

计算物理前沿及其与计算技术的交叉*

倪军[†] 刘华

(清华大学物理系 北京 100084)

摘要 计算物理学是随着计算技术发展而形成的一门新兴的交叉学科.它是用现代计算技术武装起来的“实验的”理论物理学和“虚拟的”实验物理学.文章回顾了计算物理的发展历史,介绍了计算物理研究状况和前沿问题,并展望了新世纪计算物理面临的挑战.

关键词 计算物理,计算技术,数值模拟

FOREFRONT OF COMPUTATIONAL PHYSICS AND ITS INTERCROSS WITH COMPUTATIONAL TECHNOLOGY

NI Jun[†] LIU Hua

(Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract Computational physics is a cross-discipline that emerged with the development of computer technology. It is a form of “experimental” theoretical physics or “virtual” experimental physics equipped with modern computational technology. The history, current research and challenges of computational physics in the new century are discussed.

Key words computational physics, computational technology, numerical simulation

1 起源和背景

计算物理学是随着计算机技术的不断发展而迅速发展起来的一门新兴学科.计算物理利用当前发达的计算机技术和成熟的数值计算技术,结合理论物理和实验物理的结果,开拓了一个人类认识自然的新方法,它是用现代计算技术武装起来的“实验的”理论物理学和“虚拟的”实验物理学,已经成为一个新的物理学分支——计算物理学^[1,2].

世界上最早的计算技术要数中国古代的算盘.到了17世纪,欧洲数学家帕斯卡(Pascal)、莱布尼兹(Leibnitz)等人设计了可以进行加减乘除的机器.世界上第一台计算机的思想是由冯·诺伊曼提出,尔后在1939年由IBM公司资助,在1944年建成的.早期计算机技术的发展主要是由“曼哈顿”计划推动的.在爱因斯坦和一批物理学家的推动下,美国于1942年8月开始秘密实施“曼哈顿”计划.由于原子弹的研制需要涉及流体动力学、核反应过程、中子输运过程、辐射输运过程和物态变化过程等,涉及的都是十

分复杂的非线性方程组,因此,冯·诺伊曼估计的结果是,“曼哈顿”计划研制过程需要的计算量可能超过人类有史以来进行的全部算术运算.在这个需求的推动下,美国于1944年开始着手建造计算机,从而计算机技术和计算物理获得迅速发展^[3].在费米的推动下,洛斯阿拉莫斯实验室于1952年就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,费米和合作者编写的一个洛斯阿拉莫斯研究报告提出了许多重要问题^[4],很多人把它看成是计算物理的正式起点.1965年,哈洛(Harlow)和弗罗姆(Fromm)在Scientific American杂志上发表了“流体力学的计算机实验”一文^[5],提出计算机实验的概念.1965年,Zabusky和Kruskal通过数值实验揭示了KdV方程的孤立波所呈现的守恒性与类粒子性^[6].利用计算物理技术,人们不断提供一系列新概念,并发现一系列新的物理现象,从而实现了计算物理理解、发现和预言新物理现象的目的.事

* 2002-01-16收到初稿,2002-02-27修回

† 通讯联系人.E-mail:junni@mails.tsinghua.edu.cn

实上,到 20 世纪 60 年代末,计算物理的成果已经奠定了它作为一门独立学科的地位.至此,计算物理学已经成为物理学中与实验物理和理论物理相提并论的一门新兴学科.

计算物理是一个多学科的交叉领域,往往需要物理学家、数学家和计算科学家进行跨学科的协同研究.一方面需要站在本领域研究前沿提出挑战性的问题,另一方面,它还需要运用许多基础数学理论(如偏微分方程理论、线性代数、非线性规划等),还需要充分掌握和运用先进的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 年诺贝尔化学奖的科恩(Kohn)在大学和硕士研究生阶段是学习应用数学的,后转为攻读物理学,跟随哈佛大学的著名的物理学家施温格(Schwinger)教授攻读博士学位.这样就奠定了他的多学科的知识背景,为他后来在计算凝聚态物理上做出突出贡献打下了基础.

2 研究内容和前沿

计算物理形成后,它的研究工作和应用迅速扩展到不同领域.受计算物理学影响最大和发展最快的几个领域包括统计物理学、凝聚态物理学、粒子物理学和流体力学等几个发展迅速的学科.然而,计算物理可以发挥作用的绝不局限于这些领域,只要能够利用数值计算的方法解决的物理问题都是计算物理研究的内容.

计算物理不必像理论物理那样,为了使问题可解而大大简化模型,使得它尤其擅长复杂现象的研究.统计物理是计算物理最早涉足的领域之一.统计物理需要研究的系统包含的粒子总数是非常巨大的.统计物理学从微观的角度研究宏观的物理现象,而微观对象的数量总是非常巨大的,所以传统的解析方法在处理统计物理问题时,许多问题不能得到解决.例如,在统计物理学中最简单而又应用广泛的伊辛模型,只能在一维和二维找到解析解,具有量子效应的海森伯模型只有一维解.计算物理的出现无疑给统计物理的发展带来了新的曙光.如果让计算机描述每一个微观粒子的状态,并按照微观粒子的运动规律决定其下一个时刻状态,如此循环,就可以模拟大量微观粒子组成的宏观系统的动力学过程.目前在统计物理学领域使用最为成熟的计算机模拟方法就是所谓的蒙特卡罗方法^[7,8],它使用计算机提供的伪随机数并采用随机行走的方法设计系统演变

的动力学过程,从而模拟实际系统的变化过程.从原理上说,使用模拟方法能够解决大量的统计物理学问题.虽然如此,由于随着系统包含微观粒子数的增加,计算量将以幂函数速度增加,人类目前使用的计算机还不能完成任意宏观系统需要的计算量.

计算物理在一些相对成熟的物理学分支如电动力学和流体力学领域也能大有作为,虽然这些领域的物理问题能够由相当完美的方程组来描述.但是,电动力学和流体力学中给出的都是非常复杂的偏微分方程组,传统的分析方法几乎无能为力.然而,如果使用几种非常成熟的数值计算方法,譬如有限差分方法(FDM),有限元方法(FEM),傅里叶变换方法(FTM)和多网格方法(MGM)等,计算物理能得出令人满意的结果.

计算物理的一个最重要的特点,是能够模拟实验上不能实现或很难以实现的物理系统,这包括早期宇宙行为、强磁场、极高压、极低温或高温环境下物理系统的行为.例如使用超级计算机分析和模拟不同星际爆炸的方式,研究星际尘埃以及不可见的“暗”物质,由此可以推断未来宇宙的命运.地球内部有几百吉帕的压力和数千度的高温,其内部物质的主要成分为铁,它的物理行为如熔解曲线和弹性模量等可以使用第一性原理分子动力学方法进行定量预测^[9].另外,有些实验是非常昂贵的,像用于高温等离子体研究的托卡马克(Tokamak)装置的运行,托卡马克装置中的输运过程和动力学往往需要超级计算机进行事先的模拟.

计算物理学之所以能够奠定其作为一门独立学科的基础,它在量子力学领域的工作非常关键.计算物理出现之前,相对论量子力学的奠基人狄拉克曾经在 1929 年给出一段著名的评论,他说物理学的一个重要分支——量子力学和整个化学的所需要的所有基本规律都已经给出,接下来的所有工作都应该由数学家来解决,而这些工作只是求解相对论量子力学给出的方程而已(当时,狄拉克已经给出相对论量子力学方程).然而,令数学家非常头痛的是,物理学家给出的相对论量子力学方程非常复杂,传统的数学方法根本无法求解,甚至在使用近似方法的前提下,也很难求解.值得强调的是,狄拉克给数学家提出的问题现在不仅是由数学家来解决的,而主要由物理学的另一个新分支——计算物理来解决.大多数量子模拟的基础是费恩曼的路径积分和相对应的量子蒙特卡罗方法,它们是量子色动力学计算的基础,参与强相互作用的粒子由“夸克”组成,夸克

之间的相互作用靠“色荷”耦合。由于夸克的内部具有复杂的对称性,它们的相互作用理论即量子色动力学表现出复杂的特性并且没有很好的作微扰的小参数,威尔逊提出采用离散点阵进行量子场论的计算,称为格点规范场。格点规范场方法可以处理“夸克禁闭”,定量计算强子的质量谱等,这样使得粒子物理工作者不再单纯依赖造价昂贵的大加速器上的实验结果,也可以通过计算机进行“虚拟”测量。量子蒙特卡罗也可以用来模拟原子核结构,原子核相互作用较复杂,它包括自旋和同位旋算符。目前可以用量子蒙特卡罗方法对不到 10 个核子的系统精确地进行计算^[10]。

20 世纪 20 年代,薛定谔给出了描述分子中核子和电子运动规律的非相对论波动方程,原则上,非相对论波动方程能够给出所有原子中核子和电子的动力学规律。但是,人们能够求解的系统仅仅局限于只有一个质子和电子的氢原子体系,而由两个氢原子组成的氢分子或者由两个电子和两个质子组成的氦原子系统就无法求解。在统计物理的平均场近似方法思想的启发下,哈特里(Hartree)和福克(Fock)在波恩-奥本海默近似方法的基础上提出了广泛应用物理化学的哈特里-福克方法。哈特里和福克充分利用自治理论,在大量迭代运算过程中得到收敛的结果。哈特里-福克自治场方法在处理多电子系统非常成功。目前,已经形成成熟的哈特里-福克自治场方法程序库,可以开展广泛的计算工作,这一方法随着算法的改进,已经能达到误差低于 1% 的精度,并且可以计算键能和反应热。

在薛定谔提出量子的波动方程的 40 年后,科恩, Hohenberg 和沈吕九(Sham)在 1964 年提出了一个主要的计算思想。他们证明电子能量由电子密度所决定,从原理上,可以通过电子密度得到所有电子结构的信息。这样就不需要处理复杂的多体波函数,而只需要三个空间变量即可描述电子结构的性质。这一方法被称为电子密度泛函理论^[11-13]。科恩也因此获得 1998 年的诺贝尔化学奖。哈特里-福克自治场方法应用于分子中的多电子系统相当成功,但随着电子数的增加,哈特里-福克方法计算的困难程度大大增加。密度函数理论就是为了解决这个问题而提出来的。科恩和沈吕九密度函数理论认为,粒子的哈密顿量取决于电子密度的局域值,由此可以得出局域密度近似方法^[13]。30 多年来,该方法已经成为固体结构和电子性质计算的最主要的方法。目前人们称基于该方法的自治计算为第一性原理方法。

应该说基于局域密度泛函的第一性原理方法,对于电子的基态的计算是非常准确的,与电子基态能量相关的物理如电子的能带结构、结合能、声子谱等都能用局域密度泛函方法进行定量计算。第一性原理计算固体光学响应的困难在于波函数中的多电子效应,即便忽略电子-空穴相互作用,计算介电函数,也要求知道激发态能量与波函数。因此,20 世纪 80 年代中期以前,难以用第一性原理计算来确定固体的光学性质,局域密度泛函方法过低估计带隙 50% 以上,而哈特里-福克方法则过高估计。1985 年,在 GW 方法^[14](即在电子格林函数 G 中采用屏蔽库仑相互作用势 W 计算一阶电子自能)基础上发展了用第一性原理计算实际体系准粒子能量的方法,可以计算各种光学性质。

应该说,计算物理学在统计物理和凝聚态物理方面的应用可算最为成熟,取得的科研成果也相对较多。在统计物理和凝聚态物理领域中最具有代表性的三类方法就是分子动力学方法、蒙特卡罗方法和基于第一性原理的能带计算方法。分子动力学方法和蒙特卡罗方法是出现最早的两种方法,前者采用牛顿方程的数值解,并结合各态历经建立热平衡的条件,而后者则通过相空间的随机行走实现细致平衡,它能够使系统按照人们需要的途径进行演化,最终得到自由能最低状态。除了分子动力学和蒙特卡罗方法外,还有很多在计算固体的电子结构、基态、相图等方面使用得相当广泛的其他方法。集团变分方法(CVM)^[15]是求解固体相图和基态最为有效和常见的方法。它根据“原子组成集团”的思路给出非常难于求解的固体系统的熵,从而顺利地给出了自由能与系统构型之间的关系,为求解系统自由能最低状态和系统动力学过程打开方便之门。这种方法已经给出许多实验难以得到的结果。主方程方法在处理相变和生长动力学方面也是相当成功的。对于生长过程,平衡生长可以由相图来描述,结合第一性原理的总能计算,第一性原理的相图计算已能得到各种金属、半导体合金和化合物的相图。非平衡生长的大尺度行为主要采用蒙特卡罗方法模拟^[16,17]。非平衡生长过程中存在多种弛豫过程,类似其他非平衡过程,它包括很宽的空间和时间尺度范围^[18]。

计算物理学还具有一个非常重要的应用——实验数据处理^[19]。计算物理远远不只包含用模拟和数值分析来为物理系统提供洞察力和解释的作用,它在海量实验数据的获得、处理和理解,以及实验数据的模拟等方面发挥着非常重要的作用。例如,在高能

物理中,高能粒子加速器中的大量高能粒子探测器给出的数据以万亿字节计,处理、分析和解释如此大量的数据,并从中获得规律性的结论,计算机和计算物理是同样不同缺少的工具.同样,在研究环球大气环境的地球物理学中,气象卫星返回地面的数据也数以万计,根据卫星数据得到气象参数必须得到计算机和计算物理的帮助.

经过不到一个世纪的发展,计算物理日趋成熟,并已经应用到许多物理领域,包括统计物理学、核物理、高能物理、粒子物理、生物物理、凝聚态物理、地球物理、大气物理、光学、力学、流体力学、电磁学、量子力学、量子色动力学等领域.除了在各个学科中,计算物理学在各种工程项目中也得到广泛的应用,从近年来国际计算物理会议、全国计算物理会议中可以清楚看出这一点.

计算物理可以分为不同层次,而不同层次的计算由于涉及的时间和空间尺度是不一样的(如表 1 所示).大体上说,计算资源 = $C \times N^{\alpha} \times t$, t = 物理现象的时间尺度, N = 粒子数, C = 复杂性, α 是依赖于问题的算法和复杂性的参数.不同层次的计算往往采用不同的物理模型和计算方法,在核与粒子层次,量子蒙特卡罗是其最主要的方法,在原子分子层次,主要涉及两方面的计算,即结构和电子性质的计算.结构计算有蒙特卡罗、分子动力学、集团变分法等,电子性质主要是能带计算理论.由于结构和电子性质互相关联,所以目前的计算方法往往是结合两者,如第一性原理分子动力学^[20].纳米尺度的研究是凝聚态物理研究的热点,由于纳米尺度涉及几百到几万个原子,所以往往需要高性能计算机来处理纳米尺度物理问题的计算问题,目前第一性原理计算已能够处理数百个原子的计算.在介观尺度,蒙特卡罗和分子动力学方法仍然扮演着关键的作用,它们可用于高达几十万甚至几百万个原子的计算.对于宏观尺度,其物理行为由经典力学和连续力学描述.在不同尺度之间,往往需要对于不同方法的数据进行衔接,从而进行多尺度的计算,使得小尺度的性质如电子的能带性质用于大尺度的计算中.对于介观和宏观尺度之间如何进行有效的计算,仍然是计算物理学家所面临的挑战.

表 1 计算物理的层次

尺度	核与粒子层次	原子分子层次	纳米	介观	宏观
长度/m	$< 10^{-11}$	$10^{-11}—10^{-8}$	$10^{-9}—10^{-6}$	$10^{-6}—10^{-3}$	$> 10^{-3}$
时间/s	$< 10^{-16}$	$10^{-16}—10^{-12}$	$10^{-13}—10^{-10}$	$10^{-10}—10^{-6}$	$> 10^{-6}$

3 发展展望

计算物理的研究需要的实验条件是高速运行的计算机,其实验室的工作就是在各种理论或者实验基础上构造虚拟的自然过程,从而观察其中可能发生的现象.计算物理得益于计算技术的高速发展,特别是超级计算机的发展和 PC 机的普及. CDC6600 是第一台被称为“超级计算机”的计算机,它诞生于 1966 年,其速度为 3 兆(M)浮点运算率. 20 世纪 90 年代超级计算机已经达到吉(G)浮点运算率的水平,现在已经达到太(T)浮点运算率的水平.实际上,超级计算机这一名称也是“动力学”的.随着时间的进化,现代的奔腾 PC 机已经达到 20 世纪 80 年代超级计算机 CRAY 机的水平.现在“超级计算机”已经更多地称为“高性能计算机”或者“高性能计算环境”.因为现代计算技术已不仅仅要求高速度的 CPU,也要求有大的内存,高速的网络环境和优异的可视化环境.并行计算已成为高性能计算机的主流,不但目前超级计算机采用并行处理的结构,PC 机也可以在 Linux(一种可运行于 PC 机的免费操作系统)下组成集群(cluster)运行并程序.高性能计算环境还包括计算技术的发展,虽然 Fortran 语言一直是物理学大规模计算中最常用和速度最快的编程语言,但与 C/C++, Python 和 Perl 等不同语言的结合已越来越流行.当前计算物理的项目越来越向大型化发展,需要不同研究组的科学家共同完成,分布式同步开发软件(如 CVS)已成为重要工具.

过去几年, CPU 处理器的速度每 18 个月增加一倍(Moore 定律),并且计算成本下降,1995 年 200 美元/兆浮点运算率变为 20 美元/兆浮点运算率,计算物理是最受益的领域之一.例如,最早的分子动力学模拟只有 32 个粒子,现在已能进行上百万粒子的计算.为了运行重大的挑战性课题,目前高性能计算机要求能提供 1 太浮点运算率的计算能力,1 太字节主存容量和 1 太字节/秒的 I/O 带宽,这就是所谓的 3T 性能目标.可以预料,硬件环境仍然会持续改进,预计到 2010 年,将出现计算速度为 1 千太浮点运算率的计算机.未来新型的计算机,如量子计算机仍需物理学家和计算机科学家共同努力探索.

算法上的革新是计算物理学家最重要的研究内容.随着体系的增加,计算量与自由度 N 成幂函数增加, Order - N 计算量仅随体系尺寸线性化增加的算法是最好的算法.对于分子动力学和蒙特卡罗计

算,可以容易地设计 Order - N 的算法,计算的粒子数从 1953 年的几十个粒子到现在已达到几百万个。已能模拟裂纹的物理行为^[21]。相对来说,由于量子散射具有指数性的复杂度,需要较精确计算的量子散射问题,从 20 世纪 50 年代处理两体散射到现在四个粒子的散射的计算仍是一个挑战^[22]。即使对于简单系统仍有许多复杂问题,如溶解问题、高分子运动、蛋白质折叠以及玻璃体系的行为等仍然是没有完全解决的问题。除了平衡态的问题外,未来越来越多的研究会更加关注动态效应(扩散、输运、激发态)。

现在量子蒙特卡罗方法越来越成熟,特别是 Order - N 算法,其速度在某些体系,已经超过局域密度泛函方法^[23]。虽然第一性原理计算已经取得了巨大的成功,但第一性原理计算只适用于电子关联弱的体系,如何在强关联体系中引进第一性原理的计算是未来努力的方向,近年来在这方面有一些进展,例如结合密度泛函理论和处理关联体系的动力学平均场理论计算关联的 f 电子体系^[24],这方面的研究还需计算物理学家和理论物理学家的更好的合作。

计算物理也展现出更大的应用性,计算物理与材料科学的结合而形成的材料设计学能够为材料科学家提供设计分子和材料的“虚拟”环境,从而替代传统的试错法的研究手段,为材料科学领域带来一场科学革命^[25,26]。

近年来,两个新的趋势正在形成(1)大的多学科的物理的合作团队共同研究挑战性的课题;(2)计算、实验和理论实时的交互合成。可以说,20 世纪的计算物理学取得了巨大的成功,21 世纪的计算物理学会在更高层次上发展。

参 考 文 献

[1] Hoffmann K H, Schreiber M ed. Computational Physics. Heidelberg: Springer-Verlag Berlin, 1996
 [2] 郝柏林,张淑誉.漫谈物理学和计算机.北京:科学出版社, 1992 [Hao B L, Zhang S Y. Ramble about Physics and Computer. Beijing: Science Press, 1992 (in Chinese)]

[3] 张锁春,蒋伯诚.高科技研究中的数值计算.湖北:科学与工程技术丛书编辑部,2000.1—6 [Zhang S C, Jiang B C. Numerical Calculation in High-Tech Research. Hunan: Computational Series Editorial Department of Science and Engineering, 2000.1—6 (in Chinese)]
 [4] Fermi E, Pasta J, Ulam S. Los Alamos Rpt. LA - 1940 (1955); Collected Papers of Enrico Fermi. Chicago: University of Chicago Press, 1965. 977
 [5] Harlow F H, Fromm J E. Scientific American, 1965, 212: 304
 [6] Zabusky N J, Kruskal M D. Phys. Rev. Lett., 1965, 15: 240
 [7] Binder K ed. The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics. New York: Springer Press, 1995
 [8] Ceperley D M. Rev. Mod. Phys., 1999, 71: S438
 [9] Laio A, Bernard S, Chiarotti G L *et al.* Science, 2000, 287: 1027
 [10] Carlson J, Schiavilla R. Rev. Mod. Phys., 1998, 70: 743
 [11] Kohn W. Rev. Mod. Phys., 1999, 71: 1253
 [12] Hohenberg P, Kohn W. Phys. Rev. B, 1964, 136: 864
 [13] Kohn W, Sham L J. Phys. Rev. A, 1965, 140: 1133
 [14] Hyberson M S, Louie S G. Phys. Rev. B, 1985, 34: 5390
 [15] Ehrenreich H, Seitz F, Turnbull D ed. De Fontaioe D in Solid State Physics. London: Academic, 1979. 73
 [16] Merkin P ed. Fractals, Scaling and Growth Far from Equilibrium. Beijing: Tsinghua University Press & Cambridge University Press, 2000
 [17] Liu B G, Wu J, Wang E G *et al.* Phys. Rev. Lett., 1999, 83: 1995
 [18] Ni J, Gu B L. Phys. Rev. Lett., 1997, 79: 3922
 [19] 赵凯华等译.物理 2000——进入新千年的物理学.北京:北京大学出版社,2000 [Zhao K H *et al.* trans. Physics 2000——Physics in the New Millennium. Beijing: Peking University Press, 2000 (in Chinese)]
 [20] Car R, Parrinello M. Phys. Rev. Lett., 1985, 55: 2471
 [21] Bulatov V, Abraham F F, Kubin L *et al.* Nature, 1998, 391: 569
 [22] Rescigno T N, Baertschy M, Isaacs W A *et al.* Science, 1999, 286: 2474
 [23] Williamson A J, Hood R Q, Grossman J C. Phys. Rev. Lett., 2001, 87: 6406
 [24] Savrasov S Y, Kotliar G, Abrahams E. Nature, 2001, 410: 793
 [25] 熊家炯等编.材料设计.天津:天津大学出版社,2000 [Xiong J J *et al.* ed. Materials Design. Tianjing: Tianjing University Press, 2000 (in Chinese)]
 [26] Computational Materials Science: A Scientific Revolution about to Materialize. Strategic Simulation Initiative, DOE, USA, March, 1999

·读者和编者·

“《物理》世纪光盘”问世

《物理》编辑部与清华同方光盘电子杂志社合作出版的“《物理》世纪光盘”现已制作完毕,该光盘全文收录《物理》自 1972 年 6 月创刊至 2001 年 12 月出版的共 30 卷约 5000 余篇文章,具有按“年、期、篇名、关键词(任意词)、作者、机构、全文”进行检索的功能,有很高的参考和收藏价值,欢迎广大读者向编辑部咨询有关事宜。