# 计算物理B

## 第七章 计算机代数

主讲：张志勇
zzyzhang@ustc.edu.cn

# 本章教学内容

- ❑ 计算机代数简介
- ❑ Mathematica简介
- ❑ Mathematica经典物理应用举例
- ❑ Mathematica在量子力学中应用举例

# 计算机代数

# 定义

## ❑ 计算机代数，即符号计算

利用计算机进行科学运算大致分为

**数值计算：**

基于<u>**有限精度数字**</u>进行的计算

（数字 → 数字）

$$y = 1 + 3 = 4$$

$$z = 4 - 3 = 1$$

$$\Rightarrow y + z = 5$$

**符号计算：**

基于<u>**数学符号**</u>进行的数学公式运算

（公式 → 公式）

$$y = x + a$$

$$z = y - a$$

$$\Rightarrow y + z = x + y$$

**数值计算：**

在问题明确时简洁高效，例如

$y = f(x)$， $x = a$

问题复杂时有可能近似效果不好且低效，如一些积分计算，

$y = \int f(x)\, dx$

**符号计算：**

利用计算机可在一些场合大幅提高对繁琐公式推导效率和准确率，找出背后规律，例如，展开 $y = (x + z)^{10000}$，简化$y = F(f(x), \ldots, z(x)) \rightarrow \sin(x)$

**求解复杂问题有时会先由符号计算来推导和简化，然后进行数值求解**

# 应用于数学

- 计算机代数促进了诸如数论的发展
- 新领域“实验数学”必不可少的工具

例：圆周率研究中的

Bailey-Borwein-Plouffe (BBP)公式[1]

$$\pi = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{16^i} \left( \frac{4}{8i+1} - \frac{2}{8i+4} - \frac{1}{8i+5} - \frac{1}{8i+6} \right)$$

➔ 借助类符号计算语言PSLQ找到了此关系式，之后再严格证明，使得利用极低复杂度计算π的任意一位16进制数成为可能。

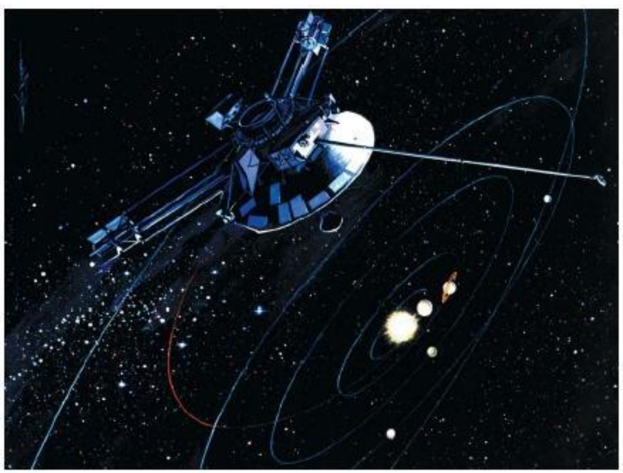
*1. Mathematics of Computation, 66(218):903-913, 1996*

# 应用于物理

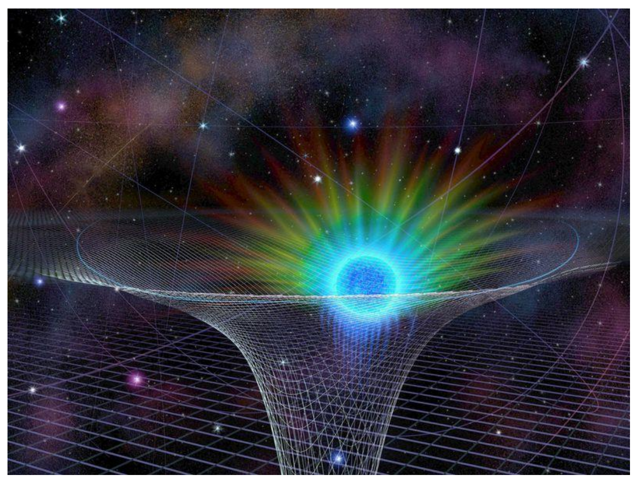
## ❑ 对于物理研究而言

- ➢简洁的物理原理/公式 ⇔ 复杂的物理世界
  - ✓ 求解并探索世界往往非常繁琐
  - ✓ 计算机代数使某些问题得到有效的求解

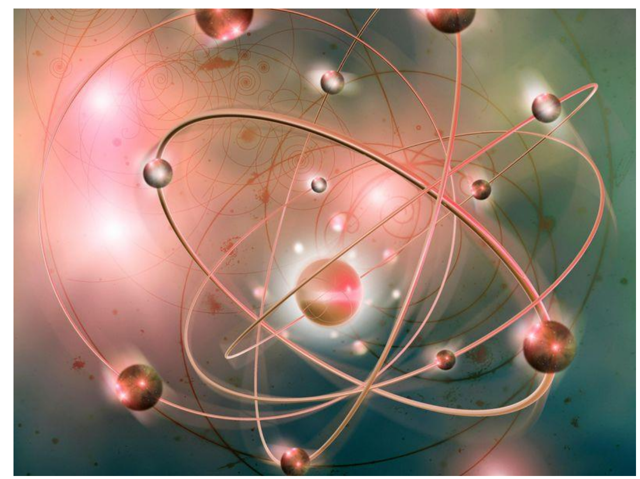
*例如：*



*轨道力学*



*广义相对论*



*微观量子世界*

## ❑ 物理理论+计算机代数+数值计算

➢ 许多人在计算机代数的演化中做出突出贡献

*例如:*

Martinus J.G. Veltman
Facts

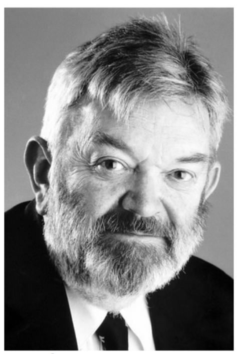


Photo from the Nobel Foundation archive.

Martinus J.G. Veltman
The Nobel Prize in Physics 1999

Born: 27 June 1931, Waalwijk, the Netherlands

Affiliation at the time of the award: University of Michigan, Ann Arbor, MI, USA

Prize motivation: "for elucidating the quantum structure of electroweak interactions in physics."

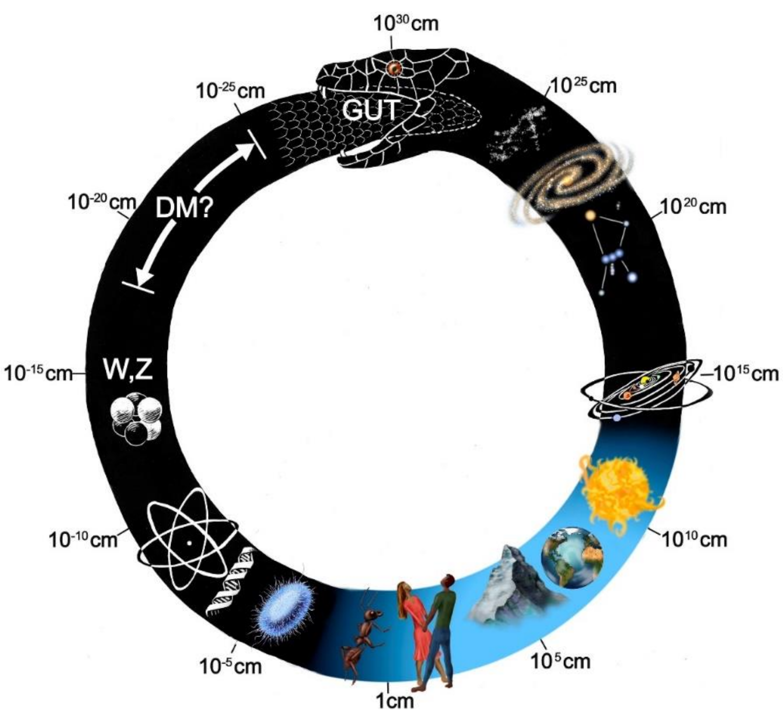
Prize share: 1/2

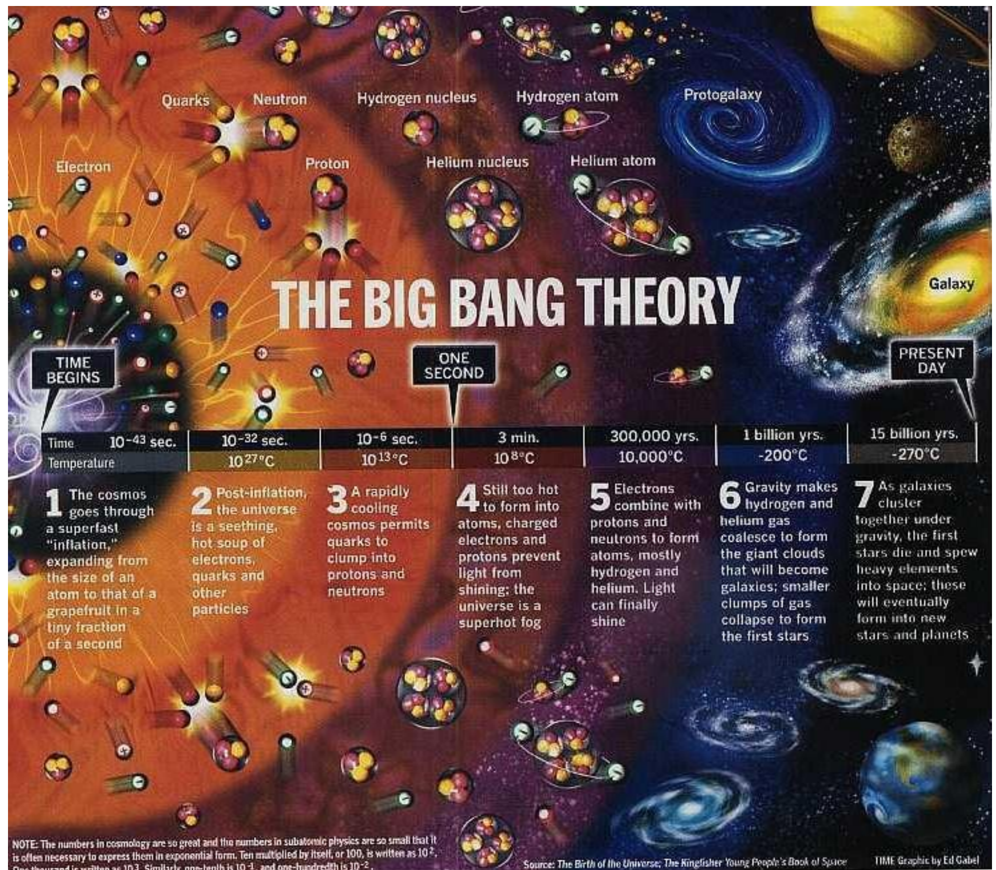
获诺奖的其中一项重要贡献是，发明的早期粒子物理的计算机代数程序SCHOONSCHIP，使得快速计算复杂的粒子散射振幅成为可能

曾提到最初写该软件的动机

"... in doing the necessary algebra for vector boson production I was ***often exasperated*** by the effort that it took to get an ***error free*** result, even if the work was quite mechanical..."

- 物理理论+计算机代数+数值计算+物理实验
  - 促成了现代物理科学的飞速发展
  - 使得人类在短短几十年间探索范围急剧增长



# 发展历史

arXiv:hep-ph/0209234v1

- 60’ LISP – 列表编程语言，和数值计算的重要软件FORTRAN处于同一时期
- 早期应用集中于轨道力学，粒子物理；特别是后者催生了许多新一代语言/软件的诞生
- REDUCE是传统软件中应用很广的一个，到现在还在发展维护

https://sourceforge.net/projects/reduce-algebra/

| | | |
|---|---|---|
| | *The early days, mainly LISP based systems* | |
| 1958 | FORTRAN | |
| 1960 | LISP | |
| 1965 | | MATHLAB |
| 1967 | | SCHOONSHIP |
| 1968 | | REDUCE |
| 1970 | | SCRATCHPAD, evolved into AXIOM |
| 1971 | | MACSYMA |
| 1979 | | muMATH, evolved into DERIVE |
| | *Commercialization and migration to C* | |
| 1972 | C | |
| 1981 | | SMP, with successor MATHEMATICA |
| 1988 | | MAPLE |
| 1992 | | MuPAD |
| | *Specialized systems* | |
| 1975 | | CAYLEY (group theory), with successor MAGMA |
| 1985 | | PARI (number theory calculations) |
| 1989 | | FORM (particle physics) |
| 1992 | | MACAULAY (algebraic geometry) |
| | *A move to object-oriented design and open-source* | |
| 1984 | C++ | |
| 1995 | Java | |
| 1999 | | GiNaC |

*Computers in Physics 3, 66 (1989)*

**1960** **1970** **1980** **1990**

FORMAC (IBM):
最早系统，
功能有限

**LISP (MIT):**
最早系统，适用于符号计算，为后面一些系统的基础，当今继续在人工智能领域使用

MATHLAB (MIT):
基于LISP开发

**早期计算机代数的发展与计算机以及物理发展最快的领域相关**

*Computers in Physics 3, 66 (1989)*

**1960** **1970** **1980** **1990**

ALTRAN (Bell): 专注有理数计算，基于FORTRAN

**REDUCE (Cavendish)**: 基于LISP，先用于粒子物理，后拓展

MACSYMA (MIT): MATHLAB升级版

SCRATCHPAD (IBM): 源自FORMAC，后升级AXIOM

MuMath (Company) 后升级为Derive

**Maple (U. Waterloo):** 基于C语言

**SMP (Caltech):** 基于C语言，后面发展为 **Mathematica**

# 当前主流软件[1]

| Program | License | Internal implementation language | CAS language |
| --- | --- | --- | --- |
| Mathematica [12] | Commercial | C/C++ | custom |
| Maple [11] | Commercial | C/C++ | custom |
| Symbolic MATLAB toolbox [30] | Commercial | C/C++ | custom |
| Axiom[1] [22] | BSD | Lisp | custom |
| SymPy [19] | BSD | Python | custom |
| Maxima [20] | GPL | Lisp | custom |
| Sage [18] | GPL | C++/Cython/Lisp | Python[2] |
| Giac/Xcas [31] | GPL | C++ | custom |

*实践中根据自身需求选择[2]：*

通用 与 专用
商业 与 开源
汇编/C/C++ 与 解释语言

⇔

功能强大 与 特定问题解决效率
功能支持 与 免费且可查学源码
更快 与 更好写

1. *Symbolic Computing, DOI: [10.1007/978-3-540-70529-1_429](10.1007/978-3-540-70529-1_429)*
2. *虽然本课程以Mathematica为例讲解部分内容，但这不代表Mathematica是最好*

# 基本功能

| 功能 | 说明 |
| --- | --- |
| 不限精度算术运算 | 基于有理数、整数 |
| 代数变换、多项式操作 | 简化、展开、分解、公因子等 |
| 方程式表达和求解 | 多项式、线性非线性、<br>三角函数、微分方程等 |
| 微积分 | 求极限、求微分，求积分等 |
| 线性代数等 | 矩阵、矢量张量运算、群论等 |
| 辅助功能 | 公式转换成C/C++/FORTRAN<br>代码、交互性、可视化等 |

# 基本功能

## 运算对象为变量、操作、特殊符号、内置函数等

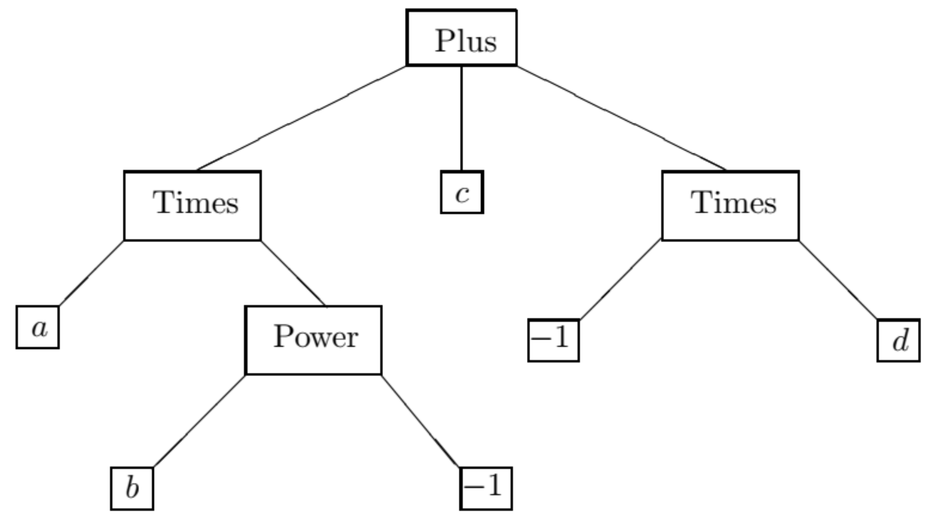
- 变量赋值

  **VAR := Expression**

- 操作：代数、集合、逻辑等
- 特殊符号：$\pi, e, i, \infty$, True, False
- 内置函数：实现前页基本功能，例如取整、微分、积分、解方程等

## 表达式数据结构

例：$a/b + c - d$




对表达式进行简化（Simplification）是代数系统中的重要功能，最优解决问题的效能

# 举例 – 积分运算的实现

## 积分推导往往非常复杂

一个常见极简代数算法如下

检查被积函数：简化，展开，多次尝试变换积分变量

⇨

已知积分结果的被积函数

$$\int f\, dx =$$

$$\int u(v(x))\, v'(x)\, dx = \int u(v)\, dv = U(v(x))$$

## 流程举例

$$\int \frac{(x+1)\,\ln(\cos((x+1)^2))\,\sin((x+1)^2)}{\cos((x+1)^2)}\, dx$$

初步尝试 $v(x)$ 列表

$\ln(\cos((x+1)^2)),\quad \cos((x+1)^2),\quad (x+1)^2,$
$x+1,\quad \sin((x+1)^2),\quad -1,\quad 2.$

找到合适 $v = \ln(\cos((x+1)^2))$

$$\int \frac{(x+1)\;\ln(\cos\,(x+1)^2)\;\sin((x+1)^2)}{\cos((x+1)^2)}\, dx$$

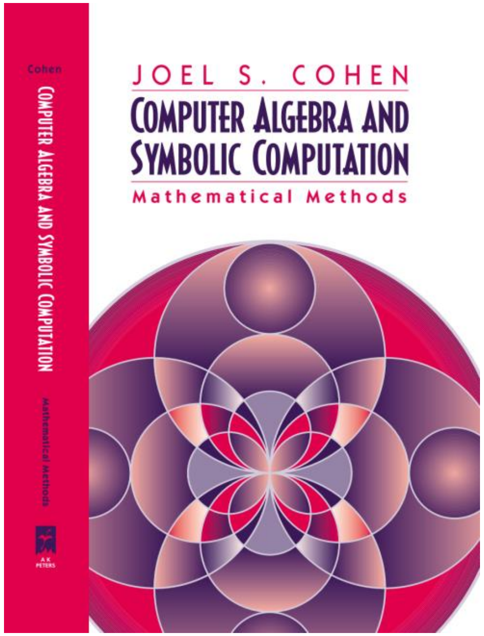
$$= \quad -(1/2)\int v\, dv = (-1/4)\, v^2 = (-1/4)\,\left(\ln(\cos((x+1)^2))\right)^2$$

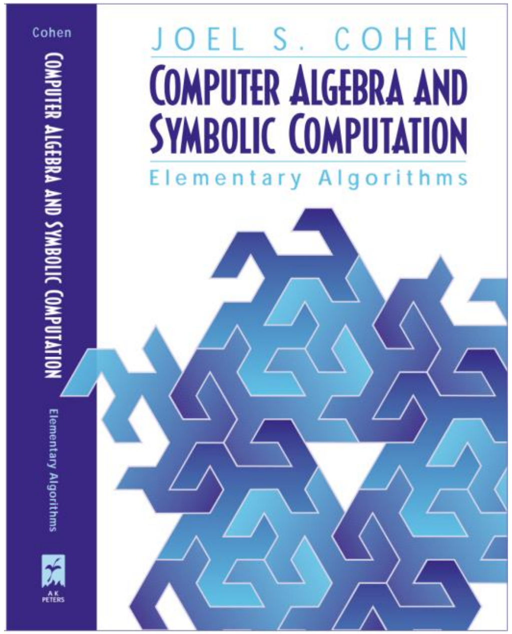
**实际情形往往复杂得多，如能求解，也需多次尝试**

# 参考资料

- 讲义PPT中的引用文献
- 网络上可以找到的课件等资源，搜索Computer Algebra或Symbolic computation

- 书籍推荐



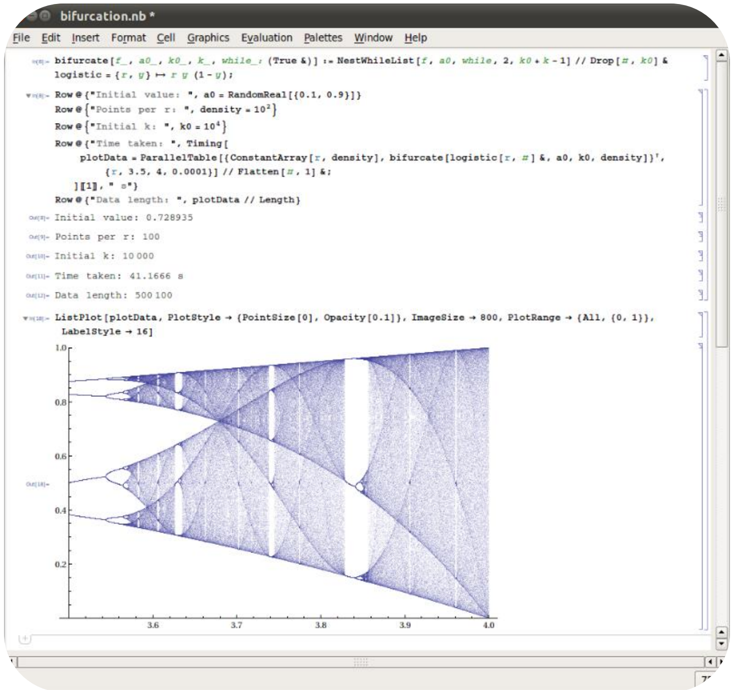
# Mathematica简介

# 发展历程

- 历经约30年（1988）
  - 计算物理学常用软件
  - 前身是SMP，雏形以符号计算为主，基于C语言，并可输出C/Fortran数值计算文件
  - 已发展成了一个大型综合计算平台：包含计算机代数、数值计算、可视化、统计计算、机器学习等
  - 创建者 Stephen Wolfram，后面由Wolfram Research 公司商业化

**Mathematica Notebook**

交互式写表达式并运算



# 实用信息

- 目前最新版 12.0，可通过学校网页安装激活：
  http://zbh.ustc.edu.cn/zbh.php

- 大量教程以及例子可在官网下载，如
  https://reference.wolfram.com/language/#SymbolicAndNumericComputation

- 快速入门：
  https://www.wolfram.com/language/fast-introduction-for-programmers

- 许多相关书籍，如 The Mathematica Book, by Stephen Wolfram; A Physicist’s Guide to Mathematica, by Patrick T. Tam

# 和专用系统的区别

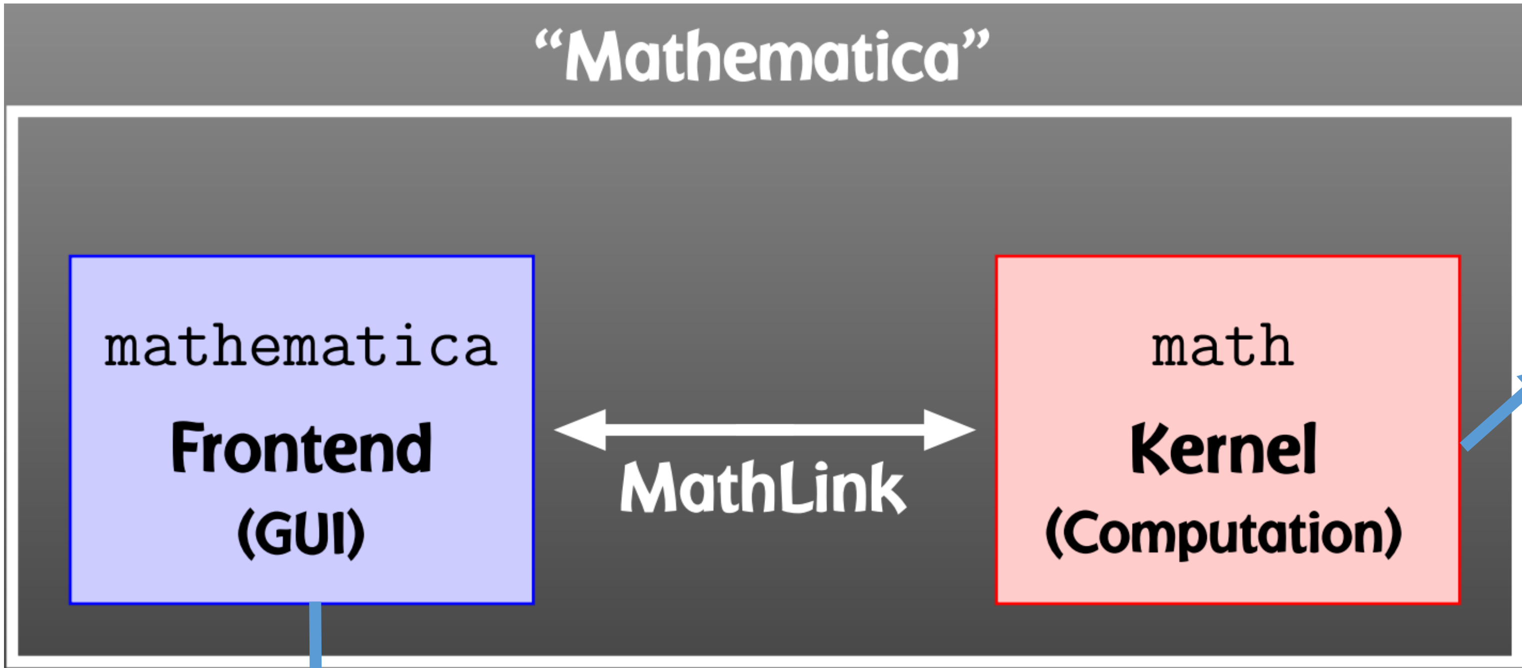
**Mathematica**

更多的内置数学知识；庞大，普适，但效率相对低下；图形界面，可扩展

**专用软件，如FORM等**

支持的符号操作有限；小型，专为某类应用优化，运行快速；命令行脚本运行 (Linux)

# 结构简介




和其它程序交互，输出数值计算结果等

用Notebook 编辑命令，运行，并可视结果；详细语法参见相关教程

# 语法举例

展开多项式

In[1]:= Expand[(1 + x)^10]

Out[1]= $1+10x+45x^2+120x^3+210x^4+252x^5+210x^6+120x^7+45x^8+10x^9+x^{10}$

In[2]:= Expand[(1 + x + y) (2 − x)^3]

Out[2]= $8-4x-6x^2+5x^3-x^4+8y-12xy+6x^2y-x^3y$

微积分，化简

In[1]:= D[Integrate[1/(x^3 + 1), x], x]

Out[1]= $$\frac{1}{3(1+x)}-\frac{-1+2x}{6\left(1-x+x^2\right)}+\frac{2}{3\left(1+\frac{1}{3}(-1+2x)^2\right)}$$

In[2]:= Simplify[%]

Out[2]= $$\frac{1}{1+x^3}$$

# 语法举例

多项式因式分解

In[2]:= `Factor[x^10 - 1]`

Out[2]= $(-1+x)(1+x)(1-x+x^2-x^3+x^4)(1+x+x^2+x^3+x^4)$

In[3]:= `Factor[x^10 - y^10]`

Out[3]= $(x-y)(x+y)(x^4-x^3y+x^2y^2-xy^3+y^4)(x^4+x^3y+x^2y^2+xy^3+y^4)$

方程求解

In[1]:= `Solve[x^2 + a x + 1 == 0, x]`

Out[1]= $\left\{\left\{x\to\frac{1}{2}\left(-a-\sqrt{-4+a^2}\right)\right\},\left\{x\to\frac{1}{2}\left(-a+\sqrt{-4+a^2}\right)\right\}\right\}$

在正整数上求解方程:

In[1]:= `Solve[x^2 + 2 y^3 == 3681 && x > 0  && y > 0, {x, y}, Integers]`

Out[1]= $\{\{x\to 15, y\to 12\}, \{x\to 41, y\to 10\}, \{x\to 57, y\to 6\}\}$

# 语法举例

微分，积分

In[1]:= `D[x^n, x]`

Out[1]= $n\, x^{-1+n}$

In[1]:= `D[Cos[x], {x, n}]`

Out[1]= $\text{Cos}\left[\frac{n\,\pi}{2} + x\right]$

In[1]:= `Integrate[x^2 + Sin[x], x]`

Out[1]= $\frac{x^3}{3} - \text{Cos}[x]$

In[1]:= `Integrate[1/(x^3 + 1), {x, 0, 1}]`

Out[1]= $\frac{1}{18}\left(2\sqrt{3}\,\pi + \text{Log}[64]\right)$

微分方程求解

求解微分方程:

In[1]:= `DSolve[y'[x] + y[x] == a Sin[x], y[x], x]`

Out[1]= $\left\{\left\{y[x] \to e^{-x} c_1 + \frac{1}{2} a\,(-\text{Cos}[x] + \text{Sin}[x])\right\}\right\}$

引入一个边界条件:

In[2]:= `DSolve[{y'[x] + y[x] == a Sin[x], y[0] == 0}, y[x], x]`

Out[2]= $\left\{\left\{y[x] \to -\frac{1}{2} a\, e^{-x}\left(-1 + e^{x}\,\text{Cos}[x] - e^{x}\,\text{Sin}[x]\right)\right\}\right\}$

# 语法举例

## 定义函数

```
In[1]:= f[x_] := x^2
In[7]:= hump[x_, xmax_] := (x - xmax)^2 / xmax
```

## 最小化

```
In[1]:= Minimize[2 x^2 - 3 x + 5, x]
```

Out[1]= $\left\{\frac{31}{8}, \left\{x \to \frac{3}{4}\right\}\right\}$

## 矩阵

由前 10 个平方组成的表：

```
In[1]:= Table[i^2, {i, 10}]
Out[1]= {1, 4, 9, 16, 25, 36, 49, 64, 81, 100}
```

```
In[1]:= Table[10 i + j, {i, 4}, {j, 3}]
Out[1]= {{11, 12, 13}, {21, 22, 23}, {31, 32, 33}, {41, 42, 43}}
In[2]:= MatrixForm[%]
```

$$\begin{pmatrix} 11 & 12 & 13 \\ 21 & 22 & 23 \\ 31 & 32 & 33 \\ 41 & 42 & 43 \end{pmatrix}$$

# 语法举例

## 需要依赖符号计算的例子

In[19]:= `Expand[(x + 1)^100]`

展开

Out[19]= $1 + 100 x + 4950 x^{2} + 161 700 x^{3} + 3 921 225 x^{4} + 75 287 520 x^{5} + 1 192 052 400 x^{6} + 16 007 560 800 x^{7} + 186 087 894 300 x^{8} + 1 902 231 808 400 x^{9} +$
$17 310 309 456 440 x^{10} + 141 629 804 643 600 x^{11} + 1 050 421 051 106 700 x^{12} + 7 110 542 499 799 200 x^{13} + 44 186 942 677 323 600 x^{14} + 253 338 471 349 988 640 x^{15} +$
$1 345 860 629 046 814 650 x^{16} + 6 650 134 872 937 201 800 x^{17} + 30 664 510 802 988 208 300 x^{18} + 132 341 572 939 212 267 400 x^{19} + 535 983 370 403 809 682 970 x^{20} +$
$2 041 841 411 062 132 125 600 x^{21} + 7 332 066 885 177 656 269 200 x^{22} + 24 865 270 306 254 660 391 200 x^{23} + 79 776 075 565 900 368 755 100 x^{24} +$
$242 519 269 720 337 121 015 504 x^{25} + 699 574 816 500 972 464 467 800 x^{26} + 1 917 353 200 780 443 050 763 600 x^{27} + 4 998 813 702 034 726 525 205 100 x^{28} +$
$12 410 847 811 948 286 545 336 800 x^{29} + 29 372 339 821 610 944 823 963 760 x^{30} + 66 324 638 306 863 423 796 047 200 x^{31} + 143 012 501 349 174 257 560 226 775 x^{32} +$
$294 692 427 022 540 894 366 527 900 x^{33} + 580 717 429 720 889 409 486 981 450 x^{34} + 1 095 067 153 187 962 886 461 165 020 x^{35} + 1 977 204 582 144 932 989 443 770 175 x^{36} +$
$3 420 029 547 493 938 143 902 737 600 x^{37} + 5 670 048 986 634 686 922 786 117 600 x^{38} + 9 013 924 030 034 630 492 634 340 800 x^{39} +$
$13 746 234 145 802 811 501 267 369 720 x^{40} + 20 116 440 213 369 968 050 635 175 200 x^{41} + 28 258 808 871 162 574 166 368 460 400 x^{42} +$
$38 116 532 895 986 727 945 334 202 400 x^{43} + 49 378 235 797 073 715 747 364 762 200 x^{44} + 61 448 471 214 136 179 596 720 592 960 x^{45} +$
$73 470 998 190 814 997 343 905 056 800 x^{46} + 84 413 487 283 064 039 501 507 937 600 x^{47} + 93 206 558 875 049 876 949 581 681 100 x^{48} +$
$98 913 082 887 808 032 681 188 722 800 x^{49} + 100 891 344 545 564 193 334 812 497 256 x^{50} + 98 913 082 887 808 032 681 188 722 800 x^{51} +$
$93 206 558 875 049 876 949 581 681 100 x^{52} + 84 413 487 283 064 039 501 507 937 600 x^{53} + 73 470 998 190 814 997 343 905 056 800 x^{54} +$
$61 448 471 214 136 179 596 720 592 960 x^{55} + 49 378 235 797 073 715 747 364 762 200 x^{56} + 38 116 532 895 986 727 945 334 202 400 x^{57} +$
$28 258 808 871 162 574 166 368 460 400 x^{58} + 20 116 440 213 369 968 050 635 175 200 x^{59} + 13 746 234 145 802 811 501 267 369 720 x^{60} +$
$9 013 924 030 034 630 492 634 340 800 x^{61} + 5 670 048 986 634 686 922 786 117 600 x^{62} + 3 420 029 547 493 938 143 902 737 600 x^{63} +$
$1 977 204 582 144 932 989 443 770 175 x^{64} + 1 095 067 153 187 962 886 461 165 020 x^{65} + 580 717 429 720 889 409 486 981 450 x^{66} + 294 692 427 022 540 894 366 527 900 x^{67} +$
$143 012 501 349 174 257 560 226 775 x^{68} + 66 324 638 306 863 423 796 047 200 x^{69} + 29 372 339 821 610 944 823 963 760 x^{70} + 12 410 847 811 948 286 545 336 800 x^{71} +$
$4 998 813 702 034 726 525 205 100 x^{72} + 1 917 353 200 780 443 050 763 600 x^{73} + 699 574 816 500 972 464 467 800 x^{74} + 242 519 269 720 337 121 015 504 x^{75} +$
$79 776 075 565 900 368 755 100 x^{76} + 24 865 270 306 254 660 391 200 x^{77} + 7 332 066 885 177 656 269 200 x^{78} + 2 041 841 411 062 132 125 600 x^{79} +$
$535 983 370 403 809 682 970 x^{80} + 132 341 572 939 212 267 400 x^{81} + 30 664 510 802 988 208 300 x^{82} + 6 650 134 872 937 201 800 x^{83} + 1 345 860 629 046 814 650 x^{84} +$
$253 338 471 349 988 640 x^{85} + 44 186 942 677 323 600 x^{86} + 7 110 542 499 799 200 x^{87} + 1 050 421 051 106 700 x^{88} + 141 629 804 643 600 x^{89} + 17 310 309 456 440 x^{90} +$
$1 902 231 808 400 x^{91} + 186 087 894 300 x^{92} + 16 007 560 800 x^{93} + 1 192 052 400 x^{94} + 75 287 520 x^{95} + 3 921 225 x^{96} + 161 700 x^{97} + 4950 x^{98} + 100 x^{99} + x^{100}$

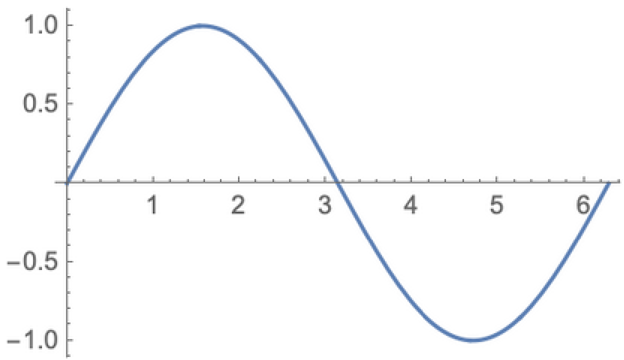
# 语法举例

## 简单图形

以下将画出方程 $\sin(x)$ 在 $x$ 从0 到 $2\pi$ 的范围内的图形：

In[1]:=
```
Plot[Sin[x], {x, 0, 2 Pi}]
```

Out[1]=

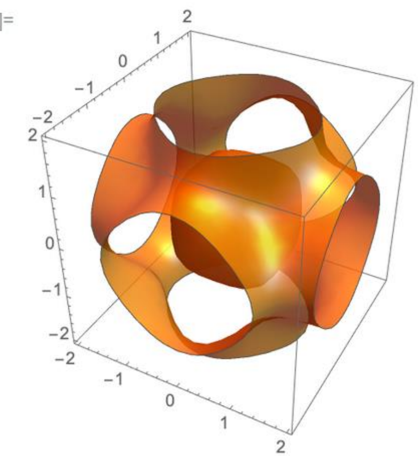



## 较复杂图形

用样式来突出特征：

In[1]:=
```
ContourPlot3D[x^4 + y^4 + z^4 − (x^2 + y^2 + z^2)^2 + 3 (x^2 + y^2 + z^2) == 3,
  {x, −2, 2}, {y, −2, 2}, {z, −2, 2}, Mesh → None,
  ContourStyle → Directive[Orange, Opacity[0.8], Specularity[White, 30]]]
```

Out[1]=



# 练习建议

- 按照入门教程，<u>**直接动手敲命令，熟悉基本语法**</u>
- 最基本语法之外的函数、命令形式众多，建议养成以<u>**问题为导向的程序学习模式**</u>：<u>**解决问题时能快速索引到需要的命令并学会用**</u>
- 有时简单的物理问题，编程起来，可能繁琐，容易出错；需要<u>**耐心并严谨**</u>，编码以及可视化相结合