

概论

0.1 计算物理学概貌

0.1.1 计算物理学的意义

计算物理学是随着计算机技术的飞跃进步而不断发展的一门学科,在借助各种数值计算方法的基础上,结合了实验物理和理论物理学的成果,开拓了人类认识自然界的新方法。传统的观念认为,理论是理论物理学家的,

而实验是实验物理学家的事,两者之间不见得有必然的联系,但现代的计算机实验已经在理论和实验之间建立了很好的桥梁。一个理论是否正确可以通过计算机模拟并于实验结果进行定量的比较加以验证,而实验中的物理过程也可通过模拟加以理解。当今,计算物理学在自然科学研究中的巨大威力的发挥使得人们不再单纯地认为它仅是理论物理学家的一个辅助工具,更广泛意义上,实验物理学、理论物理学和计算物理学已经步入一个三强鼎立的“三国时代”,它们以不同的研究方式来逼近自然规律(图 0.1.1-1)。

计算机数值模拟可以作为探索自然规律的一个很好的工具,其理由是,纯理论不能完全描述自然可能产生的复杂现象,很多现象不是那么容易地通过理论方程加以预见。说明这个观点的一个最好的例子是,20 世纪 50 年代初,统计物理学中的一个热点问题是,一个仅有强短程排斥力而无任何相互吸引力的球形粒子体系能否形成晶体。计算机模拟确认了这种体系有一阶凝固相变,但在当时人们难于置信,在 1957 年一次由 15 名杰出科学家参加的讨论会上,对于形成晶体的可能性,有一半人投票表示不相信。其后的研究工作表明,强排斥力的确决定了简单液体的结构性性质,而吸引力只具有次要的作用。另外一个著名的例子是粒子穿过固体时的通道效应就是通过计算机模拟而偶然发现的,当时,在进行模拟入射到晶体中的离子时,一次突然计算似乎陷入了循环无终止地持续了下去,消耗了研究人员的大量计算费用。之后,在仔细研究了过程后,发现此时离子运动方向恰与晶面几乎一致,离子可以在晶面形成的壁之间反复进行小角碰撞,只消耗很少的能量。

因此,计算模拟不仅仅是一个数学工具。作为工具,我们至少知道结果应该如何,哪怕不了解具体过程。但是,在做计算模拟研究工作时,研究者经常偏离他们原来的目标,这是因为计算产生了新的发现,该发现不是研究者预先所能料到的。有时人们会说,“对啊,当然应该如此,我怎么没有事先想到呢?”事实

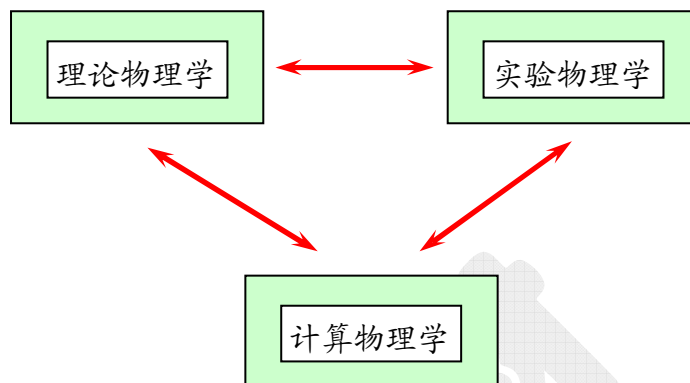


图 0.1.1-1 现代物理学三大类别之间的关系。

上是,如果你不做模拟的话,可能永远也想不到。这种从模拟中得到新的发现正是许多研究人员的乐趣所在。

相反的例子是,在计算物理学刚形成的早期时,由于许多人还认识不到计算机的威力,对于计算机的应用抱有各种观点。在 1957 年一次关于金属化学与物理的研讨会上,对于计算机能否用于追踪辐射损伤的级联效应过程出现了争议。其时 Metropolis 和 Ulam 等人已经进行了中子输运过程的计算机模拟,但一些人仍认为是不可能的,另外一些人认为不必要,还有人认为手工可以作得更好。于是该人被命去证实其观点,但他在数星期的尝试后最终还是放弃了。现今,各种粒子在材料中的输运过程已经成为计算机模拟的一种经典研究领域。

0.1.2 计算物理的形成历史

据查证,“计算物理”一词首次正式出现是美国在 1963 年开始出版的《计算物理方法》丛书。1959 年 5 月美国总统发布命令,可以揭开曼哈顿计划的内幕,部分内容可以解密。故以《计算物理方法》丛书的名义陆续编辑出版。这套丛书从 1963 年到 1977 年共出版 17 卷,内容涉及到统计物理、量子力学、流体力学、粒子物理、核物理、天体物理、固体物理、等离子体物理、原子与分子散射、地表波、地球物理、射电天文、受控热核反应和大气环流等方面的物理问题、计算模拟技术和方法以及反映当时水平的研究成果。这套丛书也大致反映了当时计算物理的整体概貌。

计算物理学学科形成的原始动力是美国核武器的研制,它是和计算机的诞生息息相关且是并肩发展的。这期间的几个人物起了重要作用: H. Aiken (1900-1973) 在哈佛大学做博士论文时需要计算空间电荷传导问题,于是计划设计一个计算机来求解。1937 年提出方案,1939 年得到 IBM 资助,1944 年建成投入使用。这台计算机在美国原子弹的研究设计中立了大功。J.W. Manchly (1907-1980) 是宾夕法尼亚大学物理博士,因从事天气预报需要,计划设计计算机,后接受美国陆军弹道研究所弹道计算任务。1942 年提出方案,1945 年底建成,这就是世界上第一台电子计算机 ENIAC 机。被称为计算机之父的 J. von Neumann (1903-1956) 参与了美国核武器研制,1944 年参与 ENIAC 的改进,1945 年提出 EDVAC 机设计方案(存储程序计算机),后在普林斯顿研制成 MANIAC 机,有力地支持了美国的氢弹研制。

在 Einstein 等一批物理学家的推动下,美国从 1942 年 8 月 13 日开始秘密实施“曼哈顿计划”,在理论物理、爆轰物理、中子物理、金属物理、弹体弹道各个领域中都需要进行大量的计算,如流体动力学、核反应过程、中子输运过程、辐射输运过程物态变化过程等涉及的都是十分复杂的非线性方程组。按照 von Neumann 的估计,其计算量可能超过人类有史以来进行的全部算术操作,因此必须首先研制计算机。1945 年制造出三颗原子弹:“三一”用于试验(7 月 16 日),“瘦子”投于广岛(8 月 6 日),“胖子”投于长崎(8 月 9 日)。1945 年 8 月 11 日日本宣布无条件投降后,作为原子弹之父的 Oppenheimer 等人纷纷辞职离开,

洛斯阿拉莫斯呈现一片荒凉景象。直到 1947 年春,军工部门为实验室拨款,一些科学家处于自身难保的境地,又纷纷回到实验室,从事理论研究,并扩大在物理、化学、工艺和生物等方面的研究范围。1949 年 8 月美国发现苏联第一次原子弹爆炸后,杜鲁门总统在 1950 年 1 月 31 日下令继续研究各种类型的原子武器,成立以氢弹之父 E. Teller 为首的氢弹研制小组。直到 1952 年 10 月 31 日爆炸了代号为“麦克”的核试验。苏联在 1953 年 8 月 8 日发表声明称氢弹的生产并不为美国所垄断,从此开始了新的核军备竞赛。

计算机最初是为开发核武器以及破译密码之用的,但在 20 世纪 50 年代初期就部分转为非军事用途,特别是 Metropolis 等人在计算机上尝试尽可能广泛的不同问题,以评价其逻辑结构及证实其能力。在 E. Fermi 的推动下,1952 年起洛斯阿拉莫斯实验室开始将计算机应用于非线性系统的长时间行为和大尺度性质的研究。1955 年 5 月由 Fermi 等编写的洛斯阿拉莫斯实验室报告中提出了许多重要物理问题,被许多人看成是计算物理的正式起点。总的来说,由于核武器的研制,在真实物理世界中发生的复杂物理过程必须通过计算机上的计算模拟来了解,因而计算物理也就不知不觉自然地而自然诞生了。计算物理、理论物理与实验物理相辅相成,相互促进共同发展,由此形成现代物理学的三大分支。

0.1.3 计算物理方法与作用

计算物理自形成后,其研究内容和应用领域迅速扩展。受它的影响,物理学中发展最快的领域有统计物理学、凝聚态物理学、粒子物理学、流体力学、非线性科学等几个学科。当然,只要是能够用数值计算和模拟的方法解决的物理问题都是属于计算物理学的范畴。而且,当今的计算物理学已经和化学、材料科学、生物学、地球与空间科学、气象学、工程技术等其它学科领域紧密结合,其研究方法和手段甚至已经渗透入经济和工业制造等社会活动的基本领域。

由于计算物理是一个多学科交叉的研究领域,往往需要物理学家、数学家、计算机科学家进行跨学科的协同合作,针对一个研究领域的前沿性挑战课题灵活运用基础数学理论(偏微分方程理论、线性代数、非线性规划等)和先进计算技术进行大规模数值模拟和分析。例如,因为提出电子密度泛函理论而获得 1998 年 Nobel 化学奖的 Kohn 在大学和硕士研究生阶段是学习应用数学的,在博士研究生时期跟随著名理论物理学家 Schwinger 转攻物理学,从而奠定了他的多学科的知识背景,为他在其后的计算凝聚态物理学上取得重大成就贡献打下了良好的基础。

计算物理的重要特点是模拟实验上不能实现或技术条件要求很高、实验代价昂贵的物理系统,如早期宇宙、强磁场、超高压、极低温和高温环境下的物理系统的行为、高温 Tokmak 装置中的输运过程和动力学。还有些系统实际上是人们不愿意做实验的,例如核反应堆事故和核污染的扩散。

计算物理学研究方法的一个独特性就是可以把研究对象的任何复杂层次统统包含进来,而不必像理论物理中那样经常要作近似和简化模型。计算物理的发

展不单纯是依靠计算机技术的进步和数值计算方法的发展,其中,研究对象日趋复杂也是驱动计算物理进步的一个重要因素。统计物理是计算物理最早涉足的领域,统计物理研究的体系中包含的粒子总数是非常巨大的,而用传统的解析方法研究时只能处理一些极为简单的问题,绝大多数问题都无法解决。如统计物理学中最简单而且应用最广的 Ising 模型,只能找到一维和二维的解析解,Hisenberg 模型只有一维解析解,而计算物理方法给统计物理的发展产生了极为深刻的影响。对于自旋玻璃问题,即使给定自旋间两两相互作用,但大量相互竞争的随机自旋对系统的集团行为仍然难以断定。目前统计物理学中最为成熟的计算机模拟方法是 Monte Carlo 方法,它使用计算机产生的伪随机数以随机的方式决定系统演变的动力学过程,使用这种模拟方法能够解决大量的统计力学问题。但是,随着系统粒子数的增加,计算量有可能是以幂指数的方式攀升,目前的计算机水平还不能完成任意宏观系统需要的计算量。

除统计物理以外,计算物理应用最为成功的领域还有凝聚态物理。大致上我们可以将计算物理的研究方法分为三类,即分子动力学方法、Monte Carlo 方法、第一性原理下的能带论计算方法。在经典分子动力学方法中,需要求解大量粒子的连立 Newton 方程的数值解,结合各态历经建立热平衡条件以实现细致平衡,系统的演变最后可以得到自由能最低状态。而量子力学下的分子动力学方法即为第一性原理分子动力学方法。现在分子动力学方法在生物科学领域发挥着重要作用,如研究蛋白质的折叠问题和药物分子设计等。

计算物理学的发展历程中,量子力学领域内的工作是非常关键的。相对论量子力学的奠基人 Dirac 曾说,物理学的一个重要分支—量子力学和整个化学所需要的所有基本规律都已经给出,接下来的工作应该由数学家来求解这些方程。但是,由于相对论量子力学方程的复杂性,即使是用近似方法也很难得到解析解。因此,Dirac 留给数学家的问题现在更多的是由物理学家采用计算物理学方法来解决的。大多数量子模拟的基础是 Feynman 的路径积分以及相对应的量子 Monte Carlo 方法。Wilson 提出采用离散点阵进行量子场论的计算,称为格点规范场,它可以定量计算强子的质量谱,因此粒子物理学家不再单纯地依靠造价昂贵的加速器进行实验研究,还可以运用计算机进行虚拟测量。量子 Monte Carlo 还用来模拟原子核结构。

上世纪 20 年代,在 Schrodinger 给出非相对性波动方程后,原则上应该可以计算出原子和分子的电子态。但是,可以解析求解的系统仅限于氢原子,而由两个氢原子的氢分子和两个电子加两个质子组成的氦原子就已经无法求解了。在统计物理的平均场近似的思路下,Hartree 和 Fock 提出了广泛应用于物理化学的 Hartree-Fock 方法。它利用自洽理论,在大量迭代中得到收敛的结果,是处理分子中的多电子体系的实用而成功的数值方法。但随着电子数的增加,该方法的计算难度也大大增加。Hohenberg 和 Sham 在 1964 年提出了一个重要的计算思想,证明了电子能量由电子密度决定。因而可以通过电子密度得到所有电子结构的信息而无需处理复杂的多体电子波函数,只用三个空间变量就可描述电子结构,该

方法称为电子密度泛函理论。按照该理论,粒子的 Hamilton 量由局域的电子密度决定,由此导出局域密度近似方法。多年来,该方法是计算固体结构和电子信质的主要方法,将基于该方法的自洽计算称为第一性原理方法。

基于局域密度泛函的第一性原理方法对于电子基态的计算是非常准确的,与基态相关的电子能带结构、结合能、声子谱等都能用该方法进行定量计算。但是在计算固体的光学性质或介电函数时要求知道激发态的波函数,因此 80 年代之前还不能用第一性原理方法来确定固体的光学性质。其后,在电子 Green 函数中用屏蔽 Coulomb 势计算电子自能方法的基础上,发展了用第一性原理方法计算实际体系准粒子能量的方法,这才可以计算固体的各种光学响应性质。

除了上述的方法之外,还有很多计算固体的电子结构、基态、相图等其它方法。如集团变分法是求解固体基态和相图最为有效和常用的方法,它根据原子组成集团的思路给出难于求解的固体系统的熵,从而给出自由能和系统构型之间的关系,这种方法已经给出许多实验难以得到的结果。主方程法在处理相变和生长动力学方面是相当成功的。结合第一性原理的计算已能得到各种金属、半导体合金和化合物的相图以描述平衡态。对于非平衡生长中的大尺度行为则主要采用 Monte Carlo 方法。

计算物理学的另外一个重要应用是在实验数据处理方面,它不仅仅包含用模拟和分析手段来为物理系统能够提供观察力和解释的作用,而且在海量数据的获得、处理和理解以检测罕见的信号等各个方面发挥着重要作用。例如,在粒子加速器中的实验时,或者是在探测未知生命的研究中的全天全波段观测时,产生的数据量超过万亿字节,从这些数据中要进行分析 and 处理已筛选出可用数据,发现规律,则必须借助于计算机和计算物理方法。又如,由二维核磁共振求得大分子结构的一种有效方法是,将实验数据输入至分子动力学模拟,在计算机上求得能量有利且与核磁共振数据相符的结构。同样,在研究地球大气的地球物理学中也要分析气象卫星发回的大量气象数据。

0.1.4 计算物理方法与尺度

计算物理所使用的数值计算方法中,主要有三大支柱,即差分法、线性代数、随机方法。差分法中,使用变量在离散取值时的函数差值取代函数微商。历史上 Newton 和 Leibniz 发展微积分时正是将有限差分推广至无限小时得到了微商,但当微积分建立后,就如现今的计算机热一般,物理学家开始大量使用无限小微商进行解析计算,而将历史古老的有限差分法束之高阁,一度几乎被人遗忘。然而,这个方法在计算机出现后的今天又重新焕发青春。如天体中的两体相互作用问题,虽然可以通过微积分严格求出轨迹,但是一旦遇到多体相互作用情况,人们还是不得不用有限差分这个老办法,这时相互作用势形式不拘,极大地拓展了研究范围。与解析解相比,其代价是轨迹只能按有限点的空间坐标表的形式给出。基于有限差分法的经典力学模拟在现代发展成为分子动力学方法。线性代数的应用的领域非常广,例如,应用有限差分将微分方程变成线性方程组后,我们可得

到一个系数矩阵, 其主对角是非零的, 这时问题即转化为典型的线性代数问题, 而本征矢和本征值问题也是量子力学所要解决的基本问题。随机方法是伴随计算机诞生而新产生的一种方法, 其直接起源来自于二次大战中原子弹的设计。为了描述中子的输运过程, Fermi 等人用随机的方式抽样单个中子的运动轨迹, 通过计算大量的中子轨迹, 可以得到给定位置处的中子通量。由此发展出的 Monte Carlo 方法特别适用于计算统计力学过程中的热力学变量, 与粒子随机运动轨迹的模拟相似, 这时主要用随机步骤抽样 N 粒子的高维正则相空间。由 Monte Carlo 方法基本原理出发派生出的模拟退火优化方法可以寻找出函数的全局最小值, 广泛用于科学问题中高维空间中多变量函数的最优化问题。另外一种称为遗传算法的随机方法也可得到多变量函数的最小值。

将上面的三大数值计算方法与描述物理现象的各种方程结合产生了多种计算物理方法。计算物理可以分为不同的层次(核与粒子、原子分子、纳米、介观、宏观), 而不同层次的物理现象不同, 描述现象的物理规律不同, 计算涉及的时间和空间尺度也是不一样的。所需计算资源大致正比于物理现象的时间尺度、粒子数的幂指数、计算复杂性。在核与粒子层次($<10^{-11}\text{m}$, $<10^{-16}\text{s}$)主要是量子 Monte Carlo 方法。在原子分子层次($10^{-11}\text{-}10^{-8}\text{m}$, $10^{-16}\text{-}10^{-12}\text{s}$)有结构和电子性质两方面的计算, 结构计算有 Monte Carlo 方法、分子动力学方法、集团变分法等。电子性质主要是能带计算, 由于结构和电子性质是相互关联的, 所以目前的方法往往是结合两者的与第一性原理分子动力学方法。纳米层次($10^{-9}\text{-}10^{-6}\text{m}$, $10^{-13}\text{-}10^{-10}\text{s}$)的研究是当今凝聚态物理研究的热点, 由于纳米尺度下涉及数百至数十万个原子, 所以需要由高性能计算机来处理纳米尺度下的计算问题, 目前第一性原理计算可以处理数百个原子的计算。在介观层次($10^{-6}\text{-}10^{-3}\text{m}$, $10^{-10}\text{-}10^{-6}\text{s}$)下, Monte Carlo 方法和分子动力学方法仍然起着关键的作用, 可用于多达数十万甚至数百万个原子的计算。对于宏观层次($>10^{-3}\text{m}$, $>10^{-6}\text{s}$), 其物理行为由经典力学和连续力学描述。在不同尺度之间往往需要对不同方法进行衔接, 从而进行跨尺度的计算。对于介观和宏观之间如何进行有效的计算仍是有待解决的挑战问题。

0.1.5 计算技术的发展

计算物理的工具或者说实验条件就是计算机, 计算物理的进步得益于超级计算机的发展和 PC 机的普及应用。第一台电子计算机 ENIAC 由 18000 个电子管组成, 重达 30 吨, 计算速度仅为每秒 5 千次, 存储容量为千位。由于核武器研制需要所刺激起来的计算机技术最终以雪崩之势发展成为一门战略工业——电子计算机行业。20 世纪 50 年代诞生了晶体管, 60 年代中期出现了硅平面工艺, 集成电路成为独立的工艺, 而且可借助于计算机本身的力量而精益求精。60 年代中期开始推出小型计算机, 70 年代末推出个人计算机, 80 年代中期又推出高性能的大型和超级计算机, 90 年代超级计算机达到每秒 10 亿次(G)浮点运算的水平, 现在已经超过万亿次(T)。就连超级计算机这一名称也成为动态的, 现代的

PC 机已经达到 80 年代超级计算机 CRAY 机的水平。除了应用泛用型计算机外,还出现了粒子物理和天体物理中专用的超级计算机,它们在硬件上对内存容量很大或针对有频繁出现的物理因子的运算方面有着特别的设计。

按照 Moore 定律, CPU 处理器的速度每一年半增加一倍, 并且成本降低, 使得用户以更小的代价取得更为重要和准确的计算结果。例如, 最早的分子动力学只能模拟 32 个粒子, 而现在已能进行上百万个粒子。早期的 Monte Carlo 模拟物质中粒子的输运过程时只能模拟千个粒子, 而现在可以模拟上百亿个粒子, 极大地扩展了应用范围并提高了准确性。

现代的超级计算机更常被称为高性能计算机, 它要求不仅仅是高速度, 而且是大内存、优异的网络与可视化环境, 目前高性能计算机要求 1T 浮点运算速度、1T 字节内存容量、1T 字节每秒的 I/O 带宽, 即 3T 性能目标。并行计算已成为高性能计算的主流, 并行处理技术不仅用于超级计算机上, 用户个人也可用多台 PC 机组装运行在 Linux 操作系统下的 PC 机群(cluster)。Fortran 语言一直是物理学中进行大规模计算最常用和最快速的编程语言, 近年来与其它如 C/C++ 等语言的结合也越来越流行。

算法上的革新是计算物理学家最重要的研究内容。随着体系尺度的扩展, 通常计算量与自由度成幂指数增加, 而我们希望的最佳算法是计算量仅随尺度成线性增加。对于分子动力学和 Monte Carlo 计算, 线性关系是很容易设计的。相对来说, 量子散射问题具有指数性的复杂度, 从上世纪中叶起处理两体散射到现在处理电子与氢原子碰撞电离时的三体问题。即使对于简单系统仍有许多复杂问题有待解决, 如表面溶解、高分子运动、蛋白质折叠、玻璃体系等中的问题。现在量子 Monte Carlo 方法已经开始成熟, 其速度可以超过局域密度泛函方法。第一性原理计算仍只适用于弱电子关联体系, 如何对强电子关联体系进行第一性原理计算是将来努力的方向, 这方面的研究需要计算物理学家和理论物理学家进行更好的合作。

0.1.6 科学计算和战略计算

1981 年以哈佛大学 W.H. Press 为首的 11 位著名科学家联名上书, 向美国国家科学基金会呈送了《发展计算物理的建议书》, 大声疾呼计算物理发展正处于一个危机阶段, 提出建立国家范围内的网络计算系统, 包括管理通讯的网络, 大型超级计算机, 可供用户使用的阵列处理机, 图像显示设备等。这会给计算物理带来所需要的存储容量和计算能力。

1983 年在美国国防部、能源部、国家科学基金会及国家航天局等单位主持下由数学家 P. Lax 为首的不同学科的专家委员会向美国政府提出的报告之中首次出现了“科学计算”一词, 它强调了“科学计算是关系到国家安全、经济发展和科技进步的关键性环节, 是事关国家命脉的大事”。当时轰动美国朝野, 总统科学顾问随即到国会作证, 政府迅速采取措施。1984 年政府大幅度地增加对科学计算经费的支持, NSF 建立了“先进科学计算办公室”, 制定全面高级科学计算发

展规划;连续5年累计拨款2.5亿美元。新建成五个国家级超级计算中心(分别在普林斯顿大学、圣地亚哥、伊里诺大学、康奈尔大学、匹兹堡),配备当时最高1987年起NSF把“科学与工程计算”、“生物工程”、“全局性科学”作为三大优先重点支持的领域。

1990年美国国家研究委员会发表《振兴美国数学:90年代的计划》的报告,建议对由计算引发的数学给予特殊的鼓励和资助。因为这种数学将成为有效地使用已在运转的或已设计好的许多超级计算机所必需的工具。关于算法或计算方法的研究是高度数学性的,涉及到数学科学的许多分支。计算机为数学提供了一条通往科学和工程技术每个领域的重要通道,也开辟了一个数学时代。报告指出由于大存储的高速计算机的使用已导致了科学和技术方面的两大突出进展:一是大量用于设计工作的实验被数学模型的研究逐步取代,如航天飞机设计、反应堆设计、人工心瓣膜设计等。二是能获取和存储空前大量的数据,并能提取隐秘的信息,如计算机层析X射线摄影,核磁共振等。

1991年以美国总统倡议的名义提出了《高性能计算与通信(HPCC)计划》,这是为了保持和提高美国在计算和网络的所有先进领域中的领导地位而制定的。该计划为期五年(1992-1996),由美国8个重要部门负责实施。投资的重点是发展先进的软件技术与并行算法,关键技术是可扩展的大规模并行计算。要求到1996年高性能计算能力提高14倍,达到每秒万亿次浮点运算速度。计算机网络通讯能力提高1百倍,达到每秒 10^9 位。该计划中列举的“挑战”项目有:磁记录技术、药物设计、催化、燃烧、海洋模拟、臭氧洞、空气污染、高速民用运输机、数字解剖、蛋白质结构设计、金星成像等。

1995年,在美国为确保核库存的性能、安全可靠性和更新需要而实施的《加速战略计算创新(ACSI)计划》中首次出现了“战略计算”一词。这是因为美国克林顿总统在1995年宣布“美国决定谋求真正的零当量全面禁止试验核武器条约”。这并不意味着核竞赛的结束,恰恰相反是核武器计划新时代的开始,要求通过逼真的建模和模拟计算来取代传统的反复试验的工程处理方法。这主要依赖于先进的数值计算和模拟能力,为此应用程序必须达到高分辨、三维、全物理和全系统的水平。为了确保该目标的实现,采取了五项相互关联的策略措施:1、建立协调一致的管理,在三个防务计划实验室(洛斯阿拉莫斯、圣地亚和利弗莫尔)基础上组成战略计算和模拟办公室,由负责国家防务的副部长指挥领导;2、致力于开发高级应用软件;3、致力于发展高性能计算;4、建立解决问题的环境;5、促进战略联合和协作。能源部在总统宣布决定后的11天就采购了世界上最快的一台计算机(运算速度超过万亿次)交付圣地亚实验室。1995年10月建成三个防务实验室之间第一个高速数据网络。1996年2月能源部购买两台运算速度达3万亿次的计算机分别安装在洛斯阿拉莫斯实验室和利弗莫尔实验室。计划2000年达到10万亿次,到计划完成时的2003-2004年,达到100万亿次。ASCI的学术战略合作计划(ASAP)在1997年8月通过招标和签订合同方式,建立了五家合作中心:斯坦福大学的湍流综合模拟中心、加州理工学院的模拟材料动态

特性的计算中心、芝加哥大学的天体物理学热核反应瞬间闪光研究中心、犹他大学的意外火灾与爆炸模拟中心、伊利诺斯州州立大学的助推火箭模拟中心。

1998 年 1 月, 美国副总统戈尔在美国加利福尼亚科学中心的演讲中首次提出“数字地球”的全新概念。为了能够获取、储存、处理并显示有关地球的空前浩瀚的数据以及广泛而多样的环境和文化数据信息, 我们需要一个数字地球——一种可以嵌入海量地球数据的、高分辨率的关于地球的三维表示。需要一个没有墙的合作实验室, 让科学家去弄清人与环境之间的错综复杂的奥妙关系。为此需要的技术有: 计算科学、海量储存、卫星图像、宽带网络、互操作、元数据等。列为首位的是计算科学, 它的作用是非常明显的: “在发明计算机之前, 用实验和理论的方法来研究都很受限制。许多实验科学家想研究的现象都很难观察到——它们不是太小就是太大, 不是太快就是太慢, 有的一秒钟之内就发生了十亿次, 而有的十亿多年才发生一次。另一方面, 纯理论又不能预报复杂的自然现象所产生的结果, 如雷雨或飞机上空的气流。有了高速的计算机这个新工具, 我们就可以模拟以前不可能观察到的现象, 同时能更准确地理解观察到的数据。这样, 计算科学使我们能超越了实验与理论科学各门的局限。建模与模拟给了我们一个深入理解正在收集的有关地球的各种数据的新天地”。

1998 年 7 月美国能源部等组织了关于“先进科学计算”的全国会议, 强调科学模拟计算的重要性, 希望应用科学模拟来攻克复杂的科学与工程难题。号召科学技术工程界更广泛地使用高性能超级计算机, 动员更多的人才来从事软件、算法、通信基础设施、可视化系统的研究和开发。1998 年 9 月, 美国能源部在全国范围内倡议实施《科学模拟计划 (SSP)》, 提出要加速燃烧系统与全球气候系统这两大应用领域的科学模拟研究, 希望在五个方面的工作能得到全国的大力支持: 算法, 其它方法与库技术; 解决问题的环境与工具; 分布式计算与协同计算环境; 可视化处理与数据管理系统; 系统体系结构与平台战略研究。

1999 年初美国总统信息技术顾问委员会提出一项题为《21 世纪的信息技术: 对美国未来的大胆投资》的报告 (IT2 计划)。美国在 2000 年度财政预算中有关信息技术方面的投资达 3.66 亿美元 (增加 28%), 重点投资的三个领域是: 长期信息技术研究; 用于科学、工程和国家的高级计算; 信息革命的经济和社会意义研究。将在超级计算机、数学模拟和网络等方面取得新的进步, 开创一个新的迈向自然世界的窗口——使得计算作为科学发现的一种工具, 而和理论及实验具有同等的价值。

2005 年 8 月的国际 500 强计算机系统的排名中, 第一位是 IBM 的 BlueGene, 运算速度为 137 万亿次, 我国最高性能的计算机是位于上海生命科学研究中心的曙光 4000A 计算机系统, 运算速度为 8 万亿次, 国际排名第 31 位。联想集团在 2005 年 8 月宣布开发 1000 万亿次机型, 美国计划在 2010 年推出。

0.2 学习方法

鉴于上述的计算物理的重要性, 本科生有必要在大学阶段了解计算物理的一

些基本方法和研究手段,以便在今后的科学研究中有所应用。因此,“计算物理”课程是科大理学院物理类学生院必修课,该课程分为“核(物理)”与“非核(物理)”两类。严格来说,两类课程涉及的主要方面应是一致的,有区别的仅在于计算方法的应用领域和专题内容。根据本作者的兴趣,该非核类讲义主要论述计算物理方法在凝聚态物理、统计物理、量子物理等方面的应用,未来可能还包括非线性物理以及正在迅速发展的某些前沿和非传统方法。但是,在上本课之前,学生仅学过(或正在学习)量子力学课,统计力学和固体物理等相关课程的知识尚不具备。因此,第一性原理分子动力学等与固体物理相关的计算内容没有包含在内,对于量子力学和统计力学方面的运用涉及深度也较浅,而且在此之前有简单的引论。建议同学在课程进行到相应内容阶段时,应预习一些统计力学讲义和复习量子力学内容。但作者相信,通过本课程的学习,应对以后深入理解统计力学有所帮助,例如,理解 Ising 模型的 Monte Carlo 模拟过程和结果就能懂得系综平均等概念。

在学习本课程之前,学生接触到的物理课程无论是普通物理还是四大力学,内容上主要是进行抽象分析和理论推导,其结果也是解析性的。然而,对于如何将这些理论知识应用于具体的科研问题知之甚少,而该课程可以视为将理论付诸于实践的第一步。因此,本课程强调自我思考和自己动手。根据国际上其它著名高校的教学方式,要求学生在课堂听讲之后,通过作业进行编程计算等手段真正掌握一些研究方法。作业要求同学针对指定的计算模拟问题,编程查错、分析数据、完成报告。报告中要求写明算法、计算结果、数据分析(绘图)、结论及其它个人的看法。除此之外,针对同学不善于或不愿意查看文献资料的弱点,要求学生必须调研一些文献,写出调研报告。通过作业和报告等反映出的同学对具体问题的理解深度、掌握的水平、创造性思维的力度、能力的发挥程度将作为本课程最终判分的主要依据。

目前国内有关计算物理方面的教材仍然少见,本讲义主要参考了国内外几十种最新的有关计算物理的教材和各相关领域内的研究著作,力图在讲授基础的同时与研究的前沿应用相关联。在结构上是按照所采用的计算方法来编排的,对每一种主要的方法,结合各个领域(主要是凝聚态物理)内的许多实际应用进行讲述。本讲义目前是第四稿,在第一稿(用于 9922 和 0022 班的应用物理专业(凝聚态物理方向)和天文学专业)、第二稿(用于 0102 和 0122 班的应用物理专业(凝聚态物理、微电子方向)、光学专业和天文学专业)、第三稿(用于 0202 班的应用物理专业)的基础上改正了错误,补充了许多内容。在此对所有提出修改意见的同学致谢。

本讲义仅限于校内教学目的使用。版权所有。

0.3 课程主要参考书目

- [1] R.H. Landau and M.J. Paez Mejia, Computational Physics: Problem Solving with Computers (John Wiley & Sons, New York, 1997) (该书浅显易懂,主要讨论各

个领域的应用, 包括高性能计算知识, 附录有C和FORTRAN程序)。

- [2] H. Gould and J. Tobochnik, *An Introduction to Computer Simulation Methods* (Addison-Wesley, 1996) (主要按应用领域叙述, 浅显易懂, 并用举例和BASIC程序行说明, 尤其是对参考文献的说明较细。尽管如此, 对计算物理的整体框架描述不够)。
- [3] F.J. Vesely, *Computational Physics: An Introduction* (Kluwer Academic, New York, 2001) (一本很好的教科书, 在计算方法和应用方面结合较好, 内容深浅适当, 公式推导较细, 但应用领域涵盖不够)。
- [4] N.J. Giordano, *Computational Physics* (Prentice-Hall, 1997) (较好的本科教材, 内容不深, 公式较少, 但对结果的物理分析很透彻)。
- [5] S.E. Koonin, *Computational Physics* (Addison-Wesley, 1986) (该书有BASIC和FORTRAN两个版本, 内容一样, 但附录中的程序语言不同。叙述精炼, 应用内容不多, 有些问题较为高深。附录程序占几乎一半篇幅)。
- [6] S.S.M. Wong, *Computational Methods in Physics and Engineering* (World Scientific, 1992) (该书有世界图书出版公司中国重印版) (内容更侧重于计算方法, 编排也是按照方法, 对物理的应用较少, 叙述较为细致)。
- [7] D. Rabbe, *Computational Materials Science* (Wiely-VCH, 1998) (中文译本: D. 罗伯(编著), 项金钟、吴兴惠(译), 《计算材料学》, 化学工业出版社, 2002年) (该书对不同空间尺度(纳观-微观-介观-宏观)下的材料科学模拟方法分别作了概要性介绍, 有助于把握计算物理在材料科学应用中各种方法的框架, 内容偏向于力学性质, 叙述不够细, 列出了许多原始性论文, 主要引导读者参看原文)。
- [8] T. Pang, *An Introduction to Computational Physics* (Cambridge University Press, 1997) (该书有世界图书出版公司中国重印版) (应用有浅有深, 总体来说内容过于艰深, 叙述也不够细)。
- [9] J.M. Thijssen, *Computational Physics* (Cambridge University Press, 1999) (该书内容主要涉及理论物理和凝聚态物理领域, 内容较细也较高深, 适于研究生)。
- [10] A.R. Leach, *Molecular Modelling: Principles and Applications* (Prentice-Hall, 2001) (该书有世界图书出版公司中国重印版) (内容主要是在分子层次包括高分子和蛋白质等大分子体系中的各种计算方法, 内容在应用方面的叙述极为详尽, 对具体算法讨论很少, 附有大量原始参考文献, 适合物理、化学、生物学科的研究生和本科生)。
- [11] K.H. Hoffman and M. Schreiber, *Computational Physics* (Springer, 2001) (《计算物理学》, 科学出版社影印版) (该书由若干个应用专题编辑而成, 是纯研究性书籍, 内容艰深, 仅适于研究人员或专门从事相应领域的研究生)。
- [12] D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications* (Elsevier, 1996) (中文译本: Frenkel & Smit(著), 汪文川等(译), 《分子模拟-从算法到应用》, 化学工业出版社, 2002年) (该书侧重

经典粒子体系的Monte Carlo和分子动力学模拟, 叙述详细)。

[13] 马文淦,《计算物理学》(中国科技大学出版社, 2001年)(论述了几种主要计算物理方法)。

[14] 郝柏林、张淑誉,《物理学和计算机》(科学出版社, 2005年)(计算物理的入门科普读物)。

参考文献

[1] 倪军、刘华,“计算物理前沿及其与计算技术的交叉”,《物理》, 2002年07期(本章前半主要内容)。

[2] 张锁春,“计算物理→科学计算→战略计算”,《计算数学通讯》, 2000年02期,
<http://www.bast.cn.net/kjbk/jssxtx/2000.2/b0804-01.htm> (本章后半主要内容)。