

计算物理学的创生

吴紫标

(华南师范大学 广州 510631)

计算物理学的兴起,是物理学的又一次革命,从此物理学的研究形成了以实验物理学、理论物理学和计算物理学三足鼎立的新局面。

计算物理学以电子计算机(又称电脑)为主要工具,它通过计算机对自然过程进行模拟实验,从而作出发现,这是数学实验的发现,它使物理学由理论物理学作进一步的论证,并由实验物理学检验。

电子计算机是20世纪最重大的科技成果之一,它是物理和数学结合的产物,而它的产生又对物理和数学产生巨大影响。电子计算机实际上已成为物化了的人的部分智力机器,它代替或延伸了人的一部分脑力劳动,具有一定的思维能力,所以又称之为“电脑”。

长期以来,人类在同大自然作斗争的过程中,为了提高计算速度,创造并逐步发展了计算工具。随着科技的迅猛发展,人们迫切要求有计算速度快、精度高、存贮量大、能按程序的规定自动进行计算和自动控制的新型计算工具。

1946年第一台通用电子计算机在美国宾夕法尼亚大学正式诞生,它是物理学真空技术及从物理学中衍生出来的电子技术与逻辑电路的结晶。

电子计算机的计算技术是现代物理学拓展的成果。实现电子计算机的电子技术是以物理学的电磁场理论和电子论为经典理论基础,而量子物理学则是电子技术的现代物理基础。电子计算机所需电子器件和电子线路的发明和发展正是以这些物理学理论为基础的。

从物理学角度看,电子计算机一方面可以大大缩短可解析解的计算时间,另一方面可以对那些大量没有解析解的非线性方程进行数值计算。从实验物理学角度看,电子计算机可以帮助采集和处理数据,实现自动测量以及模拟

实验。计算物理学通过数学实验表达崭新的物理概念,作出新的物理发现。

计算物理学是以数学实验的兴起为起点的,而数学实验是一种介于古典演绎法和古典实验方法之间的一种新的科学认识方法,它的实质在于它不是对客体或现象进行实验而是对它们的数学模型进行实验。数学实验实际上是计算机技术应用的产物。1955年以费米为带头人的洛斯阿拉莫斯实验室 LA-1940 号研究报告便是计算物理学创生的起点,这篇题为“非线性问题研究”的论文在物理史上称为“FPU”问题。它不仅开数学实验之先河,而且直接导致“孤子”、“混沌”和“长时尾”的发现,统称之为计算机模拟实验的三大发现。这三大发现导致计算物理学出现三种代表性的方法和研究领域,即混沌物理学,孤子物理学和分子动力学的诞生。

一、混沌物理学的诞生

费米等人的 FPU 问题实际上是计算机辅助发现的科学结论。他们用数学方法研究经典离散哈密顿系统的一般性质,导致了“混沌”的发现和混沌物理学的产生。

“混沌”(chaos)作为一门学科的名称是由约克命名的。1975年他在《美国数学月刊》上发表了题为“周期3意味着混沌”的论文。“混沌”这个术语至今尚未有严密的定义。现在人们一般把动力学系统的“不稳定带”和“奇怪引子”均称为“混沌”。

下面我们从相迹吸引子开始介绍这个新科学领域的产生和发展。所谓相迹是指相空间中表象点随时间变化的轨迹。而相空间的概念则是统计力学发展的产物。相空间是现代物理学最强有力的发明之一。它有两个重要的作用:第一,它可以用一个点抽象出动力系统的实质

信息;第二,可以把系统的运动化为视觉形象,以便直观地理解力学系统的运动。

在一切有吸引子的实际系统中,各部分的运动会由于来自外界的种种扰动而暂时偏离,但最终运动还是倾向于回到吸引子,也就是说吸引子是运动的归宿。

在以广义坐标和广义动量为变数的动力学系统的相迹中,稳定的不动点和极限环面被称为“吸引子”,它表示系统的最终行为。

而在摄动系统的可能的解中,有些是规则的解,有些则是带有随机成分的解,但每一个带随机成分的解都被限制在两族规则解的 KAM 环面之间,这个区叫“不稳定带”。

1960 年以来,埃依、海斯和洛伦兹等人从现实问题出发用计算机实验观察了轨道的弥散,发现其结果与 KAM 定理定性一致;论证了吸引子是稳定的、低维和非周期的。

1971 年茹厄勒和塔肯斯发表了“论湍流的性质”,文中指出:只要 3 个独立运动就可以产生湍流的全部复杂性,并根据数学推论它们且断言:“必然存在另一种形式的吸引子。”他们称这种形式的吸引子为“奇怪吸引子”,它们具有稳定性、低维性和非周期性。

把上面这些工作和洛伦兹 1963 年的工作联系起来的是约克。他写了“周期 3 意味着混沌”的论文于 1975 年发表。同事们劝他不要用“混沌”这个不庄重的词,但他认为这个词能代表这个正在成长而未有严密定义的分支学术术语。

通常,自然界中的复杂过程和不规则的形状具有自相似性(即整体与部分相似的特性)与无标度性(指不能用一个特征尺度标志其形状特征的特性)。而混沌物理学从动力学系统出发研究不可积系统轨迹的不稳定性,而分形几何学则从几何学入手研究不可积系统几何图形的自相似性,即研究混沌吸引子的自相似性。

分形(fractal)这个词是曼德耳勃罗在 1975 年提出的。他研究棉价的涨落、电讯传输误差分布、尼罗河水位规律。他还分析英国科学家理查逊 1920 年提出的海岸线问题,发现海

岸线的长度随着测量尺度的变小而变长,并于 1967 年发表了“英国海岸线是多长,统计的自相似和分数维”的论文,从此开始了分形几何学的研究(即研究自然界常见的、变化莫测的、不稳定的、不规则的现象)。

然而混沌吸引子常常有不简单的结构,它一般由许多部分组成,并且常常是很破碎的。对于混沌吸引子,以规则性为基础的直觉不起作用。最有用的维数观念是分维(即维度可以用分数值表示的新方法)。混沌吸引子具有分形结构,已由实际测得的分维数所证实。例如实验测得吸引子的李雅普诺夫维数定义为

$$D = j - \frac{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_j}{\lambda_j}$$

其中 λ 为平均扩散率, j 为 $(\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_j)$ 为负值的编号中的最小者。

符号动力学是把一个动力学系统当作一个比较简单的符号动力学系统进行研究的。它是一种在有限精度内描述动力学系统的一种有效办法。人们用符号动力学系统模拟实际的力学系统研究系统的复杂行为。一维映射符号动力学对非线性物理系统的混沌运动应用已取得肯定的成果,已可以用符号动力学的方法,对混沌作出某种形式化的定义,讨论混沌的发生,刻划混沌的水平。如符号动力学应用于物理系统的可能性,在费根鲍姆 1978 年的工作中可以直观地被理解。符号动力学的基本精神是由符号位移模拟运动。

二、孤子物理学的形成

“孤子”这个词是札布斯基和克鲁斯卡尔在 1965 年引进的,它被定义为一种局域或孤立的物理实体,它以一致的速率传播,并且在它们彼此之间相互作用时保持其结构(或形状)和速率不变。

孤子现象是非线性场的一种重要的现象,是 20 世纪后半叶场物理学的重要研究对象。许多非线性方程都可以用具有孤子解的非线性演化方程来逼近。这些方程在许多情况下提供一个比线性化方程更好的起点,或者说更好的零级近似。在这个基础上再利用孤子自由度的

微扰方法去逼近真实系统,这种用孤子解处理非线性物理问题的方法,已经形成一种模式。

1834年罗素在河水中发现“孤波”,他在一条小河上偶然发现:当行驶中的小船骤然停止时,水道中的小船所推动的一大堆水却并不停止,水积聚在船头猛烈地激动着,然后水浪突然呈现出一个很大的、孤立的凸起,那是一个滚圆而光滑、周界分明的水堆,它以巨大的速度向前滚动,而小船却留在它的后面,他称该平移波为孤波,实际上代表着流体力学中范围很广的一类解,孤波是稳定不散的平移波。

科尔特威和德伏里斯根据流体力学方程导出一个具有孤子解的偏微分方程,1958年苏联学者萨哥杰耶夫证明孤子可以在等离子体内传播,完全类似水面上的孤子,1960年伽德纳和林川确定了描述电磁场中等离子体的方程和浅水波方程之间的明显类似性。

本世纪60年代克鲁斯卡尔和札布斯基用渐近法导出KdV方程,并发现孤子的碰撞是弹性的,此后KdV方程被尝试应用于各种波动问题,成了物理学研究的重要对象。

札布斯基把孤子物理学的历史分为三个时期:

第一个时期(1964年以前),从FPV计算机实验开始到克鲁斯卡尔和札布斯基导出KdV方程结束;

第二个时期(1965~1971年),被札布斯基称作“英雄的时期”,主要是对具有孤子解的典型方程KdV方程和正弦-高登方程及非线性薛定谔方程所进行的种种研究;进行反散射的研究;对孤子图形学的确定;

第三个时期(1972年以后),是孤子物理学模式确立期。

孤子的概念提出后,人们探讨了借助孤子解解非线性演化方程的方法,其中借助于反向的散射的方法,被称为反散射变换,这方法后来成了研究非线性演化方程的基本方法之一,除此还有扩展法和对称近似法,实践证明,用计算机绘制孤子相互作用的图形,孤子的形象极易直观地理解。

在70年代中,粒子物理学家开始研究孤子对粒子物理学的应用,并为了适应在量子水平上的需要,对传统的孤子理论的某些方面作出了修正和拓展,孤子型解的存在,被几位粒子物理学家视为一种新的类粒子激发,是属于非线性效应支配的体系,而不是理论的“基本”粒子被标准线性化了的小振动的量子化模式能保持的体系。

粒子现象的完全处理必须是量子化的,粒子物理学的孤子同样必须量子化,而孤子最初只不过是经典水平上作为粒子出现的,由于描述基本粒子的许多非线性场论也有孤子解,并且它们相应于异常类粒子激发时,从而发展孤子量子化的方法就成了重要的任务。

实践与理论研究证明孤子的数学理论结果大多是1维的,而传统的粒子现象是3维的,因此,物理学家正在拓展多维系统中的孤子理论,这种量子孤子的研究成果将为孤子物理学在凝聚态物理学中的应用开辟广阔的前景。

三、分子动力学的拓展

分子动力学是从1950年发展起来的用计算机模拟研究物性的一种代表性的方法,利用计算机的高速自动计算功能在众多粒子(高达数十万以上)的场合中进行统计模拟得出接近客观现实的物理方法,它已渗透到气体和固体中的应用。

阿耳德和温利特在1957年发表了他们用钢球势计算的第一个成果,开创了分子动力学,他们的有重大意义的贡献是1967年通过计算机实验发现速度相关的“长时尾”现象。

长期以来人们一直认为相关函数的衰减是指数型的,但计算机速度自相关实验结果则打破了这种轻信,而计算机实验发现:速度自相关函数的衰减只在几个平均自由度时间内是指数型的,而随后的更长时间内则按幂次衰减,即在很快的指数衰减之后,还要拖一个长长的尾巴,即所谓长时尾,这是计算物理学的数学实验的重大发现,然而,计算物理学的“计算”最重要的意义在于“发现”,它类似于实验物理学中的实验发现的功能。

生物物理的发展与前景

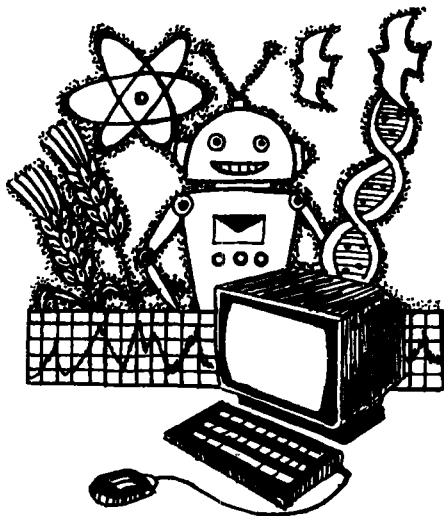
刘义保

(华东地质学院物理教研室 上海 200062)

物理学是研究自然界物质结构及运动规律的学科,是自然科学的基础,是一门既古老又“摩登”的学科.它提高了我们对自然界的基本认识,拓展了对人类有深远意义的知识,它所孕育的新技术已深深植根于我们的文化生活和日常生活中.而生物学的历史却比较短.“生物学”一词是19世纪的产物,在此之前生物学本身并不存在,

只有医学(包括解剖学和生理学)、博物学和植物学(某种混合的东西).生物学思想中的重大变革直到19世纪才开始产生(进化论、遗传学、DNA双螺旋结构).本世纪40—50年代物理学与生物学有较多或较深入的结合,并发现了DNA双螺旋结构,开创了分子生物学.人们认为,对DNA精细结构的认识是20世纪生物学的伟大成就之一,其重要性可与19世纪达尔文及孟德尔的成就相比.

实际上,在DNA双螺旋结构发现之前,物理学与生物学就有些结合,生物研究历来都使用物理工具(如显微技术),生物现象基础内容的揭示也向物理学家提出过挑战,如早期光学



显微镜观察细菌活动得到的布朗运动现象,曾导致爱因斯坦总结出流体扩散的基础统计力学.但由于早期生物学家和物理学家的相互不理解,生物学与物理学没有更好地结合起来.有些生物学家,如斯马特,认为生物学中没有物理学所特有的那种普遍规律,而大物理学家卢瑟福却把生物学称为“收集邮票”.1945年,量子力学

创始人之一薛定谔写出《生命是什么》一书,从物理概念、物理思想剖析生命现象,使物理学家、生物学家意识到生物学与物理学结合有实在的内涵.1953年,沃森和克里克,一位生物学家,一位物理学家,通过对物理和生物两个领域的科学思想的深刻理解,相互启示和密切合作,发现了DNA分子双螺旋,共同创造了划时代的成就,同时也使生物学与物理学的结合愈来愈广泛和深入,从而诞生了一门新兴的边缘学科——生物物理学.

生物物理学是以物理学的理论和方法研究生命现象中的物理和物理化学过程的科学,也是物理学与生物学结合的一门边缘学科.生物

分子动力学在20世纪80年代前期在研究方法上有较大的变革.这种变革使古典分子动力学的适应范围大大扩大.如温度一定、压力一定,以及非平衡态的分子动力学的实验方法的应用.

巴瑞奈罗和兰曼发展了压力一定的分子动力学方法,并把晶体结构的变化化为单胞形变,

详细地研究了温度、体积、分子动力学原理的边长以及边之间的夹角的关系.

总而言之,20世纪确是物理学的黄金时代,是现代物理学拓展的起点,也是现代自然科学变革的起点.现代物理学之所以有这样光辉的成就,是物理学的本性——研究物质最普遍最基本的运动形式所决定的.