

计算物理

Computational Physics

课程属性：专业普及课程

学时学分：40 学时 2 学分

预修课程：1) 四大力学；2) Linux/Unix 操作系统环境及命令；3) C/C++ 或 FORTRAN 编程语言；4) 数值计算基本知识。

教学目的、要求：使物理类研究生通过该课程的学习，熟练掌握计算物理中常用的数值计算方法，并对第一性计算、分子模拟、有限元计算和粒子物理模拟的理论、方法及相关数据处理及分析方法有比较全面的了解，初步具备选择合适的算法或软件解决实际理论物理问题的能力。本课程的目的通过理论与实践相结合的训练方法，使学生在完成学习后即能采用适合的数值方法和工具，开展对物理、化学、材料等不同体系的理论研究工作。

讲授内容：

- 1-2 学时：课程及基础知识简介（包括 Linux 环境、C 语言、并行计算、量子力学、统计物理等）
- 3-4 学时：本征问题的求解
- 5-6 学时：电子结构方法（*）
- 7-8 学时：电子关联方法（*）
- 9-10 学时：密度泛函方法（*）
- 11-12 学时：插值和外推
- 13-14 学时：数值积分方法（包括 MC）
- 15-16 学时：方程求根
- 17-18 学时：优化算法
- 19-20 学时：常微分方程的积分
- 21-22 学时：分子模拟中的 MC 方法（*）
- 23-25 学时：分子模拟中的 MD 方法（*）

26-27 学时：快速傅立叶变换 (*)

28-29 学时：偏微分方程

30-31 学时：数据的统计分析 (*)

32-33 学时：数据建模

34-36 学时：有限元方法（包括 Lattice Boltzmann）(*)

37-38 学时：粒子物理中的数值方法 (*)

39-40 学时：期末考试

注：打星号者为教学的重点与难点。

其中王延颢讲授 1-10 学时，周昕讲授 11-25 学时，郭璐讲授 26-40 学时。

教学手段与方法：采用多媒体教学与黑板书写结合的方式。概念陈述的文字及图片和动画展示用投影仪放映，公式推导用板书。

考核方式：期末闭卷考试一次，占总分的 40%，平时作业占 40%，考勤占 20%。

教材：Tao Pang, “An Introduction to Computational Physics”

主要参考书：

(1) W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, “Numerical Recipes in C”

(2) 马文淦,《计算物理学》

参考书：

(1) J. M. Thijssen, “Computational Physics”

(2) 顾昌鑫主编,《计算物理学》

(3) 刘金远、段萍、鄂鹏编著,《计算物理学》

(4) 郭立新、李江挺、韩旭彪编著,《计算物理学》

撰 写 人： 王延颢、周昕、郭璐

（中国科学院理论物理研究所、中国科学院大学）

撰写时间： 2015 年/11 月