



课时安排

| | |
|-------------------|---------------------------|
| 第一章 绪论 (1) | 第七章 高性能计算和并行算法 (1) |
| 第二章 蒙特卡罗方法 (2) | 第八章 计算机代数 (0.5) |
| 第三章 蒙特卡罗方法的应用 (2) | 第九章 Mathematica应用举例 (0.5) |
| 第四章 有限差分方法 (1) | 第十章 机器学习及应用 (4) |
| 第五章 有限元方法 (1) | 复习课 (1) |
| 第六章 分子动力学方法 (3) | |

共17次课

作业安排

| |
|-------------------------|
| 第二章 蒙特卡罗方法 (2) |
| 第三章 蒙特卡罗方法的应用 (2) |
| 第四章 有限差分方法 (1) |
| 第五章 有限元方法 (1) |
| 第六章 分子动力学方法 (3) |
| 第九章 Mathematica应用举例 (1) |
| 第十章 机器学习及应用 (4) |

~14次作业

编程基本代码

简易命令演示

```
In [1]: print("Hello world!")
Hello world!

In [2]: a = 1
print(a)
1

In [3]: array = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14]
print(array[0])
1

In [4]: array = ["1", "2", "3", "4", "5", "6", "7", "8", "9", "10", "11", "12", "13", "14"]
print(array[0])
'1'

In [5]: dict = {"name": "Zhang San", "age": 180}
print(key, dict[key])
name Zhang San
age 180
```

计算NUMPY演示

https://numpy.org/doc/stable/user/absolute_beginners.html

• 常用库函数使用请善用搜索引擎（有中文资源）

```
In [23]: import numpy as np
a = np.array([10, 20, 30])
b = np.array([2, 3, 4])
print("division of a1 and b1:", np.divide(a[1], b[2]))
division of a1 and b1: 3.3333333333333335
print("division of a and b:", np.divide(a, b))
division of a and b: [ 5.  6.  7.  8.  9.]
print("mod of a and b:", np.mod(a, b))
mod of a and b: [ 0  1  2  3  4]
print("quotient and remainder of a and b:", np.divmod(a, b))
quotient and remainder of a and b: ([ 5.  6.  7.  8.  9.] [0.  1.  2.  3.  4.])
matrix = np.eye(3)
print(matrix)
[[ 1.  0.  0.]
 [ 0.  1.  0.]
 [ 0.  0.  1.]]
```

matplotlib画图演示

<https://matplotlib.org/tutorials/figures/figplot.html>

• 常用库函数使用请善用搜索引擎（有中文资源）

```
In [1]: import matplotlib.pyplot as plt
# 设置字体
font = {'family': 'serif', 'style': 'normal', 'size': 14}
plt.rcParams.update(font)
# 设置标题
plt.title("My plot")
# 设置坐标轴
plt.xlabel("x-axis")
plt.ylabel("y-axis")
# 设置图例
plt.legend()
# 显示并保存
plt.show()
```