计算物理学—介绍

田付阳

应用物理研究所

数理学院

北京科技大学

March 5, 2018

概括

1. 计算物理学
   - 定义
   - 计算物理学的诞生
   - 研究对象及范围
   - 研究方法
   - 发展前景
2. 计算机计算的特点
   - 计算设备
   - 基本结构
3. 算法及程序
   - 契比雪夫多项式逼近
   - 计算机编程语言
4. 误差分析
   - 实验误差分析
   - 数据计算注意事项
5. 内容概要及课程要求

1 计算物理学
- 定义
- 计算物理学的诞生
- 研究对象及范围
- 研究方法
- 发展前景

2 计算机计算的特点

3 算法及程序

4 误差分析

5 内容概要及课程要求

计算机在学习中的作用

- 查资料，网上学习交流;
- 看网上教程及教学视频;
- 求解经典的物理问题?

你对计算机的认识在什么样的水平?

计算物理学(Computational Physics)

也称为数值物理；一些数值计算必须借助计算机才能实现，也称为应用计算机的物理。

- 渗透到物理科学与工程学的各个方面，成为一个新兴的交叉科学;
- 物理学、计算数学、计算机科学三者有机结合的学科;
- 作为物理学的一个分支，与理论物理、实验物理关系极为密切，但又保持其相对独立性;

定义： 计算物理学是以计算机及计算机技术为工具和手段，运用计算数学的方法，解决复杂物理问题的一门应用科学。

计算物理学已经对复杂体系的物理规律、物理性质的研究提供了重要手段，对物理学及工程学的发展起着极大的推动作用。

理论物理需要用数值解，实验物理需要模拟实验过程，处理大量的实验数据，确定相应的函数关系。

广义上，符号计算、物理现象的可视化、物理规律的模拟等也被归于计算物理当中。

计算物理学的出现

1. 19世纪中叶以前，物理学是一门基于实验的科学；
2. 1862年，由Maxwell方程预言电磁波的存在，标志理论物理开始成为一门相对独立的物理学分支；
3. 20世纪初，量子力学和相对论的诞生，促使理论物理学成为一门成熟的学科。

物理学成为实验物理与理论物理密切结合的学科，这种“理论与实践结合”的探索方式，促进了物理学的大发展，并引发了20世纪科学技术的重大革命。一个重要产物：电子计算机的发明和应用。

二战期间：核武器的研制需要准确地计算出与热核爆炸有关的一切数据，迫切需要了解在短时间内发生的复杂物理过程问题，因此计算物理学得以产生。

计算物理学发展成为物理学的第三大分支

研究体系的复杂性，就理论物理而言，可分为：

- 单体问题到多体问题；低维到高维系统；
- 标量系统到矢量系统；线性到非线性系统；
- 常微分方程到偏微分方程，低级微扰到高级微扰。

即模型由简单理想化到实际复杂化，而就实验物理而言，

- 研究对象和范围的拓广：从宏观到微观、从低速到高速、从稳态到暂态、从常温到极温、从常压到极压等。
- 研究手段的极限精度更高，设备更庞大。

研究体系的复杂性使得传统的解析方法无能为力，实验手段与设备也有局限性，借助计算机进行研究成为唯一可能的方法。

二战之后，计算机技术的迅速发展又为计算物理学的发展打下了坚实的基础，成为科学研究的重要手段，促进了各学科之间的交叉渗透，如计算化学、计算材料学、计算生物学等。

计算物理学的研究对象、研究范围

计算物理学是复杂物理体系的数值研究。

也被称之为利用现代大型快速计算机对物理过程进行数值模拟的一门学科。

计算物理学包含了物理学应用计算机的一切方面。

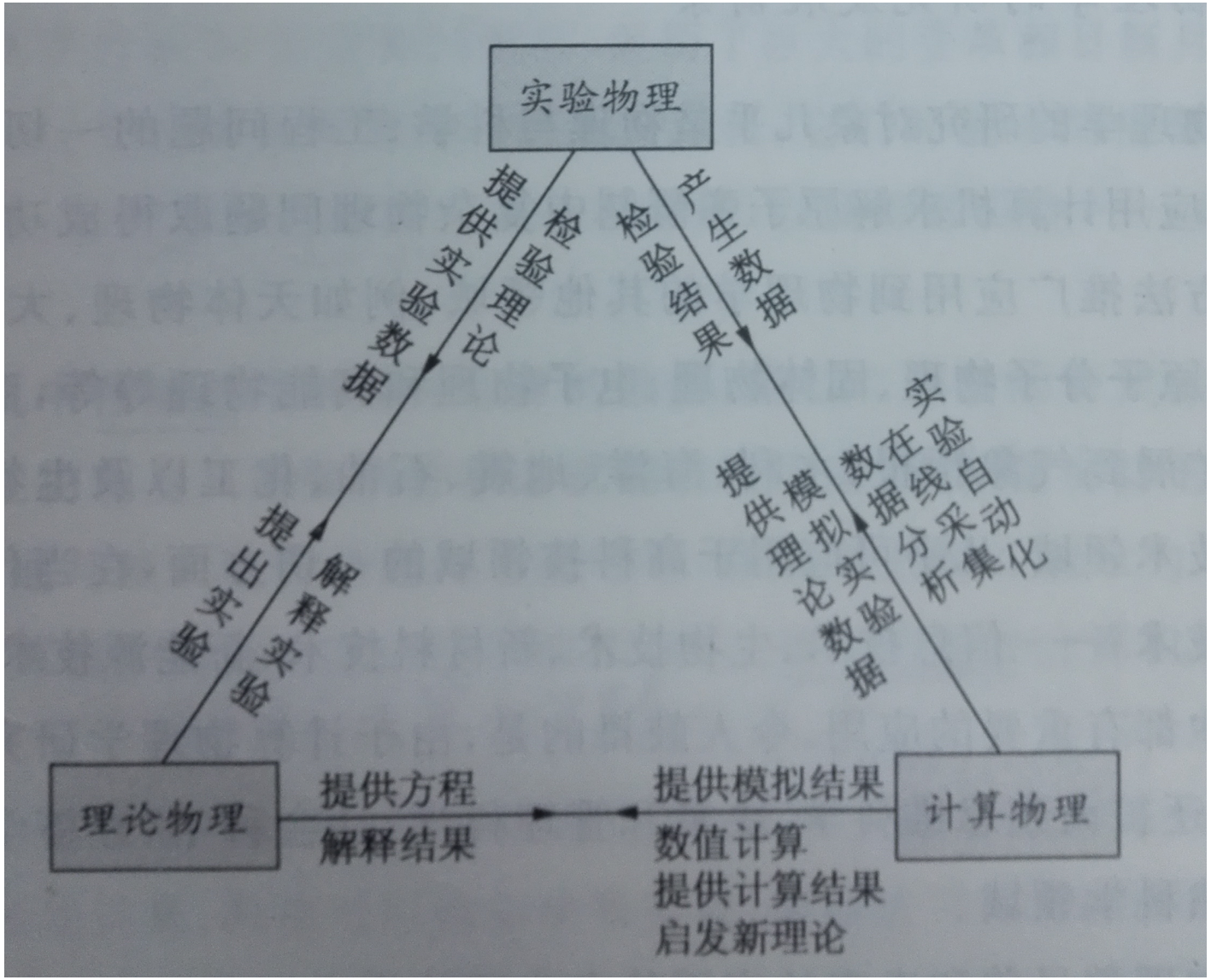
1. 复杂物理体系的数值计算与模拟;
2. 复杂物理体系的解析计算与分析;
3. 物理实验数据的采集与分析、处理;
4. 物理实验过程与实验系统的模拟与控制;
5. 物理图像的获得、识别与处理。

计算物理学的研究方法

建模(modeling)、模拟(simulation)和计算(computation)三大部分。

- 确定物理模型：确定研究对象，对物理问题进行分析，抓住主要因素，忽略次要因素，建立起相应的物理模型；
- 选取数学方法：合适的算法并使之在计算机上实现，算法选取的好坏是影响到能否计算出结果、或精度的高低或计算量的大小的关键；
- 分析计算结果：对计算的数据结果进行结合分析与研究，以得到有价值的物理信息，同时考虑数值计算所产生的误差及计算机收敛性和稳定性的问题;
- 得出物理结论：通过把得到的相关物理结论以某种解析形式的近似来表达，有利于直接反映物理规律和揭示物理机制，进而可能给出理论预言。

计算物理学与理论物理、实验物理之间的关系



计算物理与计算数学和计算机科学

计算物理：是以物理问题为出发点，借助计算机，应用计算数学提供的方法，解决物理问题，通过对数值计算与数值模拟得到结果的综合分析，最终得出有关的物理结论，即从物理问题出发，以物理结论归宿，宗于物理。

计算数学：从数学方法出发，创造、开发新的有效算法，同时讨论和验证方法的收敛性、稳定性，以及解的存在、唯一性与计算误差等方面，最终以求出方程的近似解为结束，体现出数学固有的严密与完备。

计算机科学：计算机科学是一门包含各种各样与计算和信息处理相关主题的系统学科，从抽象的算法分析、形式化语法等等，到更具体的主题如编程语言、程序设计、软件和硬件等; 大型计算软件的使用与开发，如计算工具LAMMPS, VASP等。

研究发展前景

研究手段方面进展，从数值计算发展到解析计算–利用计算符号处理系统进行解析运算、公式的解析推导和高精度计算、从串行到并行计算等。研究对象几乎是物理与科学、工程问题的一切方面：如核物理、天体物理、等离子体物理、原子与分子物理、固体物理、电子物理和高能物理等；气象预报、水利、海洋、地震、石油、化工以及生物人体科学等；信息技术、生物技术、新材料技术、新能源技术、空间技术和海洋技术。

- **计算材料科学：**利用计算物理的方法，按照性能要求进行材料设计，性能预测，理论分析，解释实验现象。
- **计算化学：**应用于量子化学对化学过程的研究，改变传统的化学反应过程研究状态。
- **计算生物学：**对生物分子结构的设计与蛋白质的计算，尤其是新型生物功能材料设计，基因设计和药物设计等。

1 计算物理学

2 计算机计算的特点
- 计算设备
- 基本结构

3 算法及程序

4 误差分析

5 内容概要及课程要求

发展历史

- 算盘： 4000年前，巴比伦；3000年前，中国，可加减乘除；
- 对数表：17世纪中叶；
- 机械计算机：工业革命时期；
- 全自动全编程的计算机概念被提出；发明差分引擎：19世纪早期；
- 电力技术，西班牙人提出couting machine;
- IBM，美国制造了counting machine， 差分制表机：1920s；
- 贝尔实验室成立，制造继电计算器；
- 真空管，1939；electronic numerical integrator computer: 1945;
- 晶体管取代真空管，集成电路；微处理器；矢量处理器；80年代以后，各种计算的综合利用。

现代计算机的基本结构

控制器、运算器和存储器三大基本部件，以及外部设备(输入输出部分构成)。

- 存储器：存储运算的数据，是以二进制的形式储存，布尔(逻辑)代数在计算机应该很广泛。
- 运算器：进行加、减、乘、除的四则运算，以加法运算为核心。
- 控制器： 进行是与非的逻辑判断。

核心功能：把数 0和1进行加减乘除和算术运算和进行是与非的逻辑判断。

由于电子计算机只有数字，通常只能求物理问题的数值解，不能求解解析解，导致：无限问题必须**有限化**、连续问题必须**离散化**。

1 计算物理学

2 计算机计算的特点

3 算法及程序
- 契比雪夫多项式逼近
- 计算机编程语言

4 误差分析

5 内容概要及课程要求

算法

针对问题，让计算机以一定的程序完成预期的计算工作.

- 问题，进行公式、逻辑计算；
- 采用计算语言，编程、运行程序。

多项式展开、泰勒展开、傅立叶变换等等。

$$P(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + \cdots + a_{n-1}x + a_n \tag{1}$$

$$f(x \pm h) = f(x) \pm hf'(x) \pm \frac{h^2}{2!}f''(x) \pm \cdots \pm \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(x) \pm \cdots \tag{2}$$

$$\widetilde{f}(w) = F[f](\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t}dt$$

The inverse Fourier transformation

$$f(t) = F^{-1}[\widetilde{f}](t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{f}(\omega)e^{i\omega t}dt \tag{3}$$

sinx的函数逼近求解

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

给定自变量x,只要n取足够大，上述表达式就可达到给定的精度，在$x=0$附近，上式得近似度较好，所需要项数较少。随着x的增加，收敛速度较慢。

采用

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!}$$

计算$\sin\frac{\pi}{2}x$的误差分布，当x很小时，误差很小；而x增加接近1时，误差就特别大，且误差分布很不均匀。要提高精度就要提高多项式的次数，就需要增加计算量。

契比雪夫多项式逼近

寻找更好的近似公式，$\sin x$按多项式$T_k(x) = \cos k\theta$, $x = \cos\theta$展开：

$$f(x) = \sin\frac{\pi}{2}x = \frac{1}{2}C_0 + \sum_{k=1}^{\infty} C_k T_k(x),$$

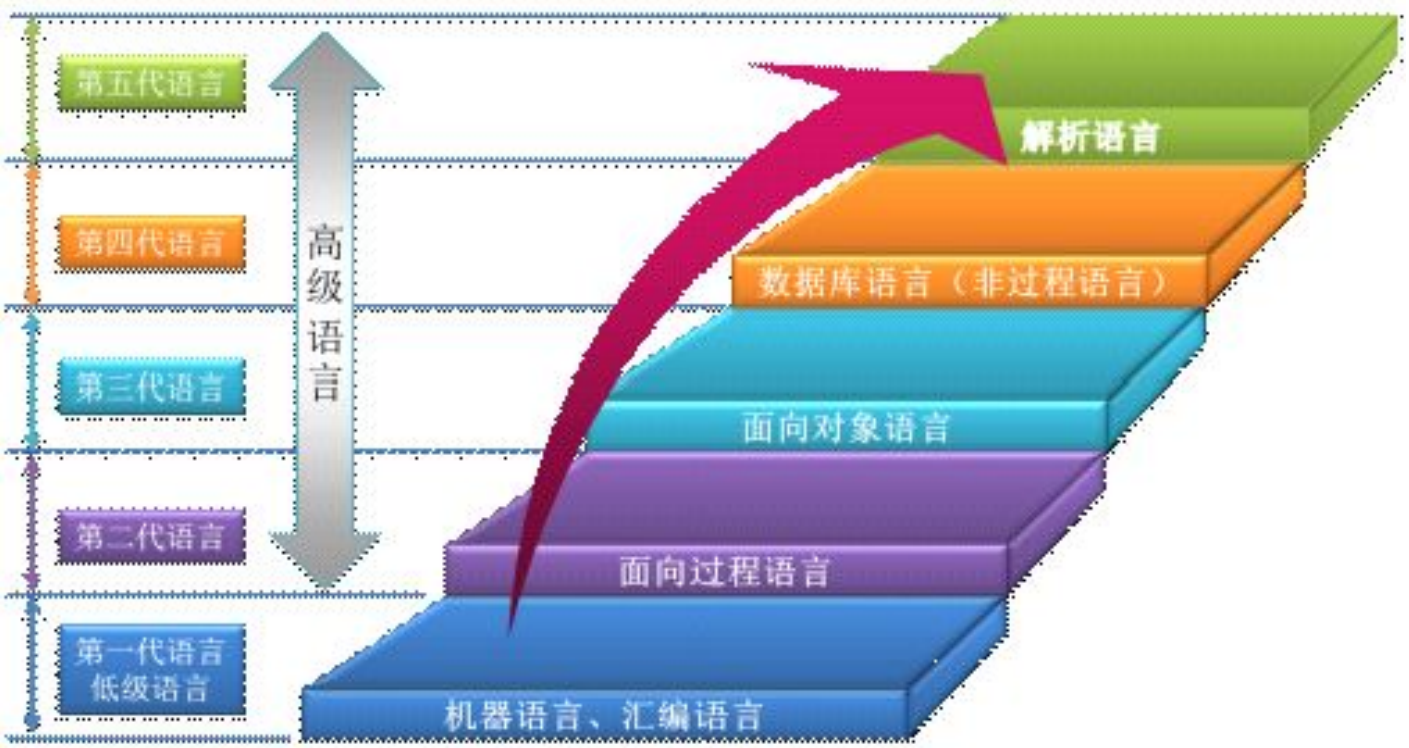
并取其前n项部分和作为近似式逼近，收敛要快很多。 在区间[-1,1],如果$T_k(x)$以权函数为$(1-x^2)^{1/2}$的n次正交多项式

$$\frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1} T_k(x)T_j(x)(1-x^2)^{-1/2}dx = \begin{cases} 0 & k \neq j, \\ 1 & k = j, \end{cases}$$

展开式系数由下式决定：

$$C_k = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1} T_k(x)T_j(x)(1-x^2)^{-1/2}d, k = 0, 1, 2, \cdots .$$

低级到高级语言



1. FORTRAN语言/C语言
2. matlab/mathemetica/octave/python/,至少会用一个.

1 计算物理学

2 计算机计算的特点

3 算法及程序

4 误差分析
- 实验误差分析
- 数据计算注意事项

5 内容概要及课程要求

大学物理实验

- 测量与测量误差：直接误差与间接误差；绝对误差=测量结果-被测量的真值；相对误差=测量的绝对误差/被测量的真值×100%
- 系统误差与随机误差：1. 对测量结果引入修正值；2. 选择适当的测量方法(交换法，补偿法、替代法、半周期偶数测量法)；随机误差分布特点：多次测量，正负随机误差大致可以抵消，可采用多次测量的算术平均值表示；测量值的分散程度直接体现随机误差的大小，测量值走越分散，测量的随机误差越大。
- 实验数据处理：作图法与EXCEL软件直线拟合。

误差定义

- 误　　差: 近似值与准确值之差，$E = Z^* - Z$;
- 误 差 限: 由于准确值是未知的，采用一个小正数ε, 存在不等式，$|E| = |Z^* - Z| \leq \varepsilon$,$Z - \varepsilon \leq Z^* \leq Z + \varepsilon$, $|E| \leq \varepsilon$, $Z* = Z \pm \varepsilon$.
- 相对误差: $E_r = \frac{|E|}{|Z^*|} = \frac{|Z^* - Z|}{Z^*} \longrightarrow E_r = |E|/|Z|$, $E_r = |\frac{E}{Z^*}| \leq \frac{\varepsilon}{Z^*} = \varepsilon_r \approx \frac{\varepsilon}{|Z|}$.
- 有效数字:
  - 近似值Z的误差限不超过某一位上的半个单位，该位到Z的第一个非零数字共有n位，则Z有n位有效数字，或者Z准确到该位。
  - 设近似数Z表示为$Z = 0, x_1 x_2 ... x_n \times 10^m$,$x_i (i = 1, 2, ..., n)$取0-9的任意数字，且$x_1 \neq 0$,$n$为正整数，$m$为整数。
    若$|Z^* - Z| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n} \times 10^m = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$, 则称$Z$为$Z*$的具有$n$位有效数字的近似值。

基本定义

1. 误差: 是近似值与准确值之差，即

$$E = Z^* - Z$$

式中，E表示误差；$Z*$表示准确值，又称为精确值、真值；Z表示近似值.

2. 误差限: 若存在一个小正数ε,使不等式

$$|E| = |Z^* - Z| \leq \varepsilon$$

成立，则称ε为近似值Z的绝对误差限，简称误差限。并得到

$$Z - \varepsilon \leq Z^* \leq Z + \varepsilon, \quad |E| \leq \varepsilon, \quad Z^* = Z + \varepsilon$$

称ε为近似值Z的绝对差限，简称误差限. 通常按四舍五入方法得支近似数的绝对识误差限是其末位的半个单位。

3.相对误差

$$E_r = \frac{|E|}{|Z^*|} = \frac{|Z^* - Z|}{|Z^*|}$$

由于准确值Z^*无法求得，用其近似值代替，$E_r = |E|/|Z|$,相对误差的绝对值上界称为相对误差限ε_r,

$$E_r = |\frac{E}{Z^*}| \leq \frac{\varepsilon}{|Z*|} = \varepsilon_r \approx \frac{\varepsilon}{|Z|}$$

4.有效数字: 定义1：如果近似值Z的误差不超过某一位上的半个单位，该位到Z的第一个非零数字共有n位，则Z有n位有效数字或者Z准确到该位。

定义2：设近似数Z表示为$Z = 0.x_1x_2\cdots x_n \times 10^m$, x_i $(i = 1, 2, \cdots, n)$取$0 \sim 9$的任意数字，但$x_1 \neq 0$, n为正整数，m为整数。若$|Z^* - Z| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n} \times 10^m = \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$,则称$Z$为$Z*$的具有$n$ 位有效数字的近似值。

有效数字

- 由测量工具测得的数据都是有效数字；
- 用四舍五入取准确值的前n位都是有效数字；
- 有效数字表示的近似数300×10^3与300000是不同的；
- 准确值被认为有无穷位有效数字。

例子：

1.指出$2.0004, 0.00200, 9000, 9 \times 10^3, 2 \times 10^{-3}$各数有几有效数字，误差限是多少？

2.若近似数$Z = \pm 0, x_1 x_2 \cdots x_n \times 10^m$有$n$有效数字，证明其相对误差为

$$|E_r| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)}.$$

误差来源

- 模型误差：对实际物理问题做某些近似假设后抽象出数学模型带来的误差；
- 观测误差：实验测量得到的测量值带来的误差；
- 截断误差：近似求解的方法误差；
- 舍入误差：计算时由于机器字长有限，对其小数指定位进行四舍五入而引起的误差，称为舍入误差。

数值运算误差：由于数据的误差必然引起函数值的误差。如计算$z = f(x, y)$,设x^*, y^*为准确值，则函数运算的误差：

$$E(z) = f(x^*, y^*) - f(x, y) \approx \frac{\partial f(x, y)}{\partial x}(x^* - x) + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y}(y^* - y)$$

$$= \frac{\partial f(x, y)}{\partial x}E(x) + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y}E(y)$$

例子

1. 已知函数$y = e^x$,且$|x| \leq 1$,若要求截断误差的误差限为0.005,那么需要计算到多少项才能满足要求?
2. 误差积累或误差传递造成的数值计算的不稳定性
   如计算积分

$$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx, \ n = 1, 2, \cdots,$$

利用分部积分法得到

$$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx = 1 - n \int_0^1 x^{n-1} e^{x-1} dx = 1 - nI_{n-1}$$

由I_1递推计算出I_2，依次递推$I_3, \cdots$. 设初值I_1的误差为ε,这样

$$I_2 = 1 - 2(I_1 + \varepsilon) = 1 - 2I_1 - 2\varepsilon$$

continued

$$I_3 = 1 - 3I_2 = 1 - 3(1 - 2I_1) - 3!\varepsilon$$
$$I_4 = 1 - 4I_3 = 1 + 8(1 + 3I_1) - 4!\varepsilon$$
$$\cdots\cdots,$$

当递推计算到I_{20}时，误差累积到$20!\varepsilon$,已相当可观，数值计算出现不稳定性，说明上面采用了不稳定的迭代方式。如果考虑下面迭代计算方式：

$$I_{n-1} = \frac{1 - I_n}{n} m, n = \cdots, 4, 3, 2, 1$$

由关系

$$I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx \leq \int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1},$$

则取$I_{30} = 0$,递推计算到I_{20},误差会减小到$\frac{20!}{30!}\frac{1}{31} \approx 3 \times 10^{-16}$。

数据计算注意的问题

- 避免相近二数相减
- 防止大数吃掉小数
- 避免小分母 溢 出
- 减少运算次数
- 正负交替级数累和计算中的问题

1 计算物理学

2 计算机计算的特点

3 算法及程序

4 误差分析

5 内容概要及课程要求

outline

- 线性、非线性方程组的数值解法;
- 函数的近似方法：插值法与拟合法;
- 数值差分与积分;
- 常微分、偏微分方程的数值方法,重点分析物理中的问题;
- 快速傅立叶变换, FFT;
- 分子动力学;
- 蒙特卡罗MC方法;
- 有限元分析，在物理中的应用。

课程要求

- 上课：签到的要求；
- 作业：至少交六次

  公邮

  或微信

  课件及作业通过此联系方式来进行交流.
- 考试：开卷/闭卷

总结

- 计算机在课程学习中的作用;

总结

- 计算机在课程学习中的作用;
- 计算物理的起源、作用及发展;

总结

- 计算机在课程学习中的作用;
- 计算物理的起源、作用及发展;
- 误差分析;

总结

- 计算机在课程学习中的作用;
- 计算物理的起源、作用及发展;
- 误差分析;
- 线性拟合的应用实例.

感 谢 关 注!