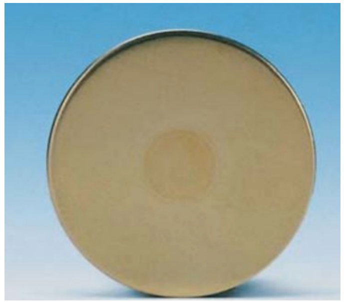
能量E（keV）	E_1	E_2	…	E_{n-1}	E_n
幅度S（mV）	S_1	S_2	…	S_{n-1}	S_n



插值法可以解决这一问题！！

带点粒子探测器刻度

已知能量的粒子由标准放射源或加速器提供！

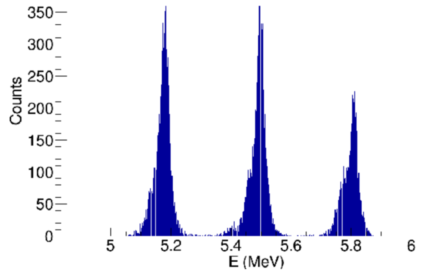


α放射源

三组份α放射源

五组份α放射源

……



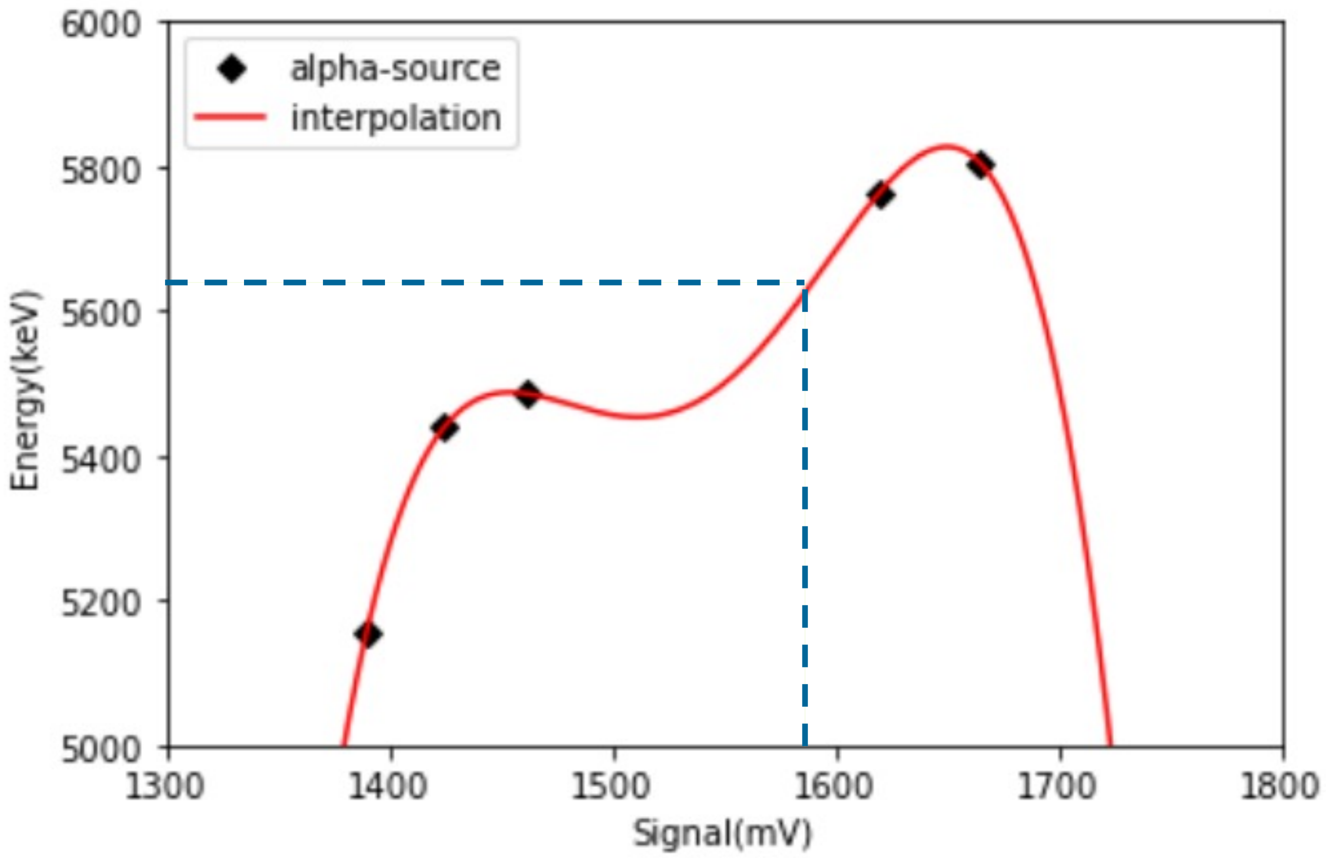
三组分α放射源能谱

实例：探测器测得的五组份α放射源信号幅度如下：

能量E（keV）	5156	5440	5486	5763	5805
幅度S（mV）	1390	1425	1461	1620	1665

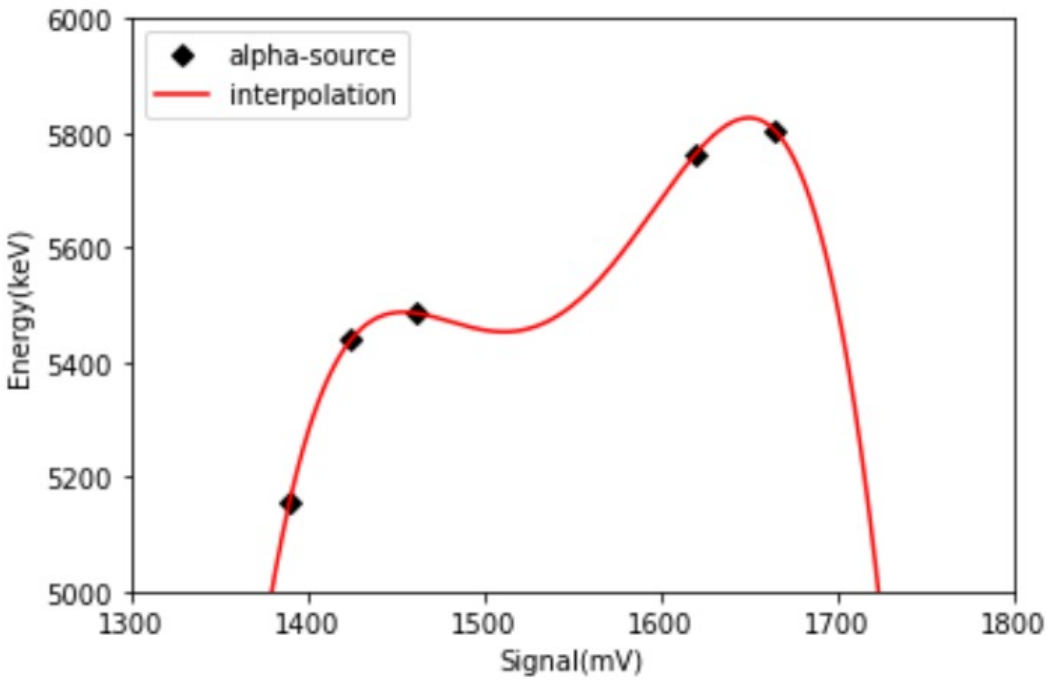
问题：若用该探测器测得的未知能量的粒子的信号幅度为1588mV，该粒子的能量为多少keV?

带点粒子探测器刻度



Signal = 1588mV; Energy = 5630 keV

带点粒子探测器刻度



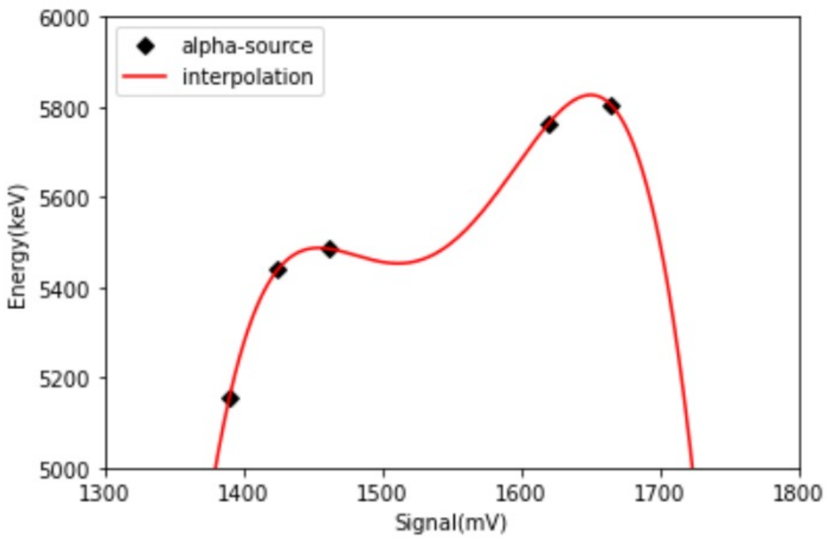
插值函数有振荡行为！（使用了高次多项式）

改进原则：局部插值、避免全局差值。

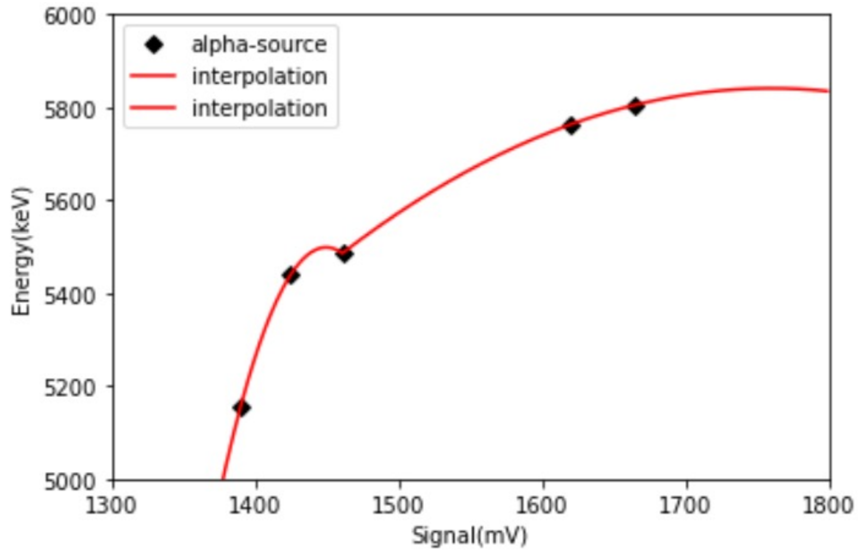
解决方案：分段插值！

带点粒子探测器刻度

全局插值



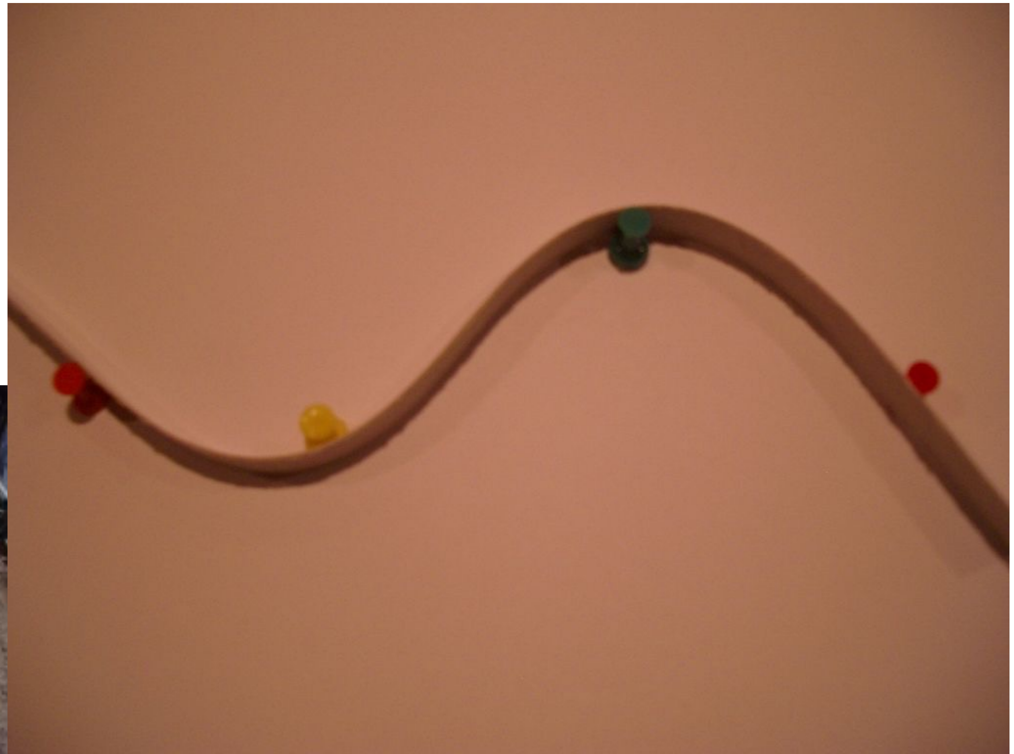
分段插值



分段插值能够避免插值函数的振荡行为，但是区间连接处不光滑！

解决方案：样条插值！

样条(Spline)插值

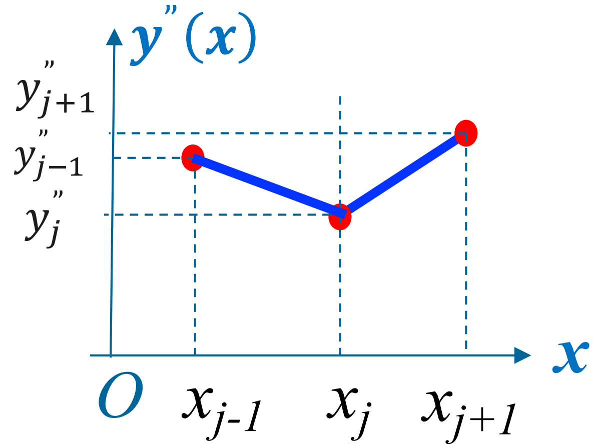


三次样条插值(Cubic Spline Interpolation)

构造三次多项式，并要求二阶导数处处连续！

$$y''(x) = A(x)y_j'' + B(x)y_{j+1}''$$

$$A(x) = \frac{x - x_{j+1}}{x_j - x_{j+1}} \qquad B(x) = \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j}$$



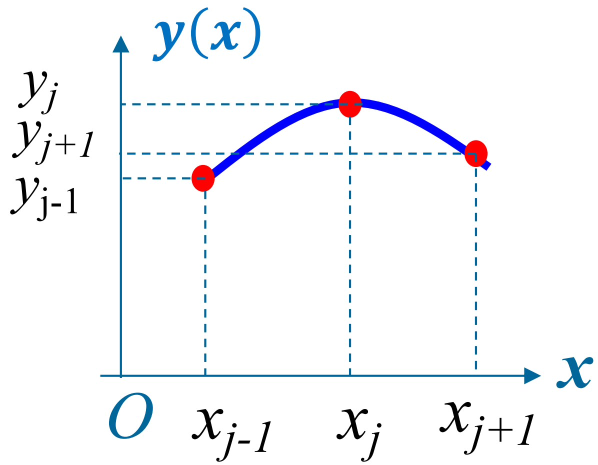
$$y(x) = A(x)y_j + B(x)y_{j+1} + \boxed{C(x)y_j'' + D(x)y_{j+1}''}$$

$$C(x) = \frac{1}{6}\left(A(x)^3 - A(x)\right)\left(x_{j+1} - x_j\right)^2$$

$$D(x) = \frac{1}{6}\left(B(x)^3 - B(x)\right)\left(x_{j+1} - x_j\right)^2$$

$$C(x_j) = C(x_{j+1}) = D(x_j) = C(x_{j+1}) = 0$$

$$C''(x) = A(x) \qquad D''(x) = B(x)$$



三次样条插值(Cubic Spline Interpolation)

$$y(x) = A(x)y_j + B(x)y_{j+1} + C(x)y_j'' + D(x)y_{j+1}''$$ 未知！

利用y(x)一阶导连续的条件确定！

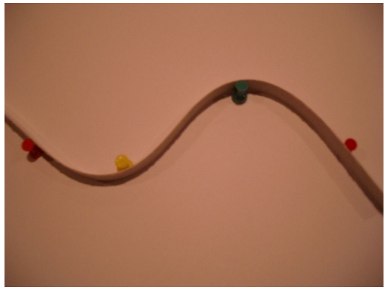
$$\frac{dy}{dx} = \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} - \frac{3A^2 - 1}{6}(x_{j+1} - x_j)y_j'' + \frac{3B^2 - 1}{6}(x_{j+1} - x_j)y_{j+1}''$$

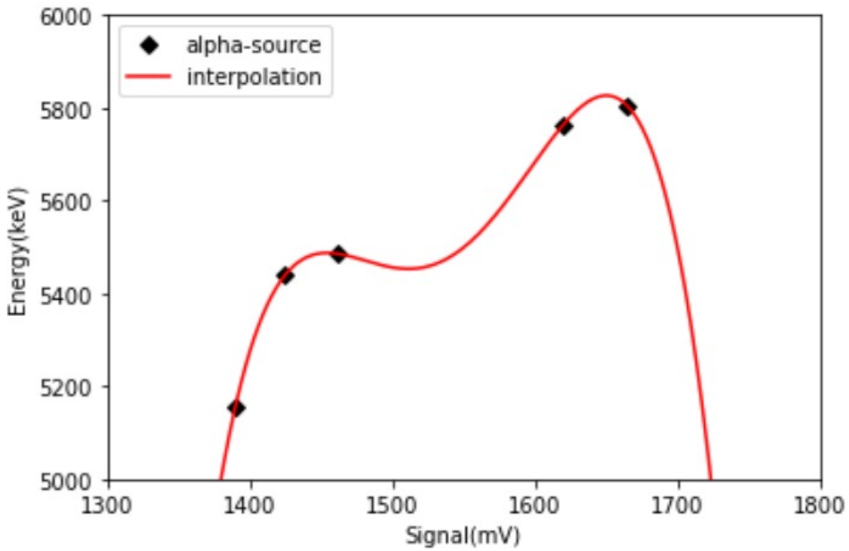
根据一阶导数连续的要求可得： **N-2**个方程

$$\frac{x_j - x_{j-1}}{6}y_{j-1}'' + \frac{x_{j+1} - x_{j-1}}{3}y_j'' + \frac{x_{j+1} - x_j}{6}y_{j+1}'' = \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}$$

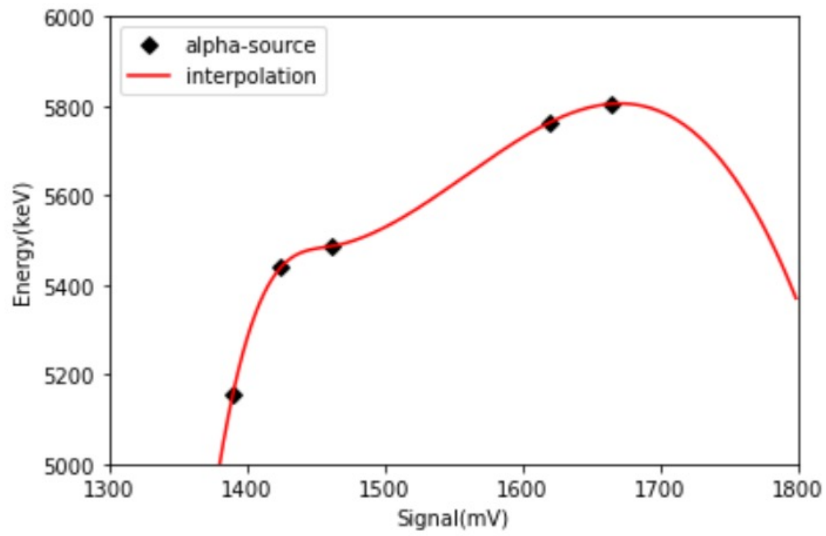
自然边界条件： $y_1''=0$; $y_N''=0$

可确定所有 y_j''





拉格朗日插值



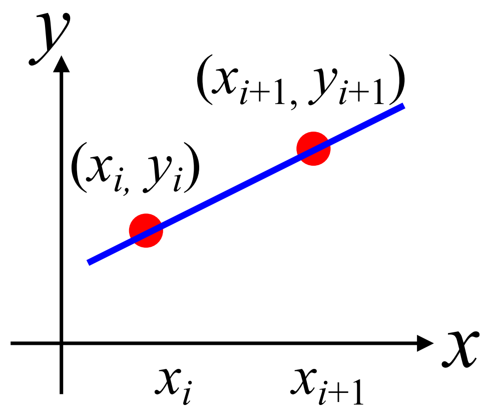
三次样条插值

从电势到电场：数值微分

由插值函数可方便地计算数值微分

思路：用插值函数$y(x)$的微分代替原始函数$f(x)$的微分

$$f'(x) \approx y'(x)$$



由线性插值:

$$y(x) = \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} y_i + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} y_{i+1}$$

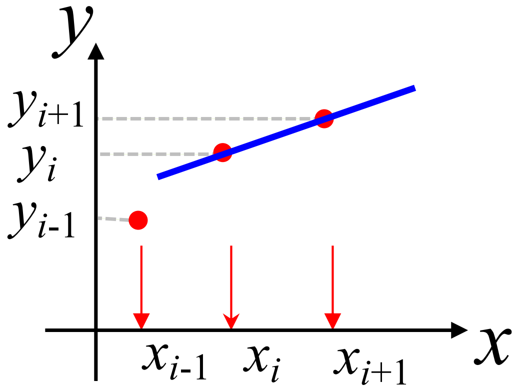
两边求导，并利用$x_{i+1}-x_i=h$, h为步长

$$y'(x) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$

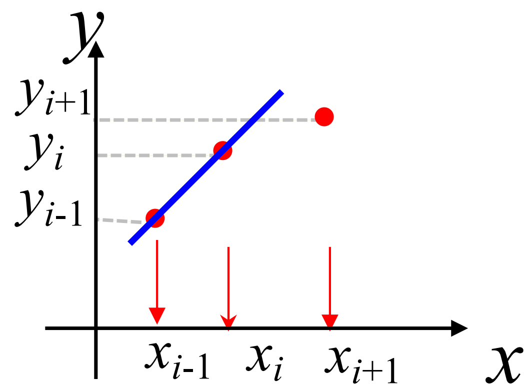
两点式微分

更一般地：

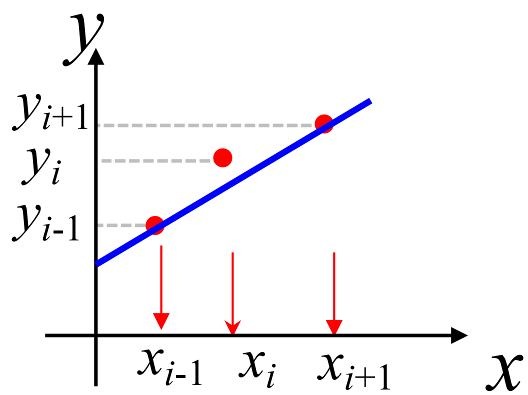
$$y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$ 向前差分



$$y'(x_i) = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}$$ 向后差分



$$y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$$ 中心差分



三点公式: $(x_{i-1}, y_{i-1}), (x_i, y_i), (x_{i+1}, y_{i+1})$

由相邻的三个数据点可构建二次插值函数:

$$y(x) = \frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} y_{i-1} + \frac{(x-x_{i+1})(x-x_{i-1})}{(x_i-x_{i+1})(x_i-x_{i-1})} y_i + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} y_{i+1}$$

两边求导，并利用$x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = h$, h为步长:

$$y'(x) = \frac{2x-x_i-x_{i+1}}{2h^2} y_{i-1} + \frac{2x-x_{i+1}-x_{i-1}}{h^2} y_i \frac{2x-x_{i-1}-x_i}{2h^2} y_{i+1}$$

得三点公式:

$$y'(x_{i-1}) = \frac{-3y_{i-1} + 4y_i - y_{i+1}}{2h}$$

$$y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i+1}}{2h}$$

$$y'(x_{i+1}) = \frac{y_{i-1} - 4y_i + 3y_{i+1}}{2h}$$

三点微分

二次微分：

由三点的二次插值多项式，可进一步求二次微商，得到二阶数值微分公式

$$y'(x) = \frac{2x - x_i - x_{i+1}}{2h^2} y_{i-1} + \frac{2x - x_{i+1} - x_{i-1}}{h^2} y_i \ \frac{2x - x_{i-1} - x_i}{2h^2} y_{i+1}$$

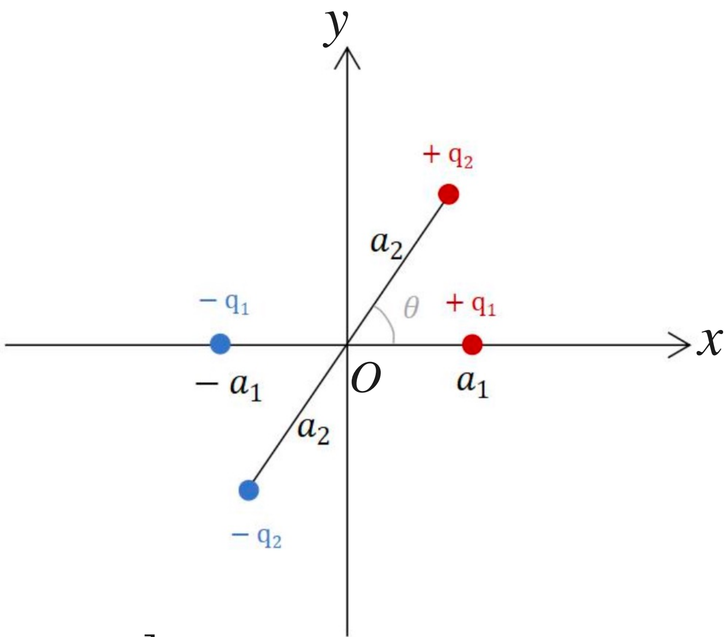
$$y''(x) = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}$$

得： $y''(x_{i-1}) = \underline{y''(x_i)} = y''(x_{i+1}) = \dfrac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}$

二阶微分

静电势与静电场空间分布：

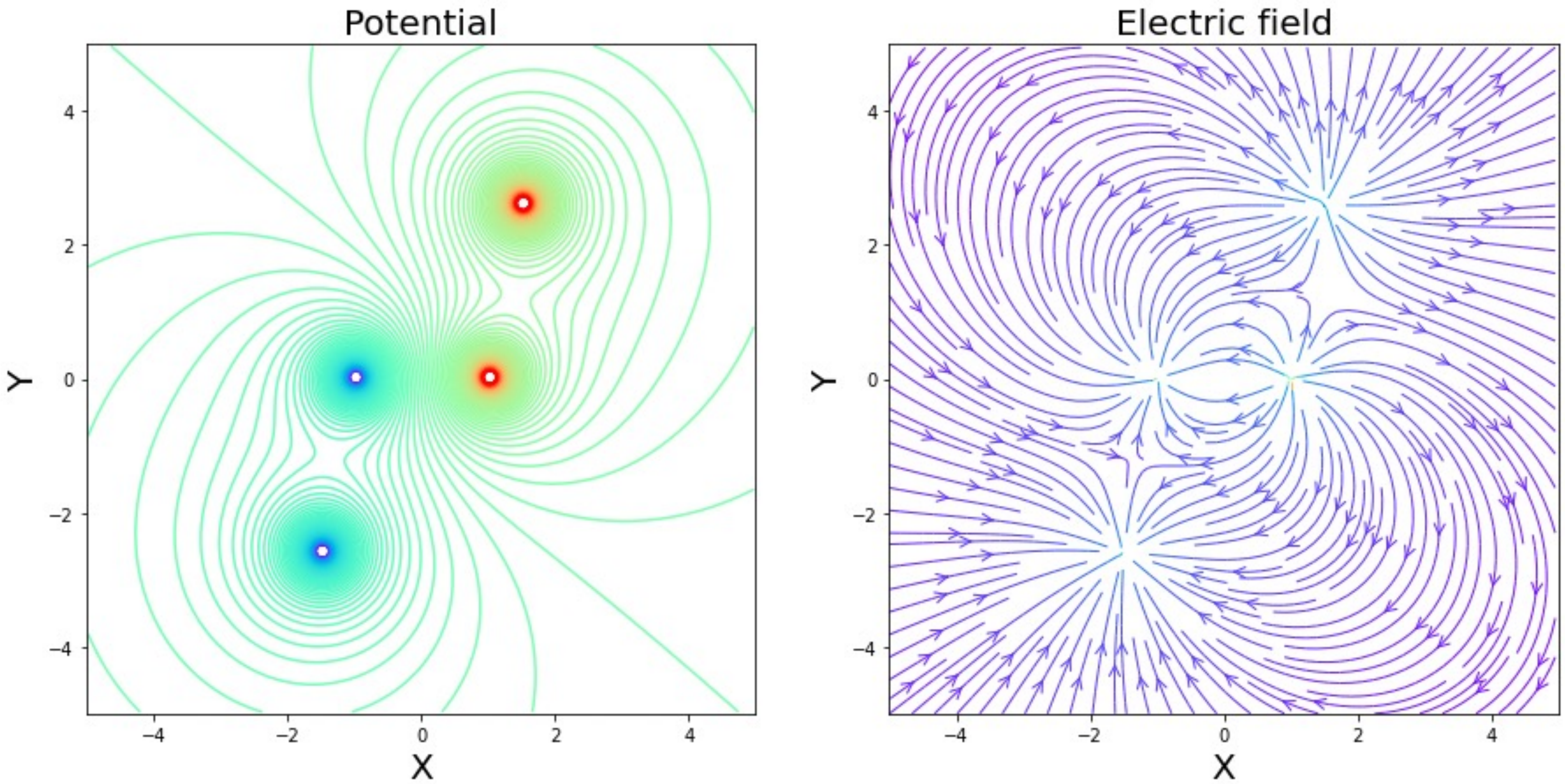
两对电偶极子，关于原点对称放置，
平面内电势分布



$$U(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\frac{1}{4\pi\varepsilon}\left[\frac{-q_1}{\sqrt{(x+a_1)^2+y^2}}+\frac{q_1}{\sqrt{(x-a_1)^2+y^2}}\right]+$$
$$+\frac{1}{4\pi\varepsilon}\left[\frac{-q_2}{\sqrt{(x+a_2\cos\theta)^2+(y+a_2\sin\theta)^2}}+\frac{q_2}{\sqrt{(x-a_2\cos\theta)^2+(y-a_2\sin\theta)^2}}\right]$$

电场强度： $E=-\nabla U$ $\quad E_x=-\frac{\partial U}{\partial x}$； $E_y=-\frac{\partial U}{\partial y}$

利用中心差分：
$$\begin{cases} E_x=-\dfrac{U(x+\Delta x,y)-U(x-\Delta x,y)}{2\Delta x} \\ E_y=-\dfrac{U(x,y+\Delta y)-U(x,y-\Delta y)}{2\Delta y} \end{cases}$$

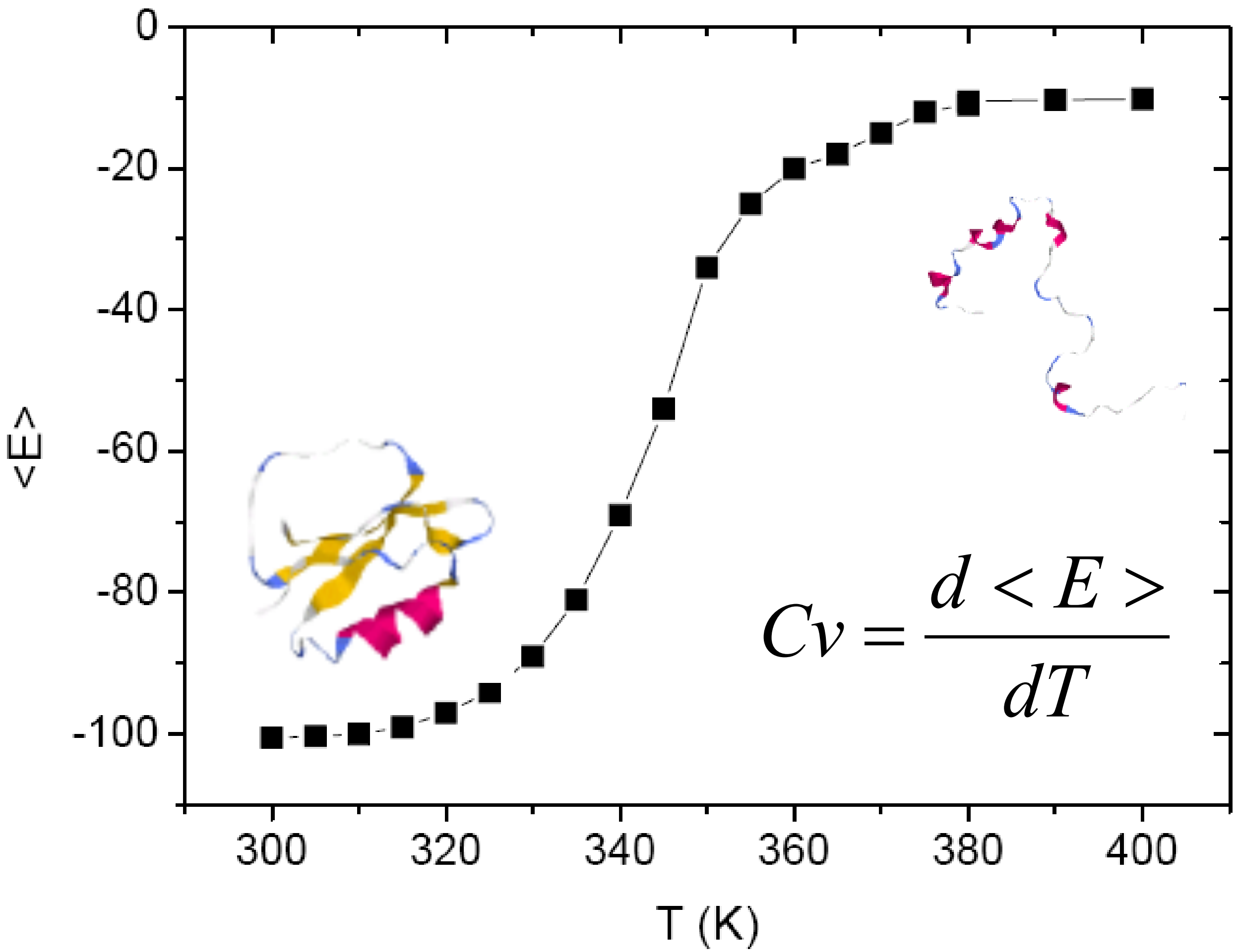


Potential
Electric field
X
Y
−4
−2
0
2
4

举例：

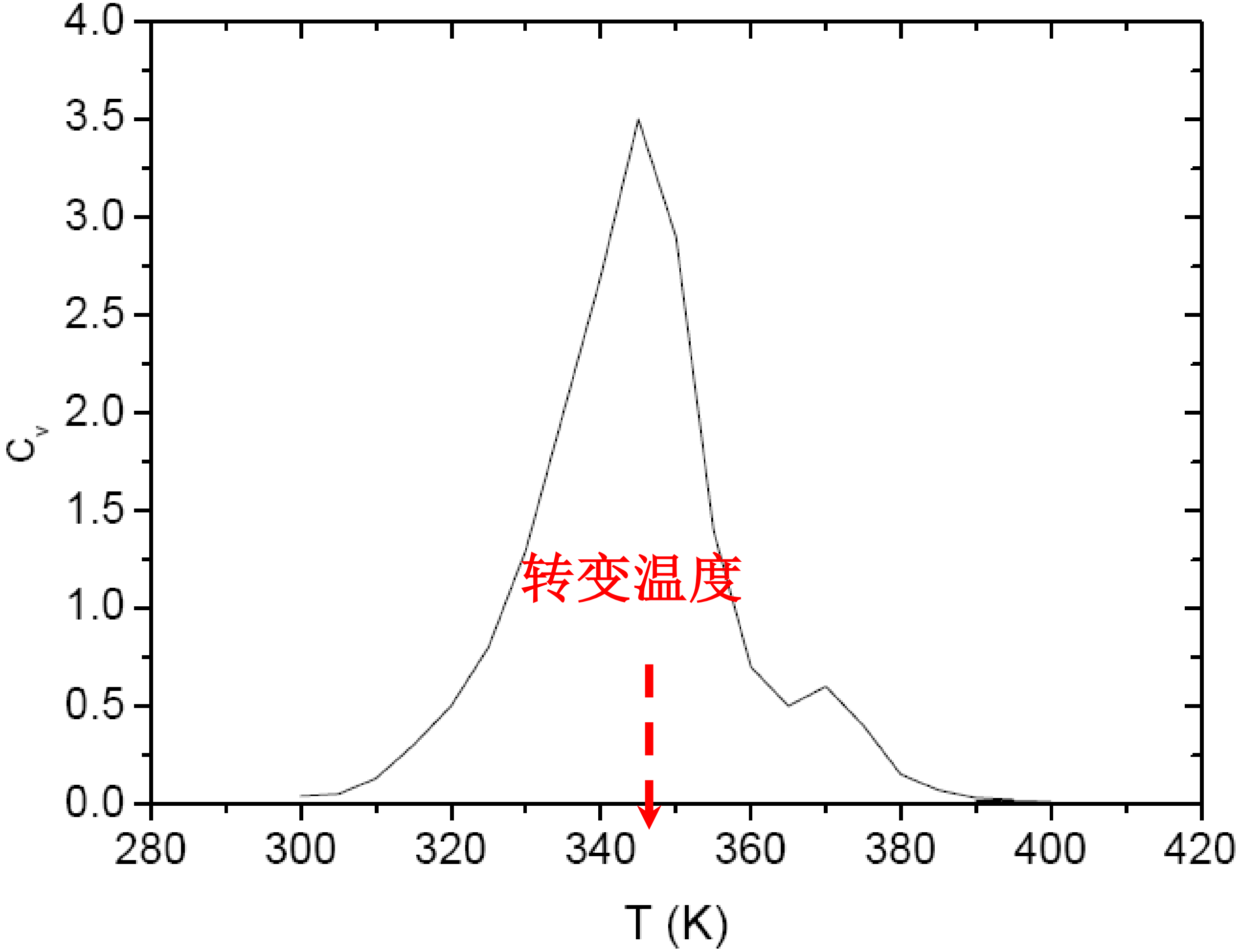
蛋白质折叠比热计算

T	<E>
300	-100.5
305	-100.3
310	-100
315	-99
320	-97
325	-94
330	-89
335	-81
340	-69
345	-54
350	-34
355	-25
360	-20
365	-18
370	-15
375	-12
380	-11
385	-10.5
390	-10.3
395	-10.2



$$Cv = \frac{d < E >}{dT}$$

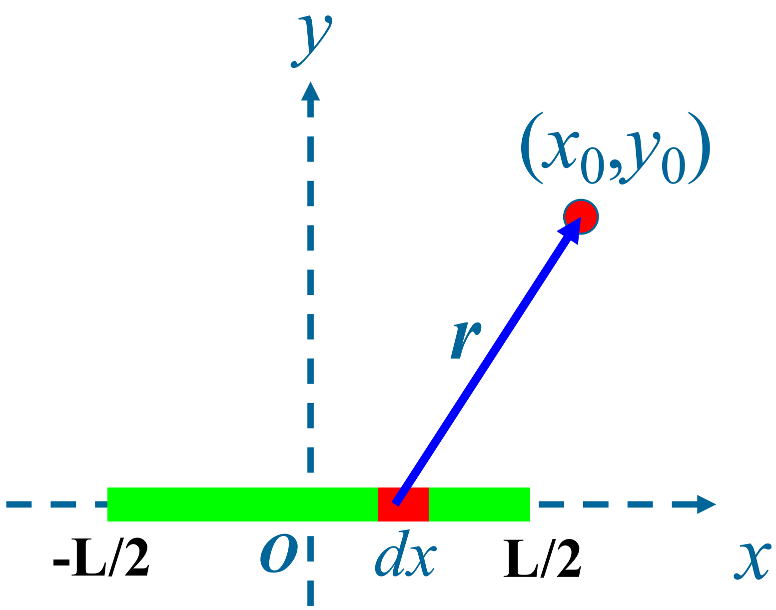
$$Cv = \frac{d < E >}{dT}$$



4.0
3.5
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
C_v
转变温度
280
300
320
340
360
380
400
420
T (K)

带电细杆的静电势与静电场分布：数值积分

物理问题：



电荷分布线密度： $\lambda(x) = e^{-x^2}$

dx产生的电势： $\frac{1}{4\pi\varepsilon}\frac{\lambda(x)}{\left[(x-x_0)^2+{y_0}^2\right]^{1/2}}dx$

$$U(x_0,y_0) = \frac{1}{4\pi\varepsilon}\int_{-L/2}^{L/2}\frac{\lambda(x)}{\left[(x-x_0)^2+{y_0}^2\right]^{1/2}}dx$$

电场强度： $E = -\nabla U$ $\quad E_x = -\frac{\partial U}{\partial x}$； $E_y = -\frac{\partial U}{\partial y}$

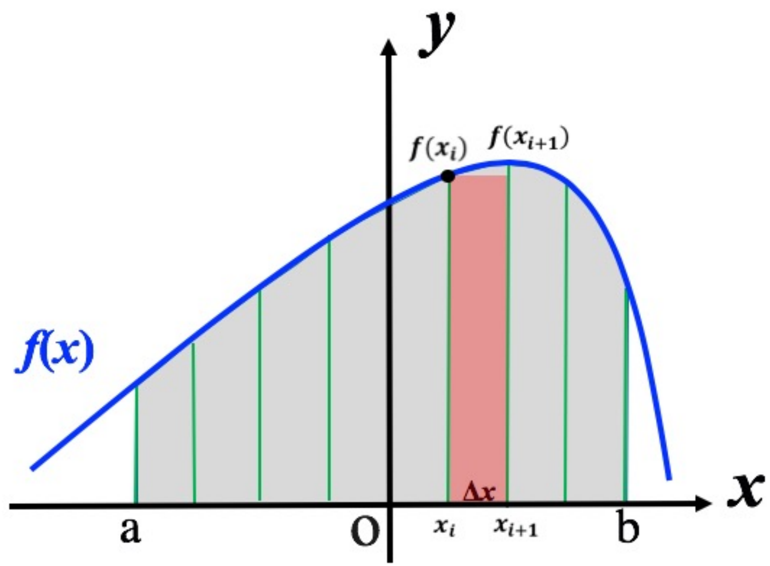
引入符号**$f(x)$**，令：

$$f(x)=\frac{1}{4\pi\varepsilon}\frac{\lambda(x)}{\left[(x-x_0)^2+y_0{}^2\right]^{1/2}}$$

问题变为求解标准的定积分

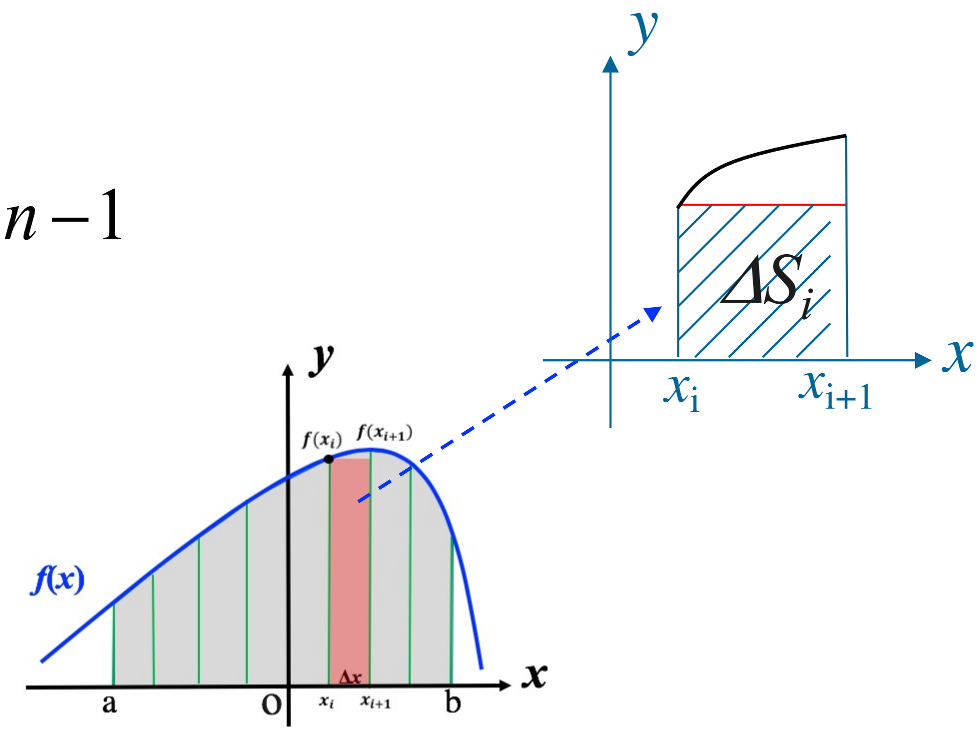
$$I=\int_a^b f(x)dx$$

几何意义:求曲线下的面积



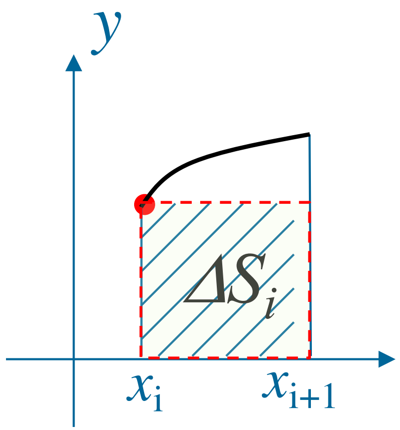
$$\Delta S_i = f(x_i)\Delta x \quad i = 1,2,\cdots,n-1$$

$$I = \sum_{i=1}^{n-1} \Delta S_i = \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\Delta x$$

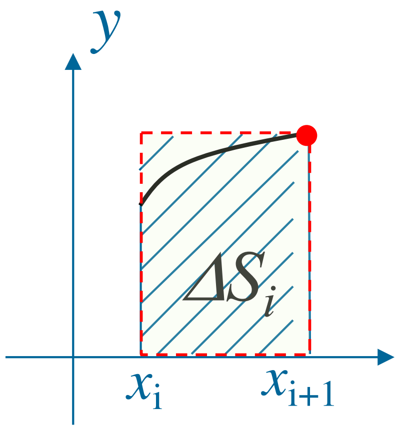


$$I = \sum_{i=1}^{n-1} \Delta S_i = f(x_1)\Delta x + f(x_2)\Delta x + \cdots + f(x_{n-1})\Delta x$$

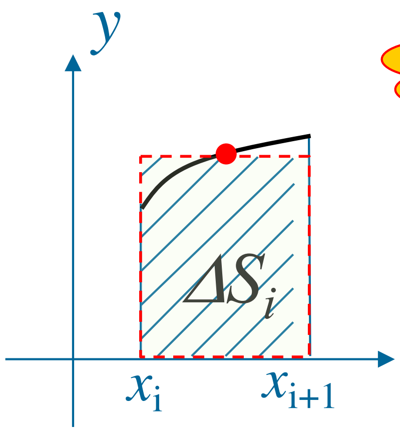
矩形公式



左矩形

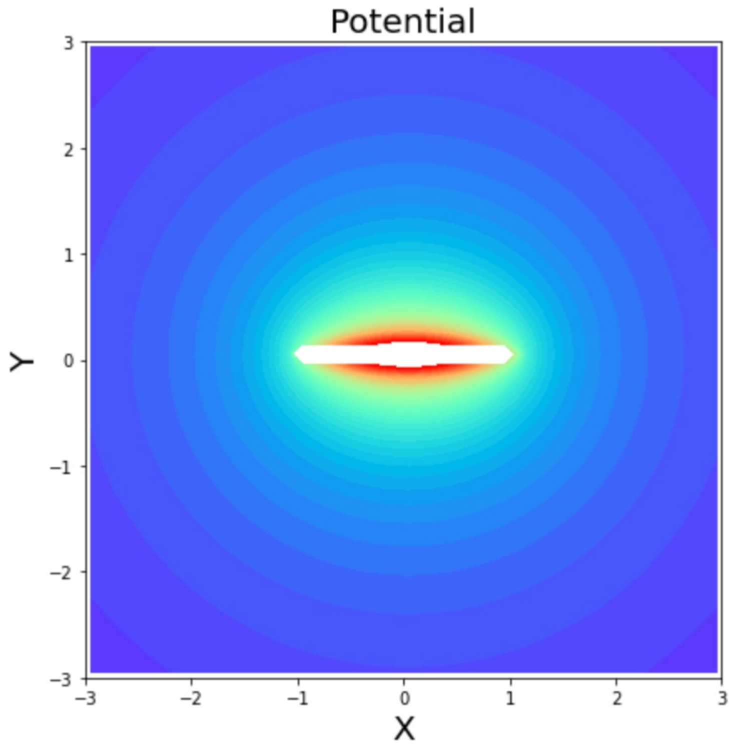


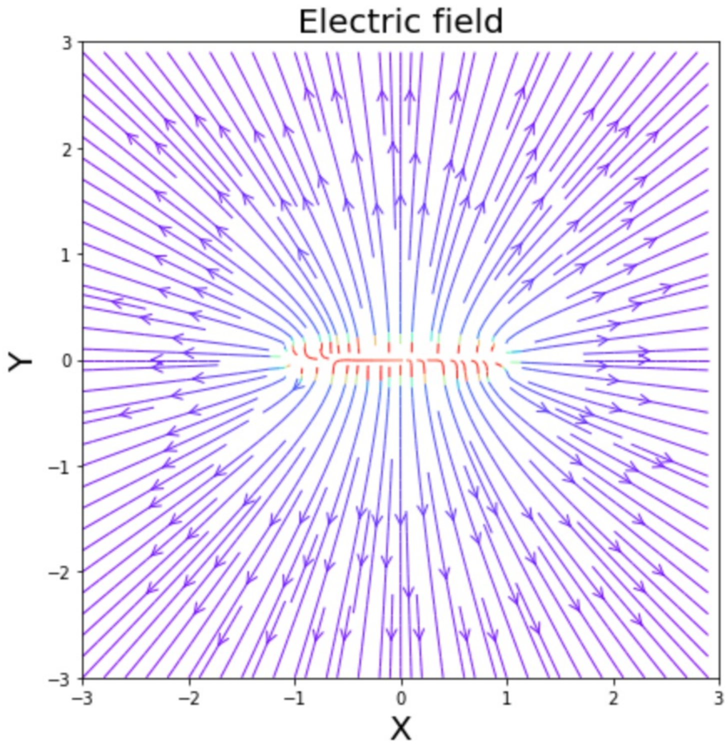
右矩形

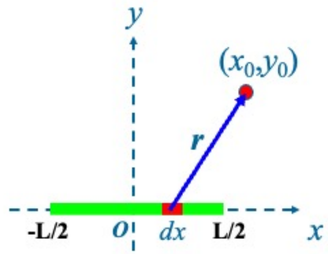


中矩形

带电细杆的静电势与静电场分布：矩形积分



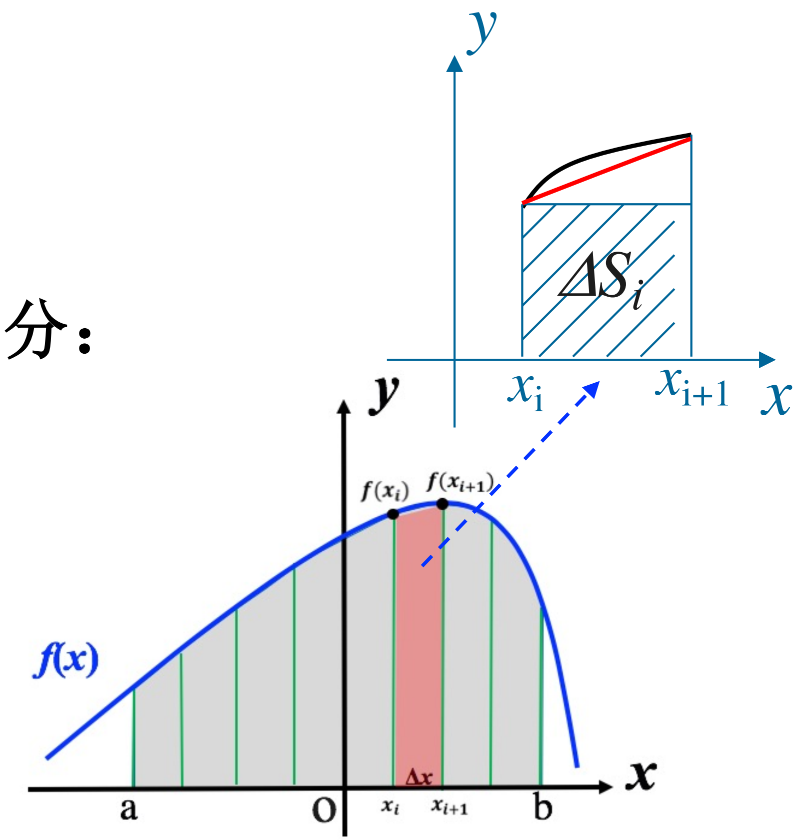




改进算法，提高精度：

用插值函数的积分代替原函数的积分：

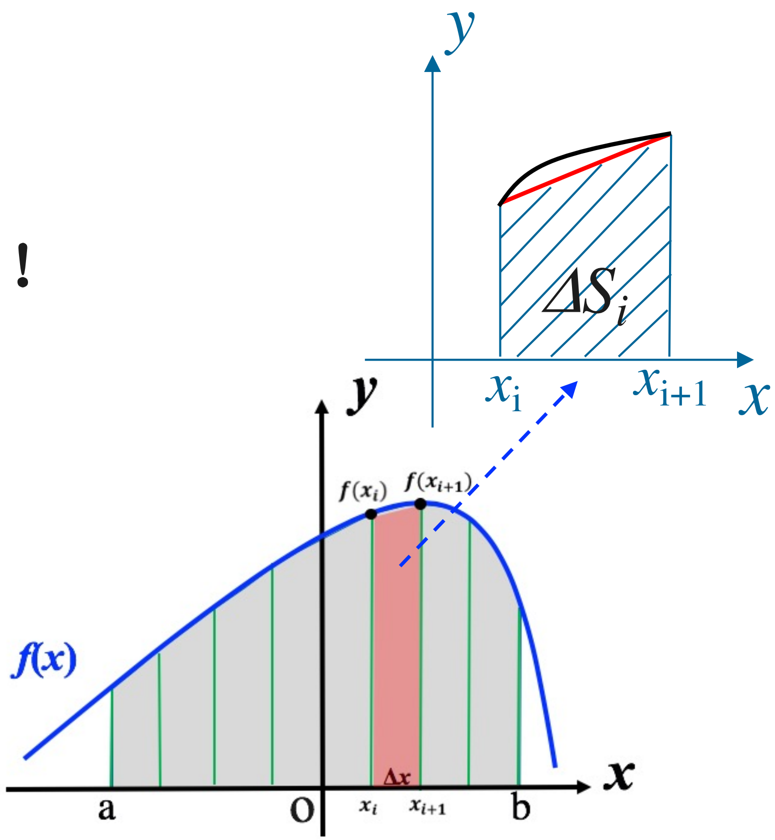
$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b y(x)dx$$



其中：$y(x)$为插值多项式，可以解析积分

梯形积分公式:

思路：用线性插值函数代替原函数！



$$y(x)=\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}y_i+\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i}y_{i+1}$$

$$\Delta S_i=\int_{x_i}^{x_{i+1}}f(x)dx$$

$$\approx\int_{x_i}^{x_{i+1}}y(x)dx=\frac{1}{2}[f(x_i)+f(x_{i+1})]\Delta x \quad i=1,2,\cdots,n-1$$

$$\boldsymbol{I}=\sum_{i=1}^{n-1}\Delta \boldsymbol{S}_i=\sum_{i=1}^{n-1}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)+\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_{i+1})]\frac{\Delta \boldsymbol{x}}{2}$$

$$I=\sum_{i=1}^{n-1}\Delta S_i=\frac{1}{2}f(x_1)\Delta x+f(x_2)\Delta x+\cdots+f(x_{n-1})\Delta x+\frac{1}{2}f(x_n)\Delta x$$

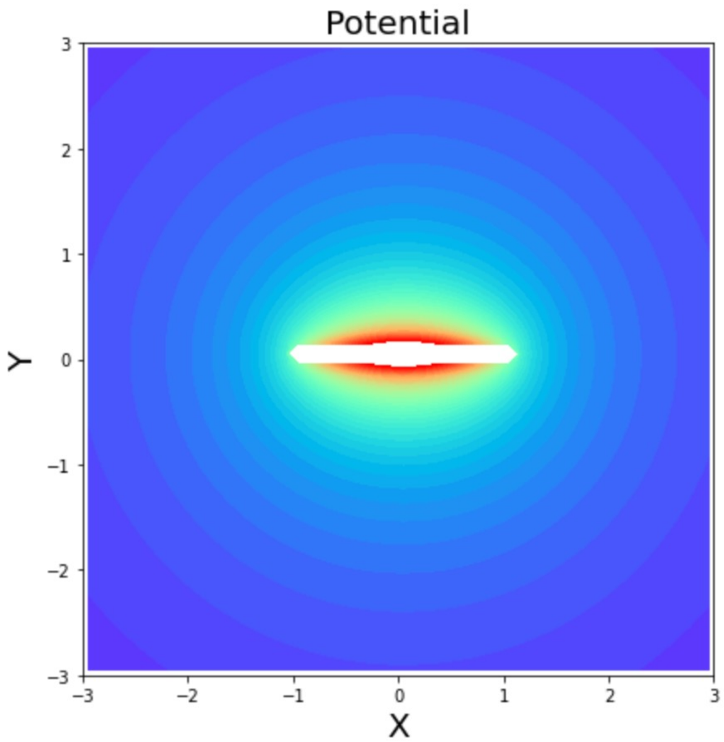
梯形公式

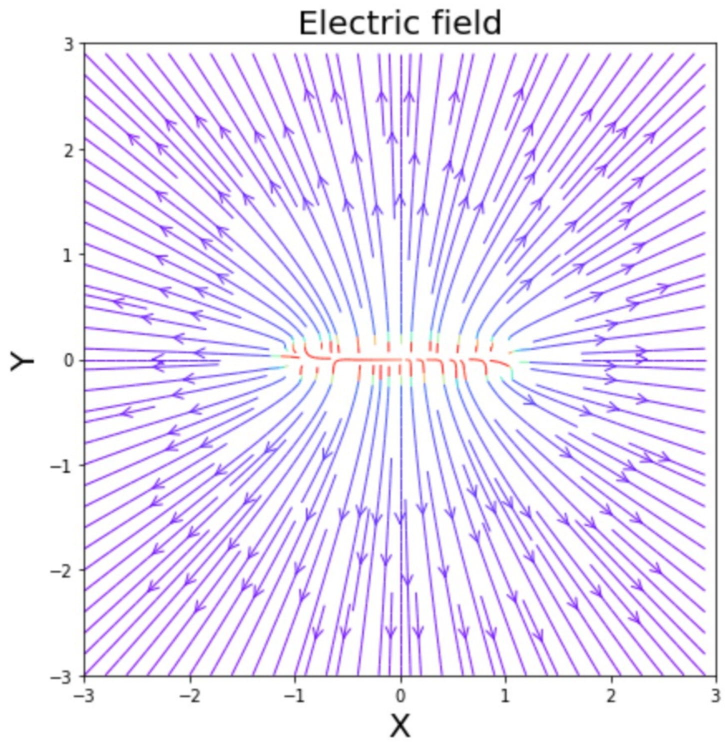
截断误差：

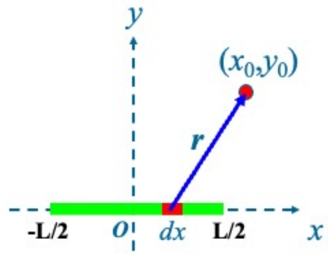
$$R=\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx-\frac{\Delta x}{2}(x_i+x_{i+1})$$

$$=-\frac{(\Delta x)^3}{12}f''(\eta)\quad (x_i<\eta<x_{i+1})$$

带电细杆的静电势与静电场分布：梯形积分

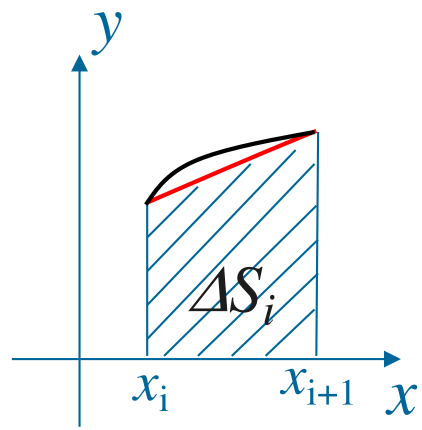






抛物线积分公式：

思路：用二次插值函数代替原函数！

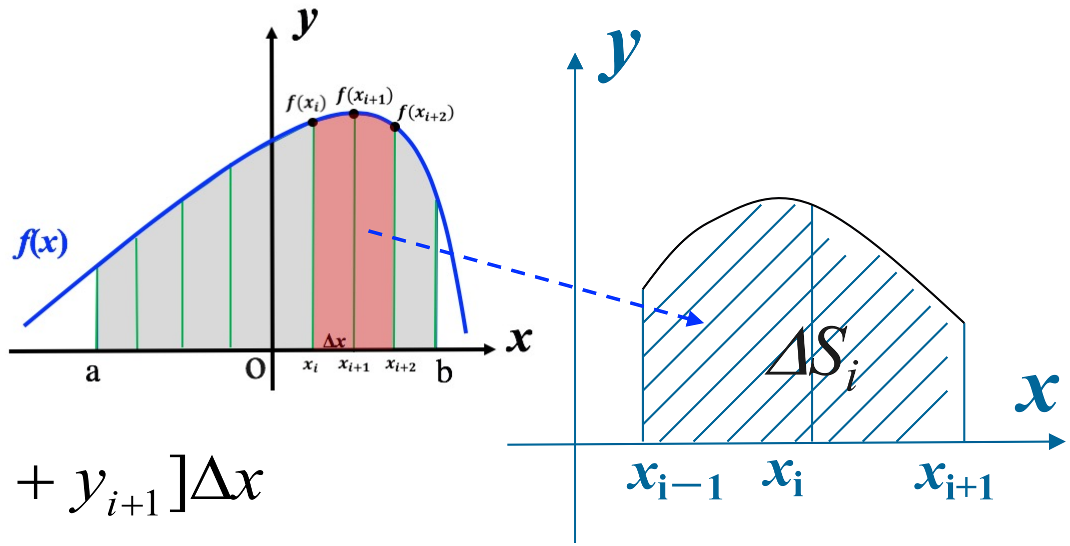


$$y(x)=\frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})}y_{i-1}+\frac{(x-x_{i+1})(x-x_{i-1})}{(x_i-x_{i+1})(x_i-x_{i-1})}y_i+\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_{i-1})}y_{i+1}$$

对$y(x)$由x_{i-1}到x_{i+1}积分：

$$\Delta S=\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}f(x)dx$$

$$\approx\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}y(x)dx=\frac{1}{3}[y_{i-1}+4y_i+y_{i+1}]\Delta x$$



n:奇数

$$I=\sum_{i=1,3,5}^{n-1}\Delta S_i=\frac{1}{3}[f(x_1)\Delta x+4f(x_2)\Delta x+2f(x_3)\Delta x+4f(x_2)\Delta x+\cdots+f(x_n)]\Delta x$$

抛物线积分

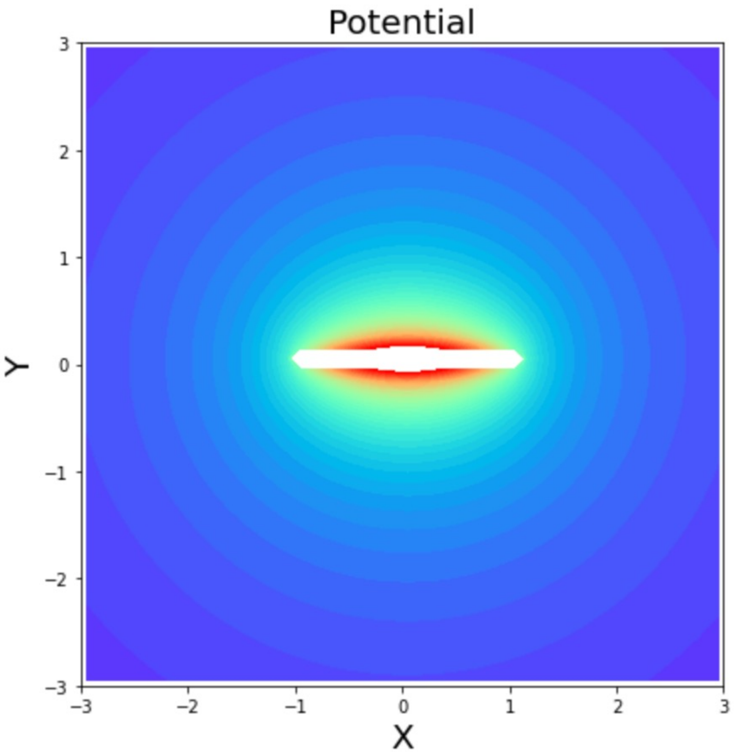
辛普生积分

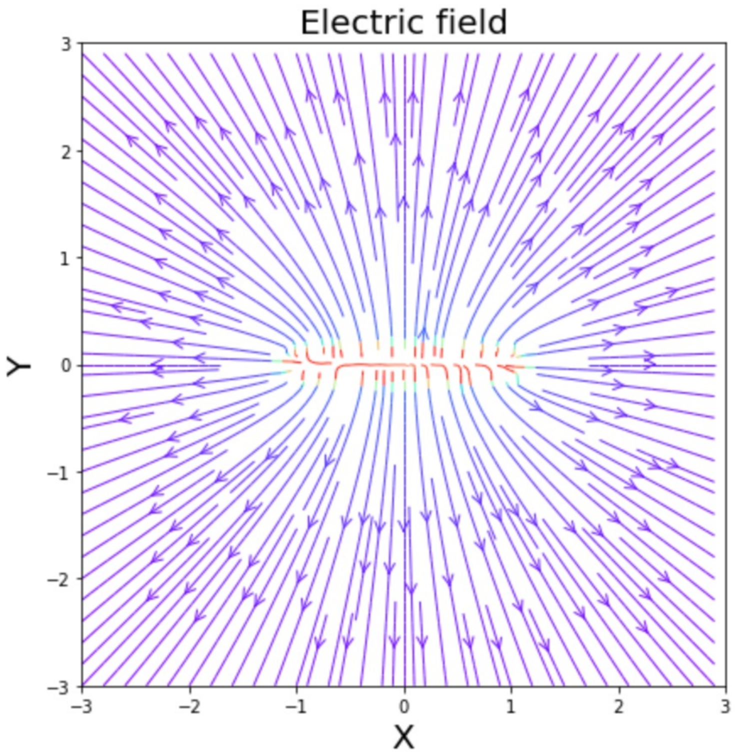
截断误差:

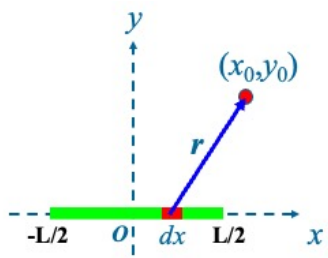
$$R=\int_{x_i}^{x_{i+1}}f(x)dx-\frac{\Delta x}{2}(f(x_i)+f(x_{i+1}))$$

$$=-\frac{(\Delta x)^5}{90}f^{(4)}(\eta)\quad(x_i<\eta<x_{i+1})$$

带电细杆的静电势与静电场分布：抛物线积分







牛顿-科茨公式：$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{N} w_k f(x_k)$ $x_k = a + kh$

x_k均匀分割，具有等步长h！

n	数据点	算法	公式
0	1	矩形公式	hf_i
1	2	梯形积分	$\frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})$
2	3	辛普森积分	$\frac{h}{3}(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1})$
3	4	辛普森3/8积分	$\frac{3h}{8}(f_{i-1} + 3f_i + 3f_{i+1} + f_{i+2})$

x_k均匀分割，具有等步长h！ N个数据点，对N-1次多项式精确！

x_k可否非均匀分割？

高斯积分：

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{N} w_k f(x_k)$$

允许非均匀分割的x_k！

1）如何分割？2）权重w_k如何选取？

插值多项式（唯一）： $\Phi(x) = \sum_{k=1}^{N} f(x_k) A_k(x) \qquad \Phi(x_m) = f(x_m)$

插值基函数： $A_k(x) = \prod_{\substack{m=1\cdots N \\ m\neq k}} \frac{(x-x_k)}{x_k - x_m} \qquad A_k(x_m) = \begin{cases} 1 & \text{if } m = k, \\ 0 & \text{if } m \neq k \end{cases}$

定积分： $\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \Phi(x)dx = \sum_{k=1}^{N} f(x_k) \int_a^b A_k(x)dx$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{N} w_k f(x_k) \qquad w_k = \int_a^b A_k(x)dx$$

与被积函数f(x)无关！
与x_k的分割方式有关！

可以证明：选择合适的x_k分割方式 (N个数据点)，对2N-1 次多项式精确！

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{N} w_k f(x_k) \qquad w_k = \int_a^b A_k(x)dx$$

与被积函数f(x)无关！
与x_k的分割方式有关！

$$w_k = \int_{-1}^{1} A_k(x)dx$$

$$\boxed{P_N(x_k) = 0}$$

P_N：N阶勒让德多项式！

（P_N的零点，课查表或数值计算！）

$$\boxed{w_k = \left[\frac{2}{(1-x^2)}\left(\frac{dP_N(x)}{dx}\right)^{-2}\right]_{x=x_k}}$$

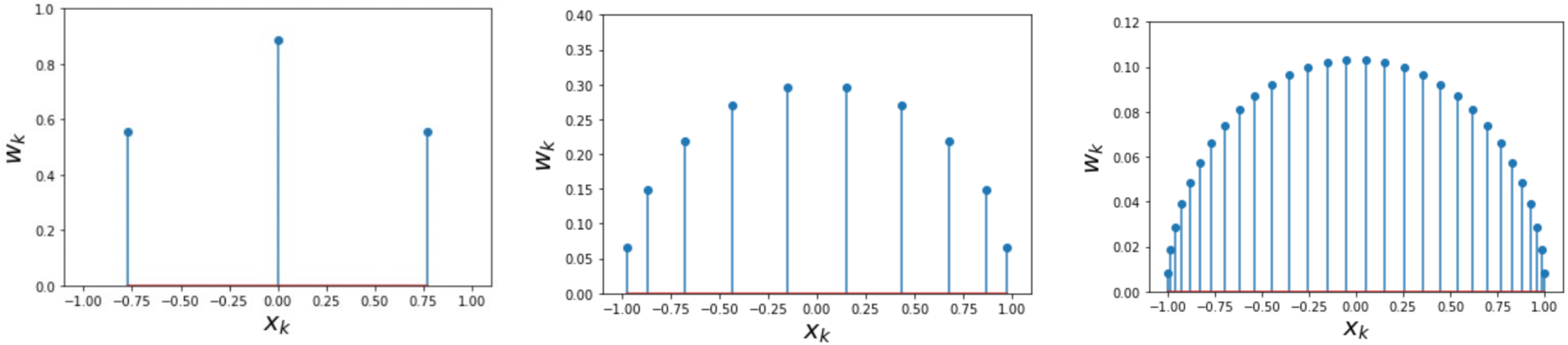
$$x'_k = \frac{1}{2}(b-a)x_k + \frac{1}{2}(b+a) \qquad w'_k = \frac{1}{2}(b-a)w_k$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{N} w'_k f(x'_k)$$

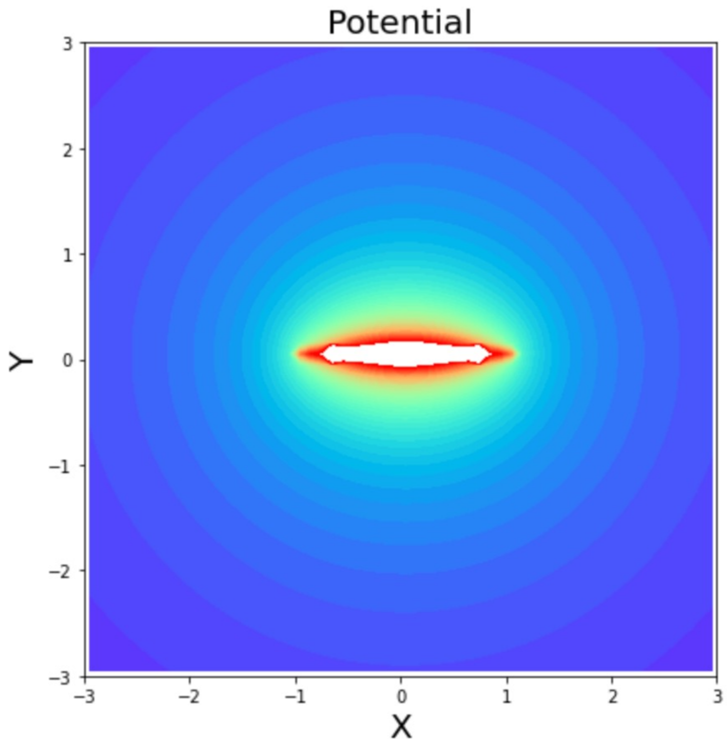
高斯积分！

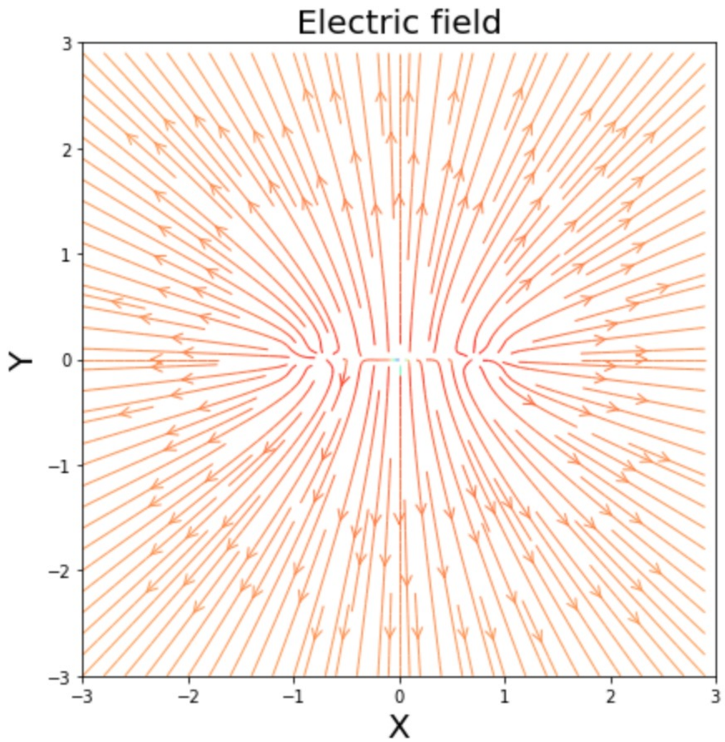
$$I = \int_0^2 (x^4 - 2x + 1)\, dx = 4.4$$

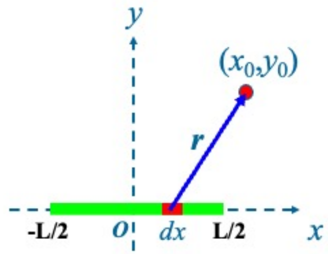
N=3 **N=10** **N=30**



带电细杆的静电势与静电场分布：高斯积分



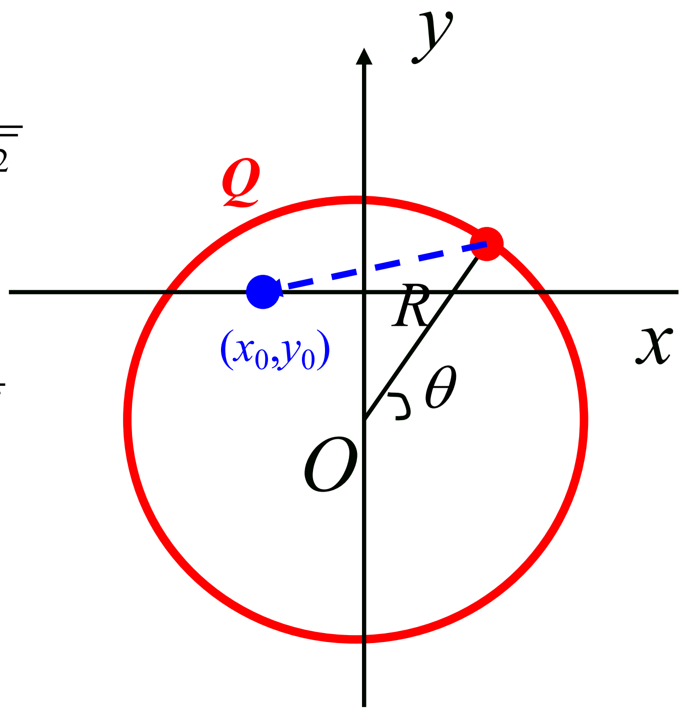




课堂练习

问题： 二维平面半径为R的圆环均匀带电，总电量为Q，求带电圆环在二维平面产生的电势分布，写出python代码并将计算结果用图形表示出来(物理常数、Q、R可设为1.0)。

$$V(x_0,y_0)=\frac{1}{4\pi\varepsilon}\int_0^{2\pi}\frac{Q}{2\pi R}\frac{Rd\theta}{\sqrt{(x_0-R\cos\theta)^2+(y_0-R\sin\theta)^2}}$$



令 $$f(\theta)=\frac{1}{4\pi\varepsilon}\frac{Q}{2\pi R}\frac{R}{\sqrt{(x_0-R\cos\theta)^2+(y_0-R\sin\theta)^2}}$$

$$V(x_0,y_0)=\int_0^{2\pi}f(\theta)d\theta$$

辛普生积分公式: $$V=\sum_{i=2,4,\ldots}^{N-1}\frac{1}{3}\left[f(\theta_{i-1})+4f(\theta_i)+f(\theta_{i+1})\right]\Delta\theta \qquad \Delta\theta=\frac{2\pi}{N-1}$$

$$\int_{0}^{2} (x^4 - 2x + 1)dx$$

作业

自行选择或设计一个普通物理，理论力学，或其他课程中涉及到的物理问题并用所学数值方法求解。要求该物理问题需要用到数值微分或数值积分算法。

要求：

1）所选择或设计的物理问题至少需要用到数值微分或数值积分之一；
2）写出计算用到的主要公式；
3）写出计算程序代码 (python)；
4）将计算结果用图形表示出来。
5）有一定原创性(勿从其他“计算物理”教材中照抄，可从普通物理，理论力学等物理课程教材中的题目选择或适当改进。)

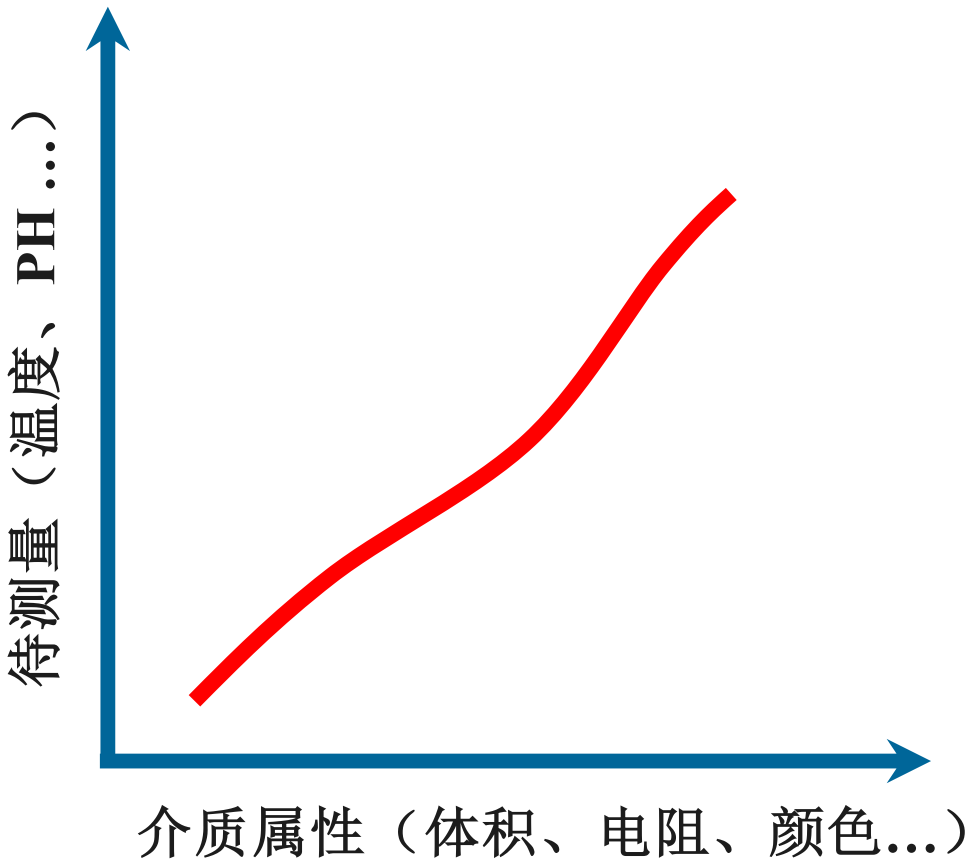
课后作业提交规则

作业提交：

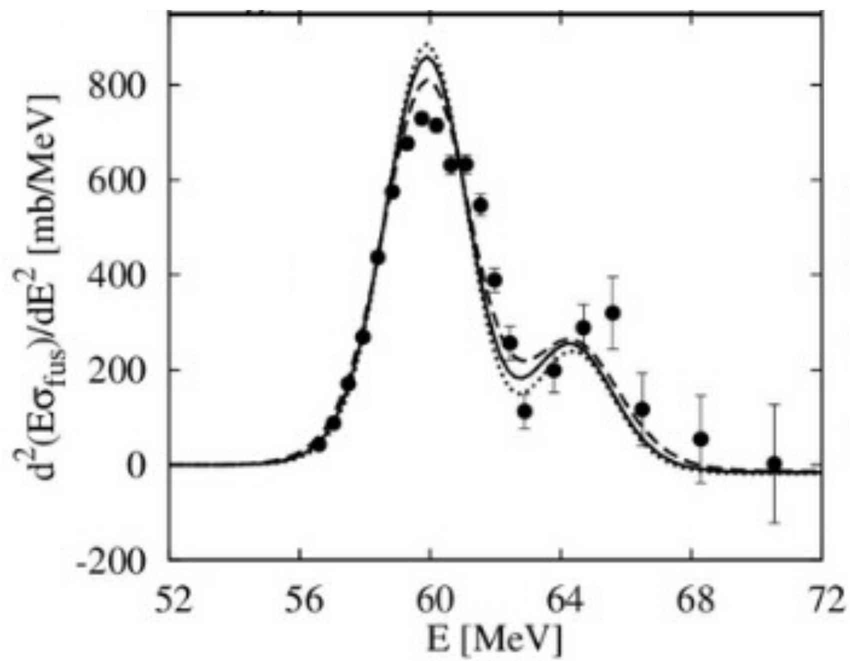
1.将作业所要求所有内容（包括代码）写入一个文档，
并转为 **PDF**格式。

2. 将**PDF**文件命名为 学号_**X**_姓名，其中**X**为第几次作业。
例如：131242034_1_杨振宁.pdf

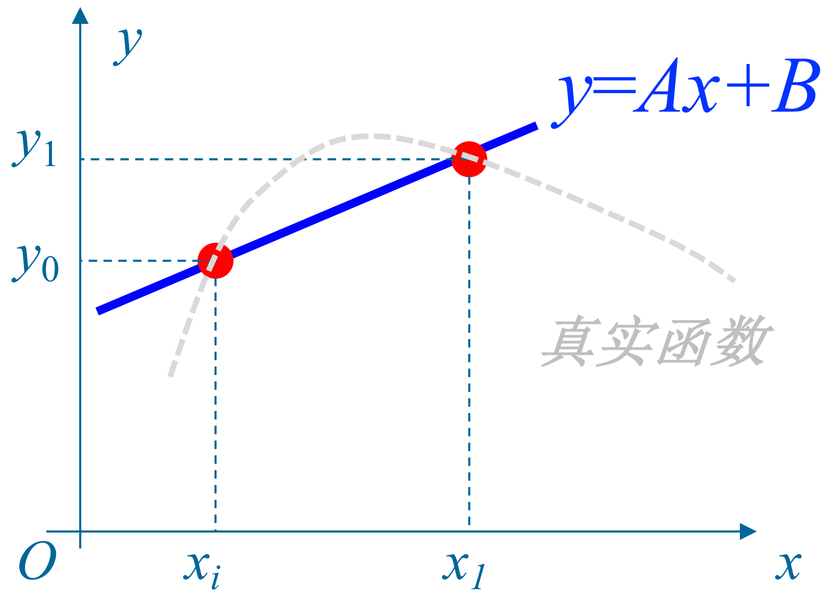
3.将**PDF**文件作为附件通过教学立方的作业功能上传
注意：**PDF**文件不超过**2MB**

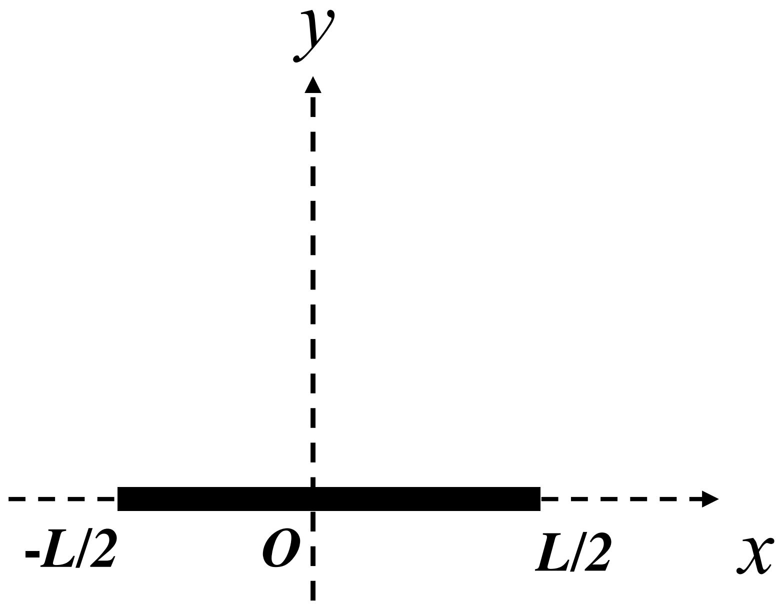

待测量（温度、PH...）
介质属性（体积、电阻、颜色...）

局部插值、避免全局差值。



$d^2(E\sigma_{fus})/dE^2$ [mb/MeV]
800
600
400
200
0
-200
52
56
60
64
68
72
E [MeV]


y
y=Ax+B
y1
y0
真实函数
O
xi
x1
x



y
-L/2
O
L/2
x