计算机代数与物理学

张 春 霆

(天津大学物理系)

一、计算机代数

随着计算机性能价格比的日益提高，它在物理学各部门中的应用也日渐增多．来自不同领域的物理学工作者，从不同的角度使用计算机，逐步积累了大量的知识．这就形成了计算物理学．现在公认，计算物理是独立于理论物理与实验物理之外的第三物理学．它对物理学发展的重要性，逐渐为人们所认识．虽然如此，但目前对计算物理迄今尚无一个公认的定义．在欧洲物理学会计算物理分会的一篇工作总结中，D. Biskamp[1]定义计算物理为："涉及在物理学中应用计算机的一切方面"．

通常，计算机在物理学中主要用于：进行数值计算和数值分析；物理过程的计算机模拟；实验数据的在线与离线处理；实验过程的计算机控制；物理图形的识别与处理等．还有一个重要的方面，这就是计算机代数（Computer Algebra，有时简称为 CA）．计算机代数对计算物理的贡献往往不被人们所了解，因而被称为计算物理的一股"潜流"．

如果想用算法语言如 FORTRAN 或 PASCAL 等解一元二次方程 $ax^2+bx+c=0$，必须给出 a,b,c 的具体数值，否则程序是不能运行的．现在假定我们使用计算机代数语言之一，例如 MACSYMA，情况就不一样了．设想坐在终端前，键入"MACSYMA"这几个字符来呼唤它，那么不久屏幕上就印出：This is Macsyma 296(c1)．以上信息表示 MACSYMA 待命，请输入第一条任务．此时可从容不迫地键入

(c1) solve $(a*x**2+b*x+c,\ x)$，

大约经过半秒钟，MACSYMA 开始通过打印机和屏幕回答：

Time = 643ms¹⁾

$$\text{(d1)}\quad \left[x=-\frac{\mathrm{sqrt}(b^2-4ac)+b}{2a},\right.$$

$$\left.x=\frac{\mathrm{sqrt}(b^2-4ac)-b}{2a}\right].$$

然后又出现(c2)提示符，等待输入第二条任务．以上(d1)提示符表示计算机给出答案，依此类推．

(c2) factor$(x**4-1)$(将 x^4-1 因式分解)，

Time = 336ms

$$\text{(d2)}\qquad (x-1)(x+1)(x^2+1).$$

(c3) integrate$(1/(x**4-1),\ x)$

$\left(\text{求}\ \int\frac{dx}{x^4-1}\right)$，

Time = 348ms

$$\text{(d3)}\qquad -\frac{\log(x+1)}{4}-\frac{\mathrm{atan}(x)}{2}+\frac{\log(x-1)}{4}.$$

美国加州理工学院的 E. W. Ng[2] 给计算机代数下的定义是："计算机代数是一门利用数字电子计算机进行代数和解析处理或操作的学科"．目前，这个定义逐步为大家所接受．计算机代数是数学、物理与计算机科学三者交叉的学科．它是一门正在急速发展和建立的新学科．研究人员来自不同的领域(主要是数学、物理和计算机科学三个方面)，迄今尚未建立起统一的体系，甚至还没有统一的学科的名称．除计算机代数这个逐步公认的叫法以外，在文献中

1) 这是执行该任务占用主机 CPU 的时间．对不同的机器此数一般不同．作者使用的是 HP-68 机．

尚可大量地看到以下名称：符号与代数运算(Symbolic and Algebraic Computation)；机器代数（Machine Algebra)；符号与代数处理（Symbolic and Algebraic Manipulation)；公式处理(Formula Manipulation)；符号应用数学(Symbolic Applied Mathematics)；解析处理(Analytical Manipulation)；代数处理（Algebraic Manipulation)；符号处理（Symbolic Manipulation）等.

计算机代数可做无限精度的算术运算，它的精度不是由计算机字长而是由主存的容量决定的．例如计算$(10!)^{10}$，通常的算法语言将给出浮点数表示的结果，而计算机代数则给出

39594086612242519324387557078266845776303882240000000000000000000000.

这一特点对某些数学、物理问题特别有用．有一定数学基础的人，经过短期培训和上机实习，就可较熟练地掌握一种 CA 系统.

计算机代数只有二十多年的历史．它的产生和发展主要有两个来源：一是物理学；二是计算机科学．就物理学来说，是为了解决量子电动力学（以后简称 QED）中费曼图的计算问题而产生的；对计算机科学而言，它的产生和发展则是为了建立人工智能中的某些专家系统．现在这两个方面迅速汇合，在国际学术界引起越来越大的重视．从 1971 年以来，每隔 2—3 年在美国或西欧轮换召开一次计算机代数的国际会议．其它诸如 MACSYMA 用户会议，REDUCE 用户会议等就更多了．有兴趣的读者可以从文献[3]中获得更详尽的情报．美国、西欧、苏联和日本等国或地区都有计算机代数的专门学术组织，还有定期出版的刊物，如美国的 SIGSAM Bulletin 等.

总之，计算机代数是物理学特别是理论物理学的有用工具，而且将越来越成为重要工具.

二、在物理学中的应用

作为物理学工作者，我们对 CA 感兴趣，主要在于它的应用．从一开始人们就盼望通过 CA 的应用，使理论物理学的研究产生新的变化．有人估计，一个好的理论物理学家大约花费 90% 左右的时间用来作推导和计算，只剩下 10% 左右的时间用来发展新的物理思想和概念．当然，发展新思想、新概念往往与计算、推导分不开，但是其中至少有相当一部分是烦琐的或重复性的劳动．从这个意义上来说，理论物理的研究还处在铅笔加纸的手工劳动阶段．针对这一情况，A. Visconti[4] 提出理论物理研究自动化这个课题．这里的所谓“自动化”是指把手工的推导交给计算机去干，而人本身则集中精力去发展更多更好的新东西．这个美妙的想法目前还不能完全实现，但通过 CA 的应用，使我们看到了希望的曙光．下面结合着 CA 在 QED 中的应用，较详细地探讨一下这种可能性.

早在 1965 年，Tsai 和 Hearn[5] 就计算了下列过程

$$e^+ + e^- \to W^+ + W^- \to e^+ + \mu^+ + \bar{\nu}_e + \nu_\mu.$$

在计算中使用了 CA 系统 REDUCE 的早期版本．继他们的开创性工作之后，使用 CA 系统计算了许多 QED 过程．其中最著名的是推导高级微扰下的电子与 μ 介子的反常磁矩、电子能级的兰姆位移．这些计算结果在 10^{-6}的精度上与实验结果符合[6,7]．这一直被认为是 CA 在物理学中取得的最大成功之一.

通常，一个 QED 过程的计算包括以下几个步骤：

(1) 首先必须选取到指定级数、与所涉及过程有关的全部费曼图.

(2) 对任一图形，识别它是发散的还是收敛的.

(3) 对图形依次进行下列操作：(a) Dirac 矩阵的代数运算；(b)对内动量求积分，通常使用参数化方法进行；(c) 求出费曼积分.

(4) 若某个图形是发散的，先进行重整化操作，然后进行(3)中(b)、(c).

(5)综合(1)—(4)，给出最后结果.

目前，除了步骤(3)中 (c) 以外的所有步骤都可由 CA 技术实现计算机化，即自动化．因此，可以设想，一旦(3)中(c)问题解决后，整个 QED 计算就可全部自动化．人们只要给出物理过程的名称和微扰级数等少量信息后，剩下

的工作可由计算机全部承担，直至给出可与实验比较的结果.

那么(3)中(c)问题能否突破呢？(3)中(c)主要是一个对费曼参数的多重积分，在重整化之后，它总是收敛的. 被积函数是复杂的有理函数,而且在积分区域里存在着极点和支点.除了部分可解析地积出以外，其它的目前只得求助于数值积分. 由于存在这些可积的奇异性，使得通常的多重积分的 Monte Carlo 方法也不灵了. 换言之,此时数值积分也并非容易之事. 但目前已发展出一些新方法[8]，使此问题有相当的进展. 但数值积分的收敛性往往缺乏严格的数学证明. 更进一步，解析地求出给定函数的原函数，也即解析地求出被积函数的不定积分,这一古老的数学难题,迄今仍未解决. 物理学家的主要手段仍然是靠技巧和查表，但往往失败. CA学者投入大量精力,以求最大限度地解决这一难题. 已经发展出了强有力的算法，如 Risch 算法[9]，再利用高深的代数几何学方法，已使该问题的解决向前迈出了重要的一步[10]. 虽然如此,目前的某些 CA 系统的能力已经超过了积分表，并指出了积分表中的一些错误[11].

上述 CA 对 QED 的应用，原则上也适用于量子色动力学（QCD). 事实上,利用现有的 CA 系统来计算 QCD 过程已经开始了（见文献[12]).

CA 在物理学中应用的另一重要领域是广义相对论. 在此领域中有价值的工作之一就是对爱因斯坦场方程已知解的分类问题；研究在任意坐标变换下的不变性问题. 后一问题与黑洞物理相关. 广义相对论中一些繁杂的解析计算很适合于 CA 的应用. 为此发展了一些专用的系统如 ALAM, LAM 等. 但一些通用系统如 MACSYMA, REDUCE 等也可以用,关键是必须有一个张量包. 有关这方面的工作可参阅文献[13].

CA 对天体物理的贡献也是很大的. 主要是利用 CA 来计算星体、人造卫星的轨道和运动. CA 在这一领域成功的原因是，通常这种计算是用微扰级数求解运动的微分方程，而最后出现了泊松级数. 许多 CA 系统，如 MACSYMA，专门发展了处理该级数的包. 除通用系统之外,还发展了一些专用系统如 Rom's 和 TRIGMAN 等. 这方面的经典性工作参见文献[14]. Deprit 等人利用 CA 技术重新解析地计算了月球理论中主要问题的约化哈密顿量，在小型机上花费了 20 小时. 然而,早在 100 年以前由一位理论天文学家，花费了 20 年的时间,才得出同样的结果.

CA 在等离子体物理、流体力学、光学、分子物理学、电学、结构力学等物理学的各个分支都有若干应用(可参阅文献[3]及其所附文献).

综合已发表的 CA 应用于物理学的论文来看,大致有以下特点:

(1)用微扰展开方法解问题；(2)用手工计算太繁或工作量太大或工作量大得不可能用手工计算,以至于非用 CA 不可；(3)出现了高阶的稀疏矩阵问题的处理. 当处理属于上述特点之一的物理问题时,运用 CA 往往很有效.

通常认为，CA 对物理学的应用仅仅是开始. 可以相信,随着 CA 技术的不断完善,它确实可以成为物理学中的重要工具之一.

三、计算机代数系统

所谓计算机代数系统,系指 CA 软、硬件的集合. 限于篇幅,这里仅介绍一下梗概.

初步统计，世界上现有的 CA 系统至少有 60 种以上. 其中有的已停止使用,有的则在不断发展完善中. 大体上可分为专用系统和通用系统两大类. 这里,仅介绍通用系统[15].

1. LISP

LISP 是 List Processing 的缩写,意为表处理. LISP 是表处理语言之一种，是最重要的人工智能语言，也是 CA 最重要的宿主语言. LISP 是由美国 MaCarthy 于 1960 年提出来,并很快在计算机上实现的[16]. 现在已有许多版本和变种[17]. 用 LISP 语言虽然也可以进行数值计算,但它主要是用来作非数值处理的.早期

的物理应用程序往往直接用 LISP 语言写成[18]，但现在很少这样做了，而倾向于用 LISP 作为中间语言来书写更高级的语言。下面要介绍的三种语言基本上都是用 LISP 写的。目前几乎在所有计算机上，都可运行 LISP。特别令人庆幸的是，一些微、小型机也可以运行它。如国内各大学常见的 CROMEMCO S2, S3 机、Ai M-16 机，PDP11/23 机等都可在相应的操作系统支持下运行 LISP。

2. MACSYMA

这是目前世界上最大的，也是最强有力的 CA 语言，占用内存容量 800K 字节。MACSYMA 是由美国 M. I. T. 的数学实验室（MATH LAB)发展起来的，领导人是 Moses[19]。该系统是用 LISP 的一个变种 MACLISP 写成的。目前只能运行在 PDP-10, VAX, HP-68 等较大型机上。它至少有以下几种功能：无限精度的算术运算；多项式处理(展开、排列、因式分解、两个多项式的最大公因式、求代数根等)；有理分式分解；公式化简；矩阵代数(求逆，行列式，线性代数方程解等)；微积分(求导数或偏导数，求不定积分等)；微、积分方程(拉氏变换，某些微、积分方程的解析解以及级数解等)；极限；函数的图形显示；超越函数；张量计算；级数(幂级数求和，泰勒展开等)；可扩充性(允许用户自行定义新过程等)等等。

3. REDUCE

这是一种中型 CA 语言，占用内存 350K 字节。其风格类似于 ALGOL 60 或 68。它是由美国 Utah 大学的 Hearn[20] 提出来的，目前已有不少版本。该语言是用 LISP 的另一变种——STANDARD LISP (SLISP) 写出来的。运行 REDUCE 的机种是：IBM360/370, PDP 10/20, VAX, Univac 1100, Burroughs-6700 等。它既可以交互方式也可以批处理方式使用。REDUCE 的功能包括多项式和有理函数的展开与排列；求导数；替换和模式匹配；两个多项式的最大公因式；自动地或用户介入地表达式的化简；矩阵计算(求逆，行列式等)；包括自旋为 1/2 和自旋为 1 的粒子的高能物理的计算；可扩展性(允许用户定义新过程)等。REDUCE 的 1983 年版本把符号积分包也加进去了。

目前，世界许多大学的计算中心都可以运行 REDUCE。中国科学院理论物理研究所郝柏林最早将 REDUCE 引入我国。从 1982 年以来，中国科学院物理研究所和中国科学院理论物理研究所协作，先后在中国科学院物理研究所的 IBM370/138 机上和中国科学院计算中心的 IBM4341 机上实现了 SLISP 和 REDUCE。至今已分别运行了近两年。其中 SLISP 为大型 LISP 系统，具有动态编译能力，可以使用16兆字节以内虚存。SLISP 及 REDUCE 可以在一切与 IBM360/370 基本指令集兼容的计算机上运行。例如，日本的M系列机，西门子的 7000 系列机等。

4. muMATH

这是一种小型 CA 语言，占用内存容量 32 K 字节，是由美国夏威夷大学的 Rich 和 Stoutemyer[21] 提出来的。muMATH 基本上也是用 LISP 写成的。它是第一个可运行在微型机上的 CA 语言。可运行的机种有(括号内为操作系统)：TRS80 I 和 II 型(TRSDOS); CROMEMCO S1, S2, S3 (CDOS); Imsai VDP (IMDOS); Apple II 带有 Microsoft 的 Z-80 软件功能插板(CP/M); Heath H89(CP/M 或 MP/M)；其它 CPU 为 Intel 8080, 8085 或 Z-80 的微型机(CP/M 或 MP/M)。muMATH 是一种交互式的 CA 语言。它的主要功能为：有理算术运算、初等代数、方程化简、代数方程求解、数组操作、矩阵计算、表达式化简、三角函数的化简、求导、求不定积分、泰勒展开、函数的极限、求Σ和求Π等。目前，我们已拥有了 muMATH 的全套软件，可向国内物理界同行提供。

MACSYMA 的引入只是时间问题。有的系统如 SCHOONSCHIP[22]，是用 CDC6000/7000 机的汇编语言写成的，虽然运行速度较快，但可移植性差。另一大型系统 SCRATCHPAD[23]，即使在国外，使用也并不普遍。根据作者使用以上四种语言的经验来看，MACSYMA 威力巨大，可用于大、中型物理科研项目；RE-

DUCE 虽然较小，但功能并不差，世界上利用REDUCE 研究物理学问题已取得了一批成果[24]；muMATH 由于受容量和速度的限制，功能并不很强，可作小题目的计算，更重要的是可以作为普及 CA 的扫盲语言；LISP 及其各种变种，风格比较奇特，缺乏程序库，一般用户可不必使用，但发展 CA 系统的人员必须研究和使用它。

中国科学院数学研究所陈东岳、陆启铿研制成功了我国自己的 CA 语言——FCY[25,26]. 早在 1976 年就在国产 DJS-21 计算机上实现了 FCY. 目前，FCY 语言已移人 FELIX C-512 计算机操作系统. FCY 在各种领域的研究中已经取得了一批成果[27].

四、结论与建议

计算机代数是利用数字电子计算机进行解析运算的一门数学、物理和计算机科学交叉的边缘学科. 它已经成为物理学的重要工具之一，其价值将日益增大. 除了用于科学研究以外，计算机代数在物理教学上的应用也开始引起注意[28]. 计算机代数及其在物理学科研与教学中的应用，是计算物理的重要组成部分，应引起足够的重视.

因此，作者在这里建议：

1. 创造条件建立中国的 CA 学术组织，可作为计算物理学会的一个下属组织存在. 该组织应与美国的 SIGSAM，西欧的 SAM-AFCET, NIGSAM, SEAS/SMC 等学术组织建立联系，交换情报，进行学术交流. 另一方面，可统一负责全国的 CA 软件的引进与开发，人员培训，召开学术会议，出版刊物等工作.

2. 鉴于我国各大学物理系逐步开设“计算物理”课程这一情况，建议在课程的内容上加上 CA 的章节，并建议以 muMATH 作为学生上机实习的语言.

感谢郝柏林同志对作者从事这一领域工作的鼓励与支持；感谢 Calmet 教授，Visconti 教授对作者的热心指导和为上机提供的资助.

参 考 文 献

[1] D. Biskamp, *Comp. Phys. Comm.*, 10(1975), 259.
[2] E. W. Ng (Ed), Symbolic and Algebraic Computation, Proceedings of EUROSAM'79, Marseille, June, (1979), Lecture Notes n Computer Science, 72, Sprınger-Yes'ay
[3] J. Calmet et al, 计算机科学, No. 5 (1983), 65.
[4] A Visconti, Proc. of 3rd Int. Coll on Advanced Computing Methods in Theor. Phys. Marseill, June, (1973).
[5] Y S. Tsai and A. C. Hearn, *Phys. Rev*., 140 (1965), B721.
[6] J. Calmet et al, *Rev Mod. Phys.*, 49(1977), 21.
[7] A. Visconti, The Present Status of Computing Methods in Quantum Electrodynamics, Renormalization and Invarıance in Quantum Field Theory (Ed. E. R. Caianiello), Plenum Publishing Co (1977).
[8] T. Sasaki, Proc. Fourth Coll. on Advanced Computing Methods in Theor. Phys. St Maximin (Ed. A. Visconti), (1977).
[9] R. H. Risch, *Bulletin Amer. Math. Soc.* 76 (1970), 605.
[10] J H. Davenport et al, Ref. [2].
[11] A. Hearn, Report on Int. Conf. in Comp. High energy Phys. and Nuclear Phys; (1980), Septembe, Pologna, Italy.
[12] Brenner, Wolfram, Ref. [2]; CALT-68-702, (1979).
[13] R Pavelle, Proceedings of 1979 MACSYMA User's Conference (V. E. Lewis Ed.) Cambridge, Mass M. I. T. (1979).
[14] A. Deprit et al., *Science*, 168 (1970), 1569.
[15] D. Y Y. Yun, D. R. Stoutemyer, Symbolic Mathematical Computation, Encyclopedia of Computer Science and Technology (Ed. J. Belzer et al.), Vol. 15(1980), 235—310.
[16] J. MaCarthy et al, LISP Programmer's Manual, The M I T Press, Cambridge, Mass, (1962).
[17] J. E. Sammet *Commu Amer. Comp Machıne*, (1970), 251.
[18] T. A. Brody, Symbolic Manipulation Techniques for Physics, Gordon and Breach Science Publishers, Inc. (1968); J A. Campbell, *Comp. Phys. Comm.*, 1-4(1970), 251.
[19] J. Moses et al, MACSYMA Reference Manual ver. 9 M. I. T., (1977).
[20] A. C. Hearn, REDUCE 2 User's Manual, Univ. of Utah (1973, 1983).
[21] A. Rich and D R Stoutemyer, The muMATH/muSIMP-80 Symbolic Mathematics System Reference Manual (1980) Soft Warehouse, Ha-

（下转第 741 页）