

很久以来,物理学家通过大量的数值计算得到他所要的结果.例如物理学家 R. D. Hartree 从 1928 年起一直到五十年代做了大量的原子物理的计算,并建立了计算原子结构的重要方法.1927 年 W. Heitler 与 F. London 将量子力学应用于氢分子,开创了量子化学.在量子化学中分子结构的计算量也是很大的.那时的计算也有使用计算机进行的,不过这种计算机是属于机械性质的.

电子计算机是在本世纪四十年代中出现的.1946 年美国的 ENIAC 开始运行,Mark 系列的计算机以及英国的 EDSAC 等也先后问世.开始时,大型电子计算机是供军事的需要的,原子能也是它们的服务对象之一.杰出的数学家 J. von Neumann 是在这方面很有贡献的,他曾参与了 ENIAC 的设计,并开创了在电子计算机上具体实现蒙特卡罗方法.

当时人们使用计算机,需要根据电子学的特点来编制程序的.编制这种程序的工作人员必须经过一段较长的训练时间,编制程序是相当复杂的.五十年代中叶,人们开始研究在电子计算机上使用语言.例如 FORTRAN 语言是 1954 年开始提出的,1957 年在 IBM-704 上,1958 年在 IBM-705, IBM-709 上建立了 FORTRAN 语言. ALGOL 语言是在 1955 年的 Darmstadt 电子计算机会议上提出的.五十年代末到六十年代初,电子计算机上才大量推广语言的使用.当时人们称之为自动化程序 (Automatic Programming).在当时的文献中人们对自动化程序与原始的程序编制方法作了很多颇有兴趣的比较.

计算机使用语言编制程序,是计算机推广使用的一个重要转折点.自此以后;使用计算机就可不限于具有专门训练编制程序的专家们.要使用计算机的人,只需要经过短期训练,就能在计算机上做他要做的事了.

为了在计算机上使用语言编制程序,就要发展计算机软件的工作.现在计算机软件工作发展得特别快.人们不仅可以作很复杂的数值计算,并且可在计算机推导公式、作几何命题的证明等等.

目前在物理学的各个领域中,使用计算机已成为一种不可缺少的工作手段.对理论物理学来讲使用计算机是好像实验物理学家使用仪器那样的一种有力工具(现在实验物理学家对计算机也已成为一种不可缺少的实验工具了).计算机的使用不仅仅人们的手工计算为机器所代替,而且还得到没有计算机难以得到的物理知识.

在统计物理中,我们经常要求某一量 A 对系综的平均值,必须计算积分,而积分是按整个相空间取的.如果系统是由一百个粒子组成,则这空间相当为六百维的.因此,这个积分的维数一般是相当高的.照通常的数值积分方法,积分先化为差分形式:这里积分维数是很高的,如果每一维空间上取 $n = \frac{X}{\Delta x}$ 个间隔,则在整个相空间中需有 n^N 个格点.计算这样的积分似乎是不可能的. Metropolis 等用重要抽样的思想求这样高维积分之值.他们的方法是按几率:

$$P(x) = \frac{\exp\left[-\frac{H_N(x)}{kT}\right]}{\int dx \exp\left[-\frac{H_N(x)}{kT}\right]}$$

抽样.取满足分布 $P(x)$ 的点 x_ν .用这些点计算 $A(x_\nu)$.于是很简单地求得

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^M A(x_\nu),$$

M 为计算中所取的点数. McMillan 将上述方法应用于引量子系统中去.在格点规范场理论中,也出现高维的积分,可用类似的方法计算.

又如原子反应堆的设计制造,从经济角度和安全角度都不可能在建堆之前,预制很多反应堆来研究其特性.第一步是根据各种考虑来做不同模型的计算工作,以选择比较合适的方案.反应堆的整个计算要牵涉到 neutron 输运问题,热工、水力学等问题,所以是相当复杂的.单就 neutron 输运问题来讲,由于反应堆结构的复杂性,精确度要求较高,常要求解三维多群中子扩散方程,并有边界条件.用一般的偏微分方程网格法求解这方程组需要上百万个网格点,计算工作量是十分庞大的.人们用粗网格法来使这种计算简单化.虽然这样,反应堆的计算工作量还是很大的.

从上面举的几个例子可以看到,在原子核物理中,在统计物理中,在反应堆工程中只有使用计算机才能得到对客观物理事物的认识.

从实验物理讲,每一学科领域有它的本身的实验课题.计算物理也是这样,每一学科领域有它本身的计算课题.如天体物理、弹道学、流体力学、热力学、光学、电磁学、从宏观物理到微观物理各有大量的计算课题.物理学家对各自研究的领域建立了有效的计算方法,和编制了使用灵活的计算程序,在计算机发展的时代,推动了计算物理的发展.

六十年代是计算科学蓬勃发展的年代,而当时我国正逢“十年动荡”时期,难以谈及科学的发展.近年来我国成立了计算物理学会,召开了计算物理学术会议,有些大学内已开设“计算物理”课程,这些措施对我的

国开展计算物理是有益的。我们应该继续以严肃认真的态度，按事物发展的客观规律来推动计算物理在国内的发展。