

$$E=mc^2$$



计算物理导论·绪论

李文飞

南京大学物理学院

E-mail: wfli@nju.edu.cn

2025-2-19

- 计算物理课程简介
- 课程准备--Python语言简介



计算物理课程简介：

- 计算物理是啥 ...
- 计算物理课程学啥 ...
- 计算物理课程咋学 ...
- 计算物理课程成绩 ...



计算物理是啥 ...

计算物理是：

- ✓ 一门年轻的学科；
- ✓ 以计算为主要方式；
- ✓ 以计算机为主要工具；
- ✓ 以解决物理问题、探索物理规律为宗旨；
- ✓ 综合物理、计算数学、计算机科学的交叉学科。

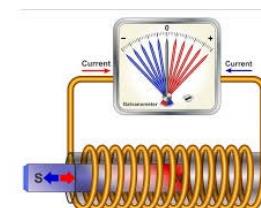
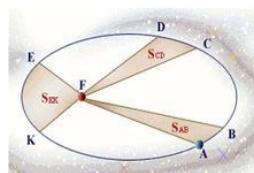
2004年，教育部“物理与天文学教指委”建议将计算物理设为本科生必修课。



计算物理是啥 ...

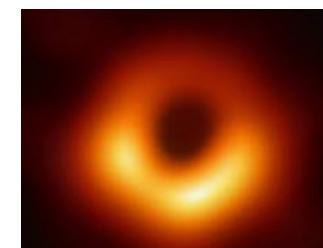
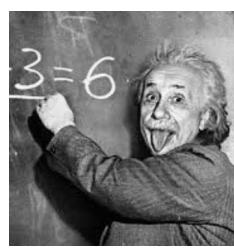
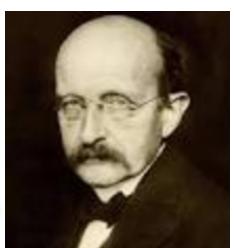
19世纪中叶以前：物理学以实验研究为主

- 牛顿运动定律
- 开普勒天体运动定律
- 库仑定律、法拉第定律、欧姆定律等



19世纪中叶-20世纪初：理论物理开始成为一门独立的学科

- 电磁场理论
- 量子力学
- 相对论



计算物理是啥 ...

基于理论物理方法解决实际物理问题时，往往遇到计算困难：

例如：

- ✓ 牛顿方程 → 两体问题可精确求解，三体以上系统无精确解析解；
- ✓ 量子力学 → 氢原子可精确求解，多原子系统无精确解析解。

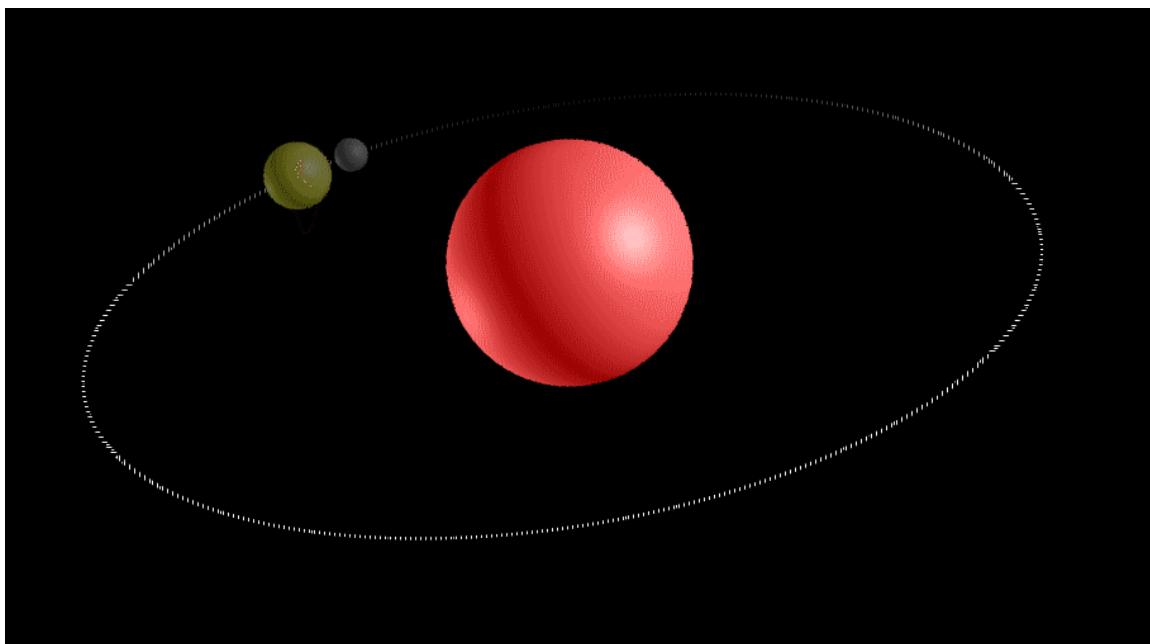
.....

必须求助于计算机！！！



计算物理是啥 ...

太阳、地球、月亮三体问题



$$F = -G \frac{M_1 M_2}{r^2}$$

$$F = ma$$

解析求解非常困难~



计算物理是啥 ...

最早将计算机用于解决物理问题：美国原子弹研制



二战期间，在爱因斯坦等科学家的建议下，美国于1942年开始研制原子弹，称为曼哈顿计划，于1945年研制成功。

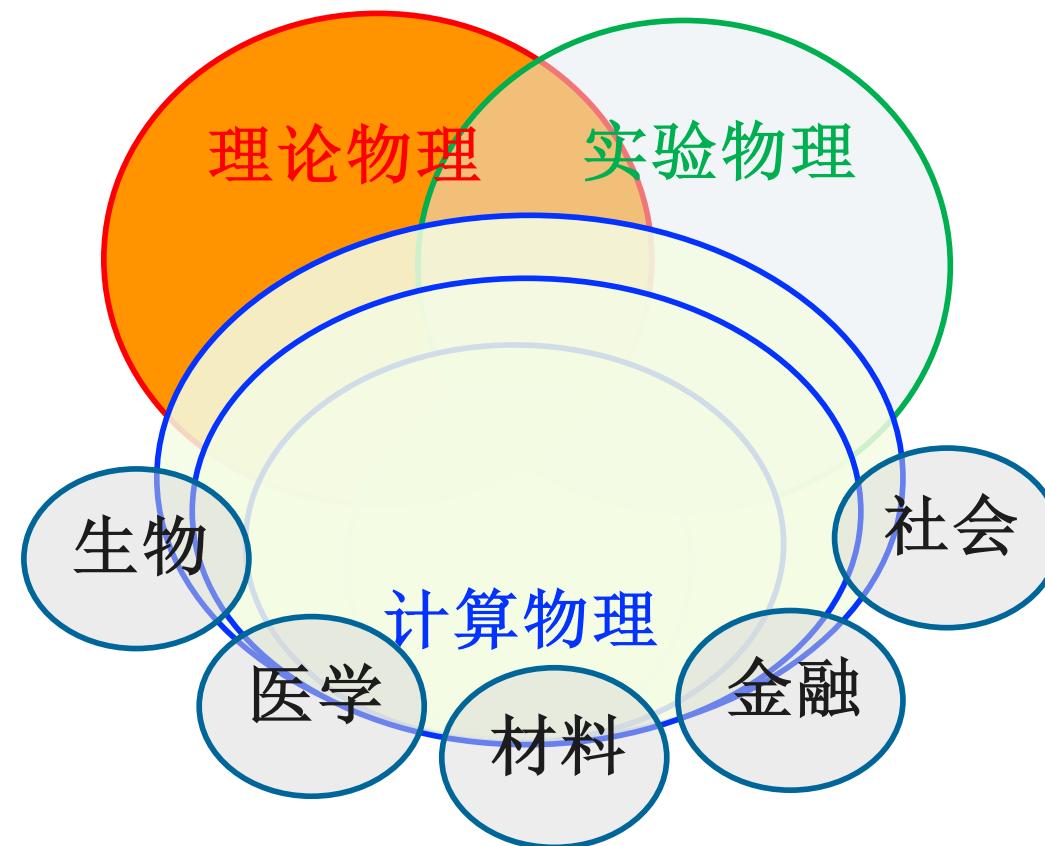
原子弹研制中的计算任务超过人类有史以来所涉及计算量的总和，用人工计算的方法是不可能完成，开始借助计算机！

- ✓ 1959年，曼哈顿计划开始解密，并于1963年开始以《计算物理方法》丛书出版，首次出现“计算物理”一词。
- ✓ 1952年开始，费米和合作者开始用计算机研究非线性系统行为，并撰写了研究报告，被认为是计算物理的正式起点。



计算物理课程介绍

为什么要学计算物理？



计算物理是啥 ...



ENIAC(埃尼阿克)

第一台电子计算机（电子管
）

诞生于： 1946年

速度： 5000次 / 秒



计算物理是啥 ...



微机

5 亿亿次 / 秒

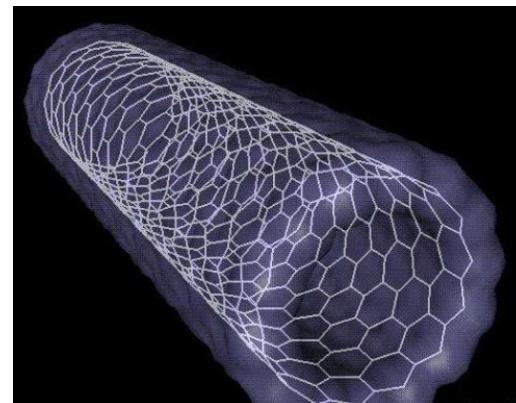
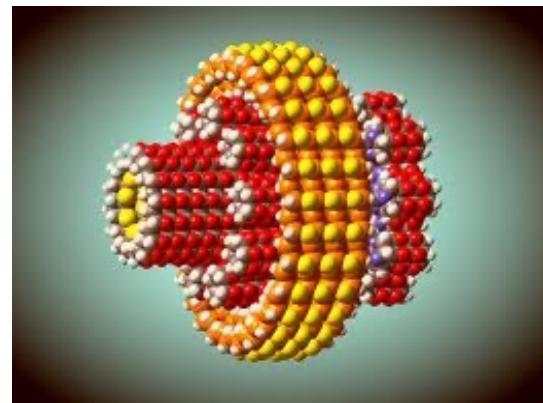
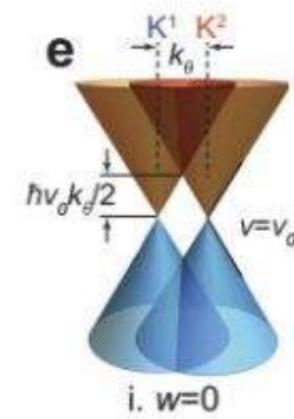
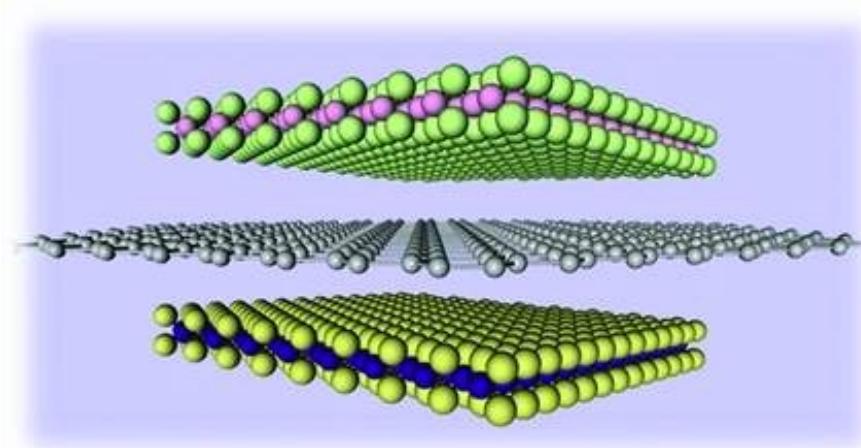
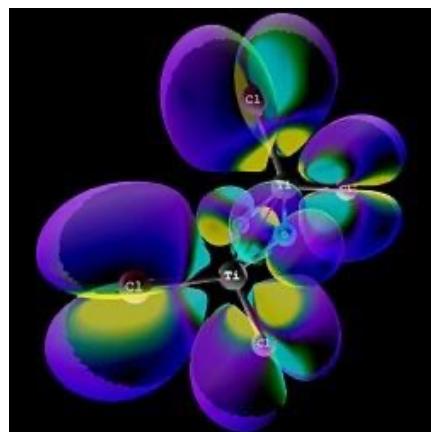


高性能超级计算机

- ✓ 微电子与集成电路技术的发展 → 微机，高性能超级计算机。
- ✓ 天河2号计算速度可以达到5亿亿次 / 秒。



计算物理是啥 ...

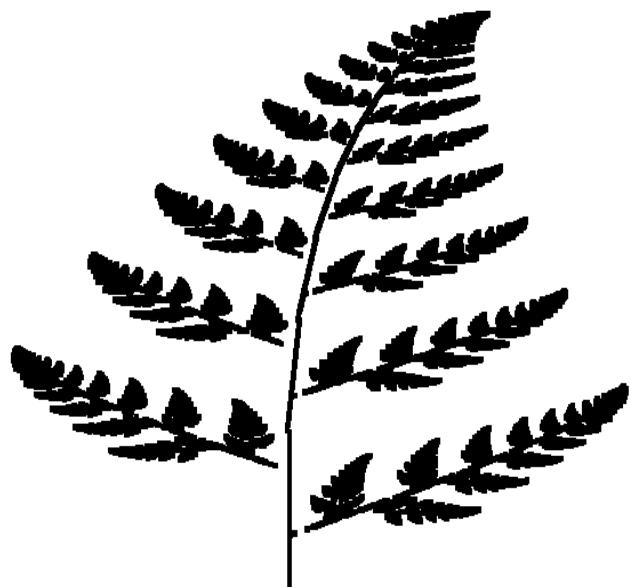


在量子材料与纳米器件研究中的应用





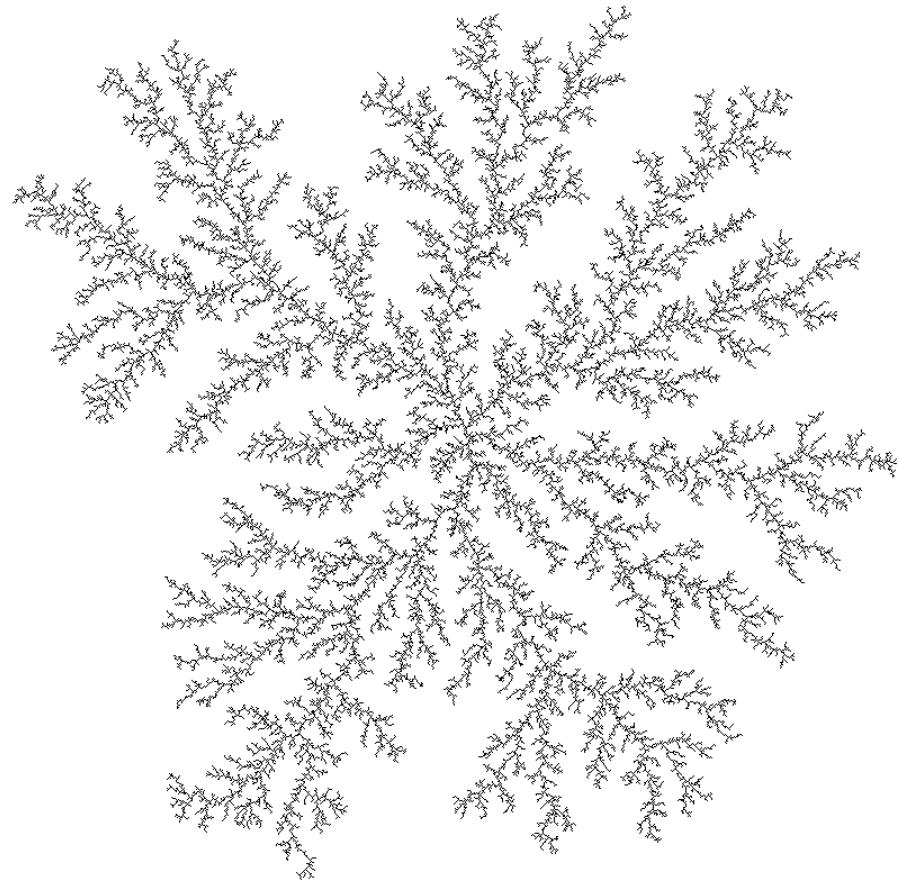
Exam-3-1-9.py



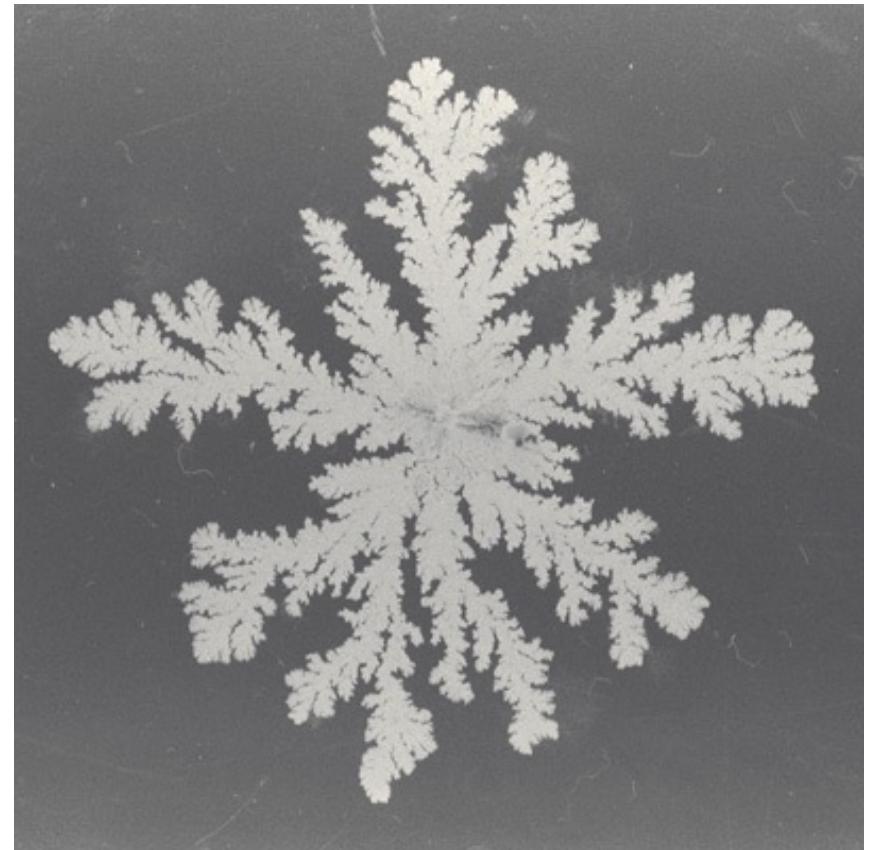
Exam-3-1-10.py



模拟结果



实验结果



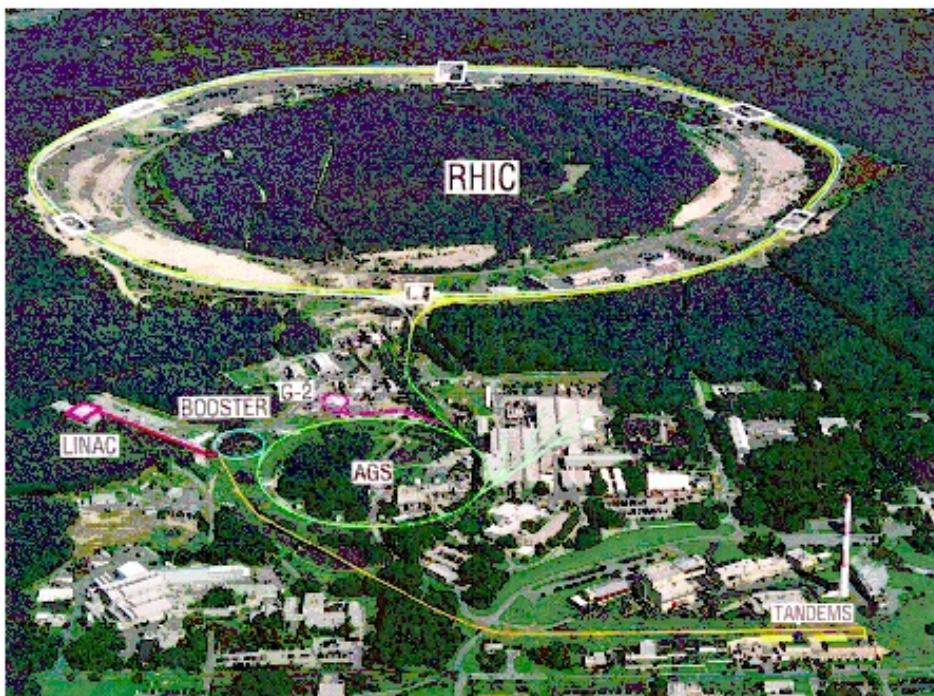
<http://astronomy.swin.edu.au/~pbourke/fractals/dla/>

<http://www.phys.chuo-u.ac.jp/labs/matusita/index.htm>

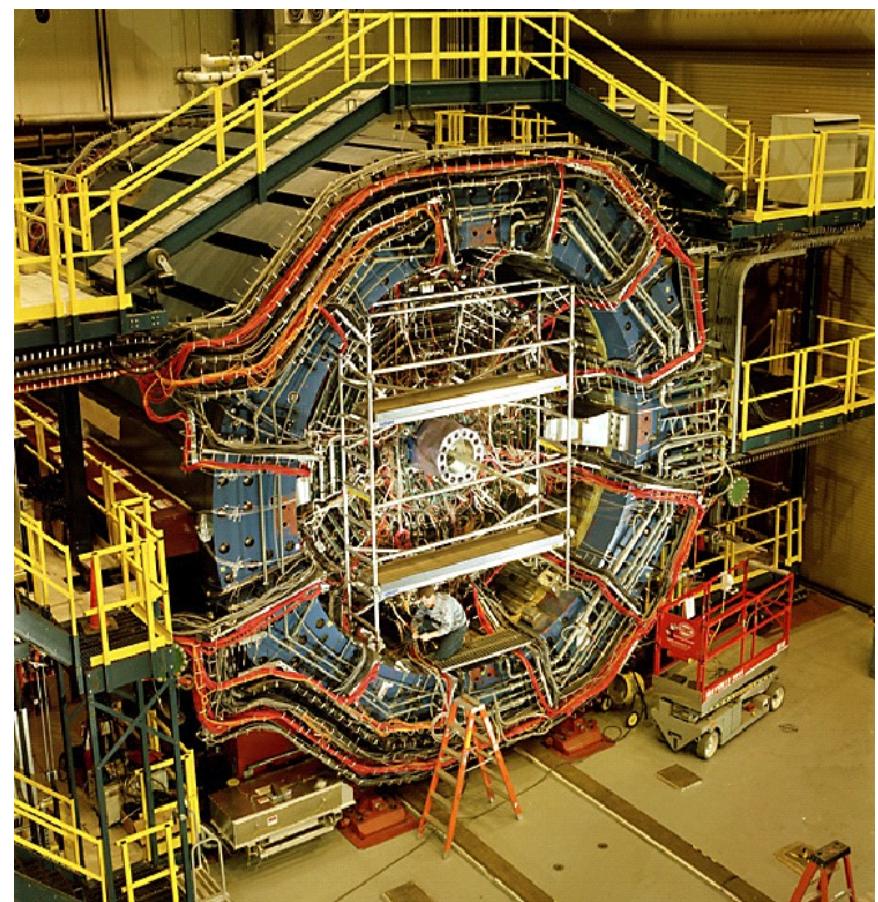
Monte-Carlo模拟在高能物理中的应用

高能粒子探测器：

相对论重离子对撞机RHIC



RHIC-STAR
实验探测器



计算物理是啥 ...



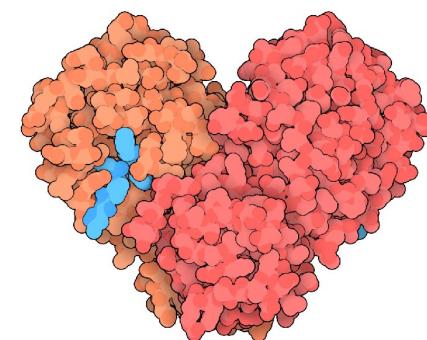
植物



动物



病毒



蛋白

新冠病毒2019-nCoV
蛋白酶

在生物物理系统研究中的应用

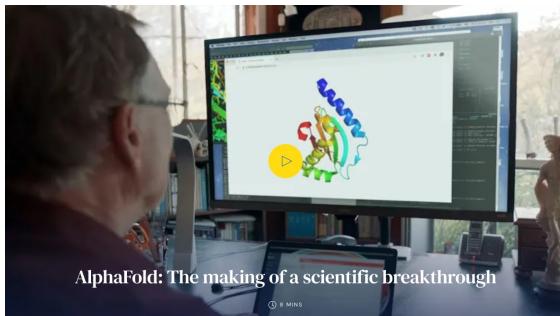


计算物理是啥 ...

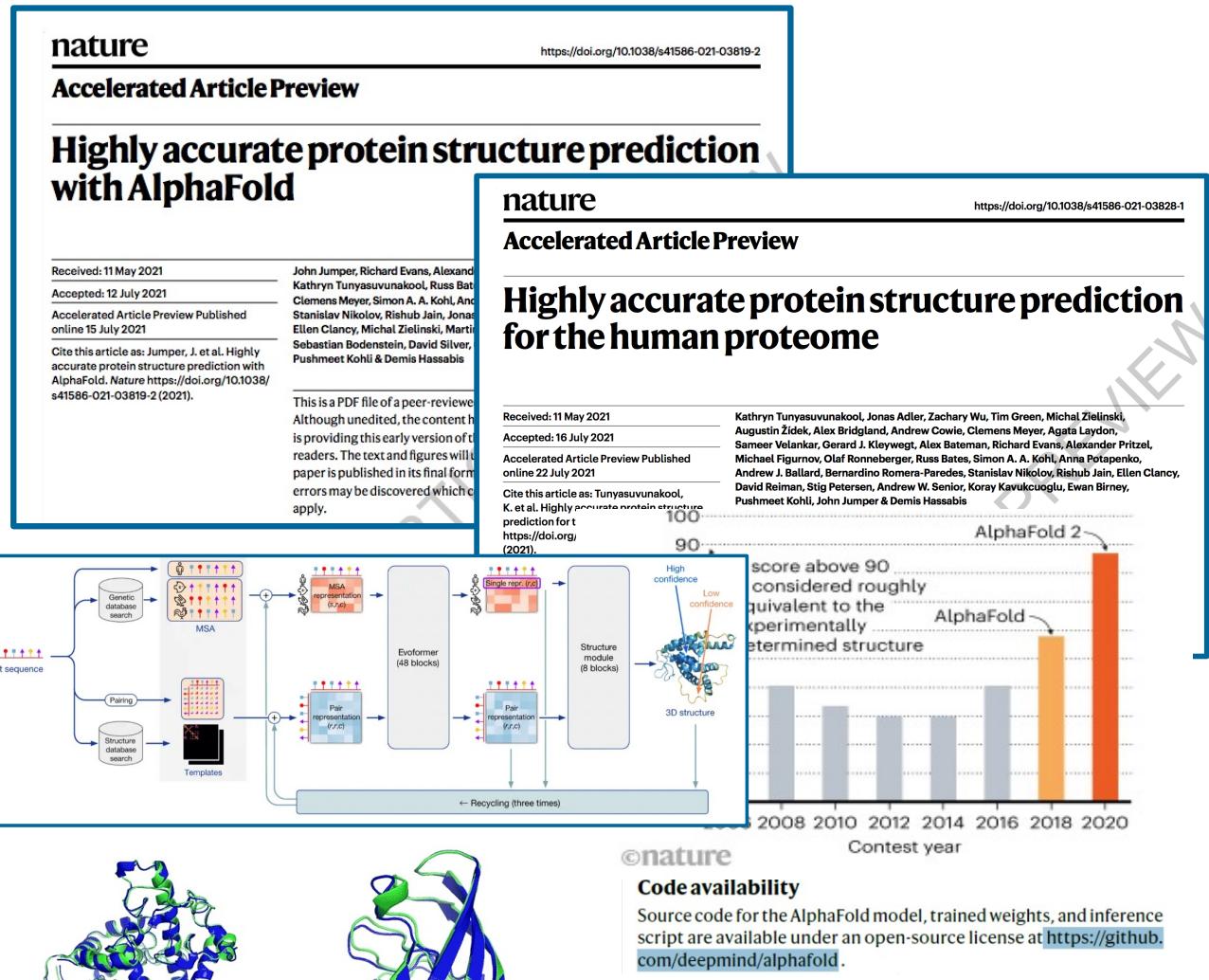
Google: DeepMind



Alpha-Go



Alpha-Fold





影响力：

为什么说 AlphaFold 2 足以改变全人类?

2021-07-20 02:21

为什么说 AlphaFold 2 足以改变全人类?



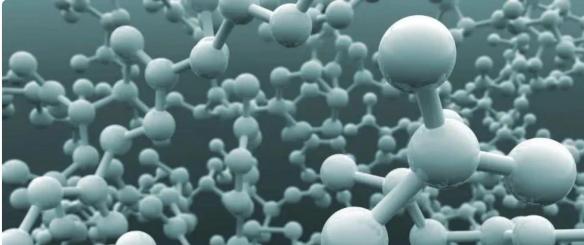
从AlphaFold到AlphaFold2，破解蛋白质结构终极难题

澎湃新闻 洪亮：已注销 2021-08-10 13:37

文/陈根

蛋白质对生命来说不可或缺，它们支持生物体的几乎所有功能。这些复杂的大分子氨基酸链构成，而蛋白质的功能很大程度上决定于它的3D结构。显然，了解蛋白的结构和形状对医药研究的进步至关重要。生物医学领域的众多挑战，包括开发疾病的创新疗法，都依赖于对蛋白质结构和功能的理解。

但是，由于蛋白质结构极其复杂，到现在为止，医学上也只研究出少数蛋白质。但是，这一情况随着用人工智能确定蛋白质的结构方向取得了突破性进展在，随着 AlphaFold2的开源，人工智能正被用来预测人体产生的几乎每一种蛋白的结构。



颠覆蛋白结构预测的AlphaFold 2，改变了科学史

sina 新浪看点 科技看点>正文

牛津大学教授Matthew Higgins正在与一个经典的令人头痛的问题作斗争：蛋白质到底是什么样子的？

自2005年以来，他的实验室就一直在关注于疟疾的相关问题。

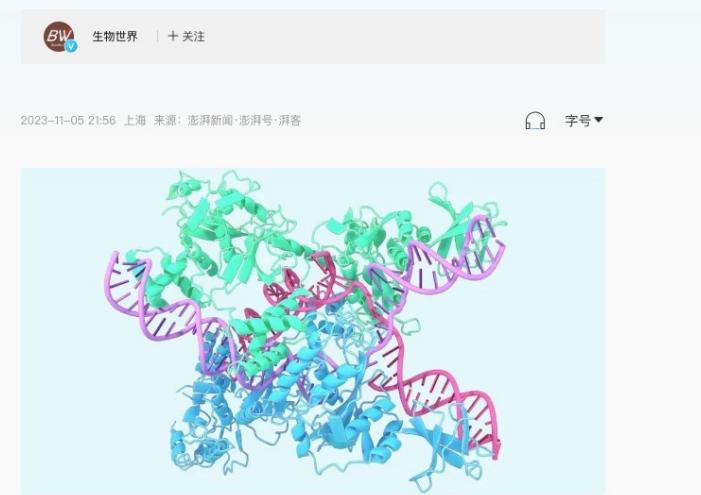
传统技术只能生成蛋白质结构的模糊轮廓。这让Higgins感到困惑。

不过，通过使用一种名为AlphaFold 2的新人工智能技术，他破解了导致疟疾的寄生虫所使用的一种关键蛋白质的结构。

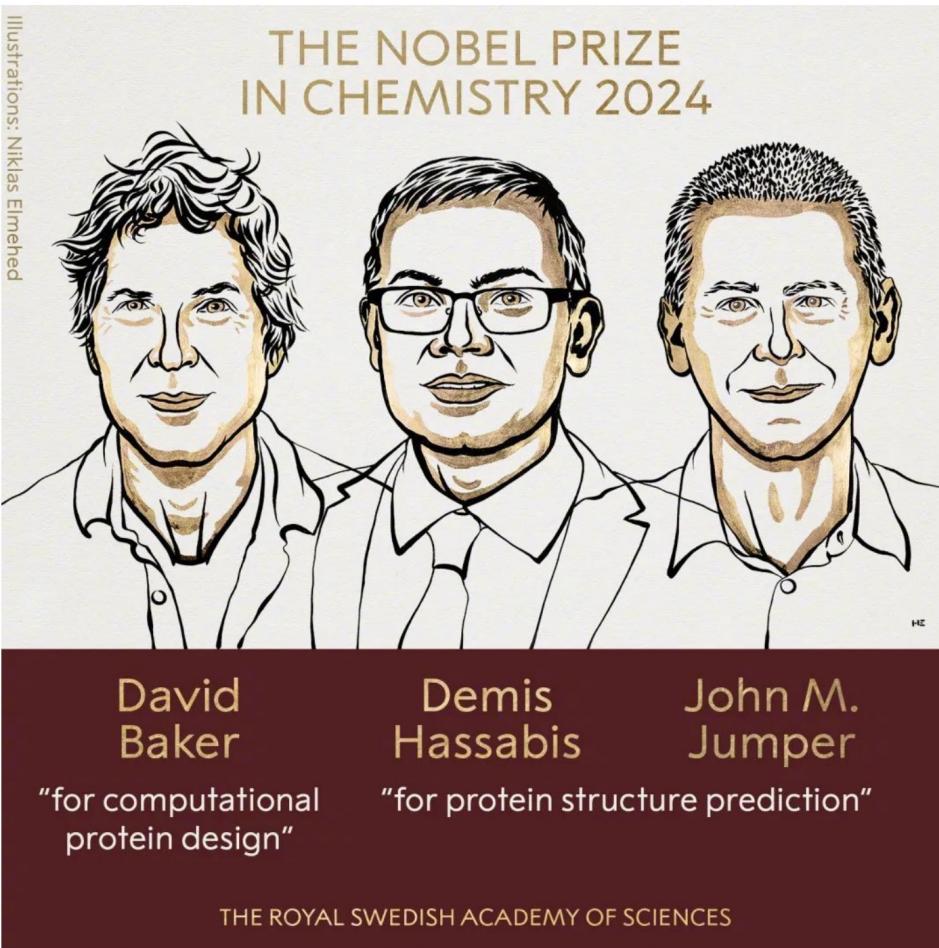
用于药物设计：

The screenshot shows the University of Toronto Faculty of Arts & Science website. The main navigation bar includes links for Home, About A&S, Future Students, Current Students, Graduate Students, Faculty & Staff, Research, Alumni, and Support A&S. Below the navigation is a photograph of a building facade with "Arts" and "science" signs. The main content area displays a news article titled "New study uses AlphaFold and AI to accelerate design of novel drug for liver cancer". The article is dated January 19, 2023, by Erin Warner - Acceleration Consortium. It features a paragraph of text, a photo of laboratory equipment, and a section on AI's role in drug discovery.

AlphaFold3来了，预测几乎所有分子结构，带来药物研发新范式



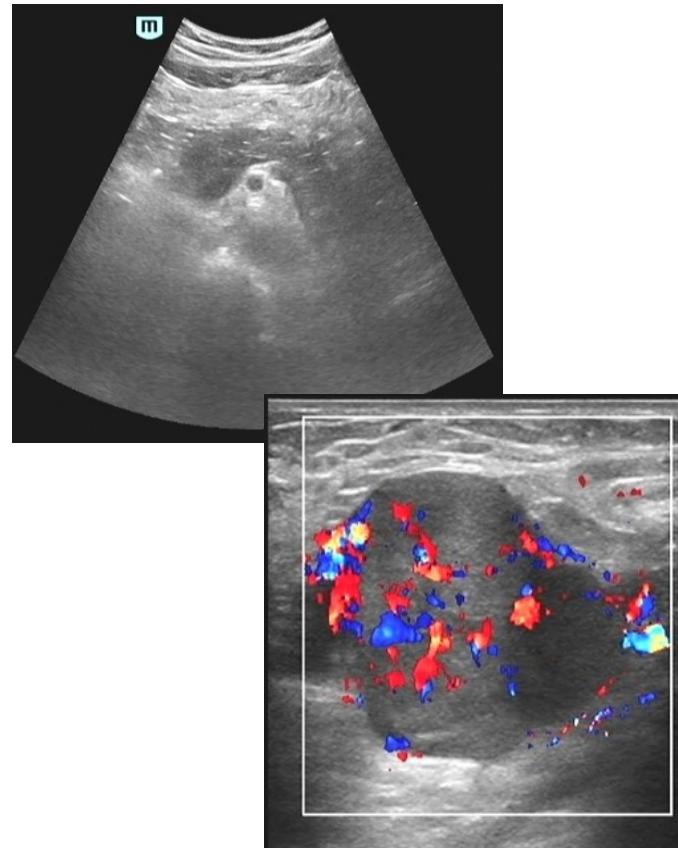
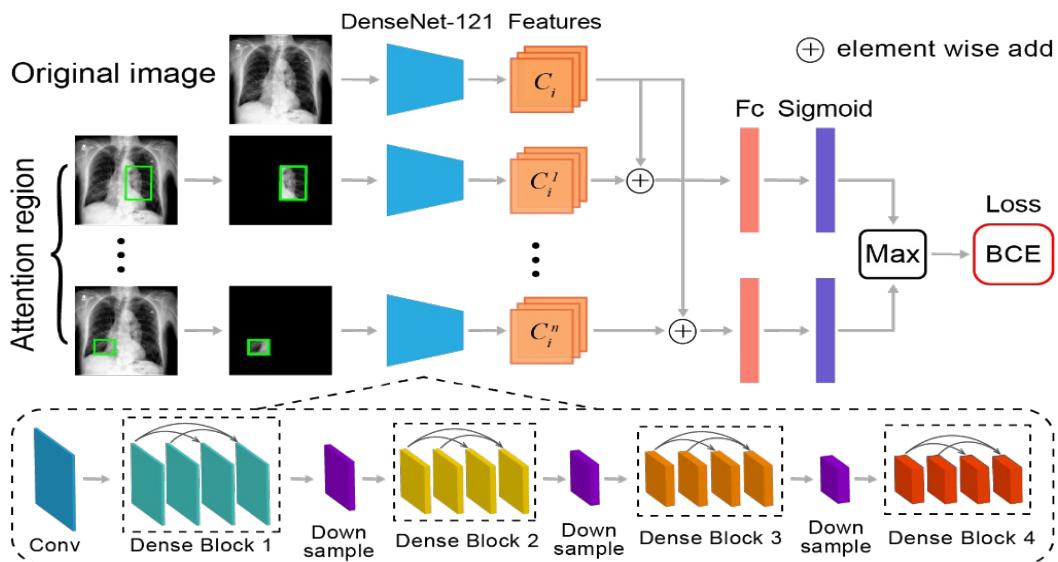
AlphaFold2不仅改变了计算生物物理等学科的研究范式，也带来了药物研发的新范式！



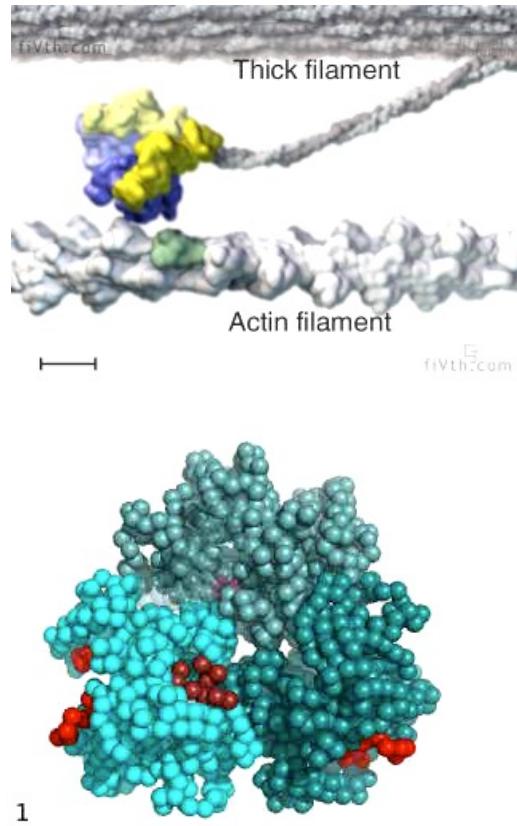
计算物理是啥 ...

医学影像的人工智能识别

- 胸部X光片的自动识别与分类
- 基于超声的乳腺癌自动分级

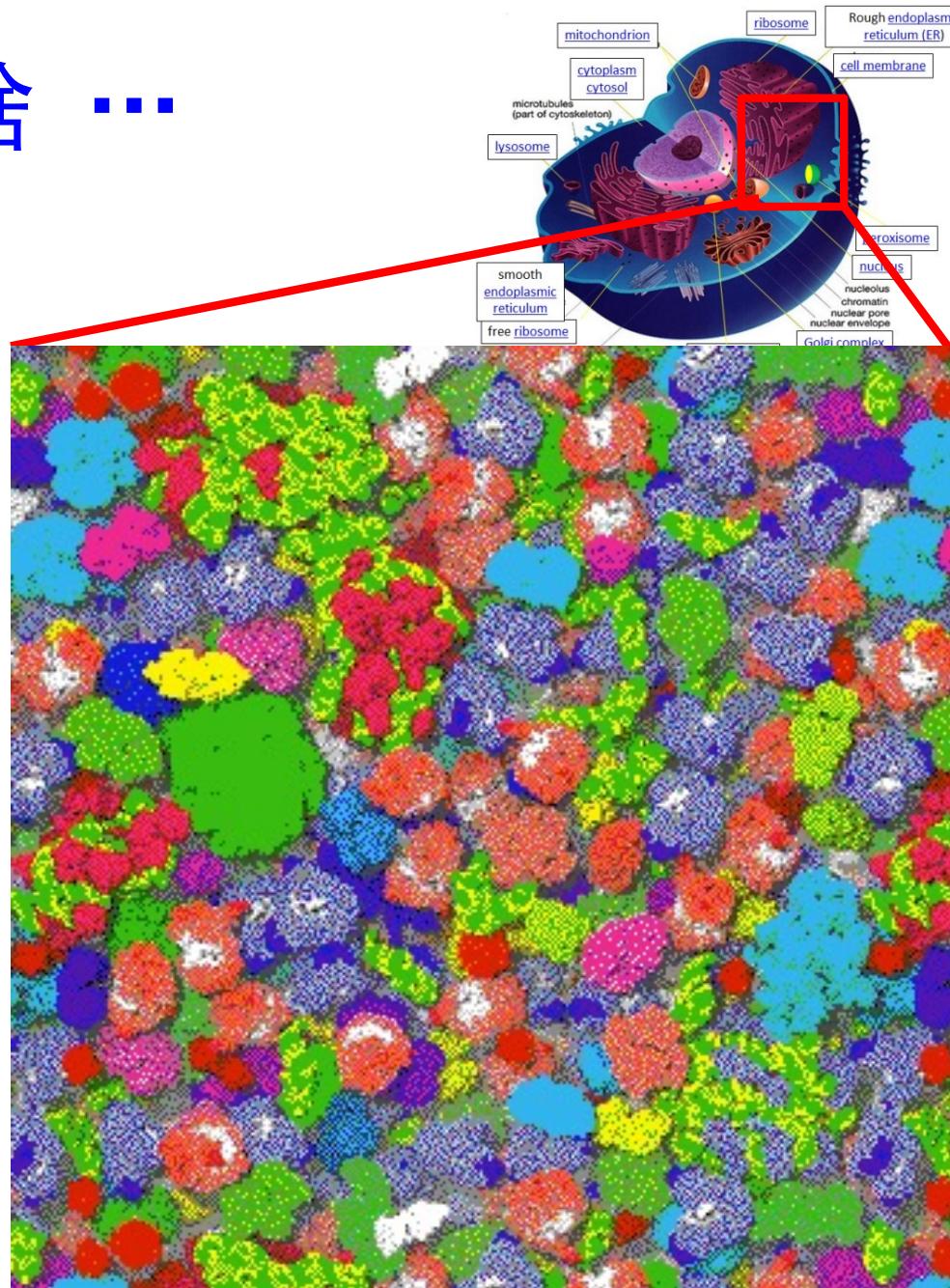


计算物理是啥 ...



drug exporter

Yao XQ et al. Nature Comm. 2010

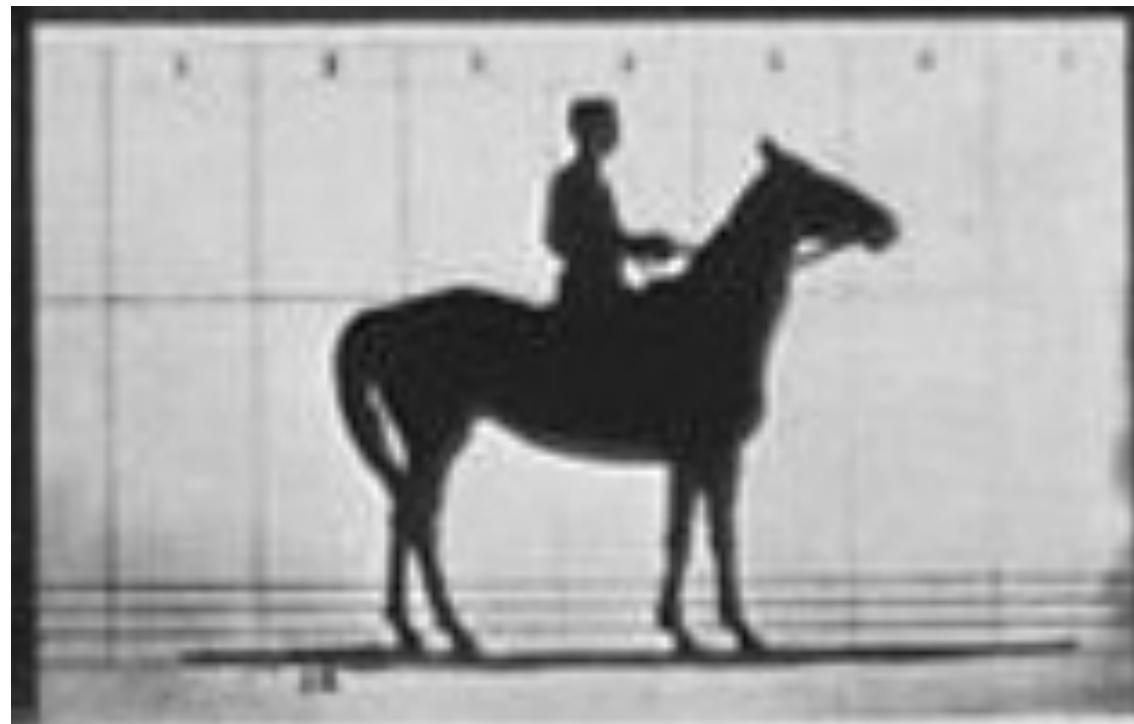


Mcguffee SR et al, Plos CB 2010



计算物理是啥 ...

Function from static structure?



计算物理是啥 ...

Function from dynamics?



articles

Dynamics of folded proteins

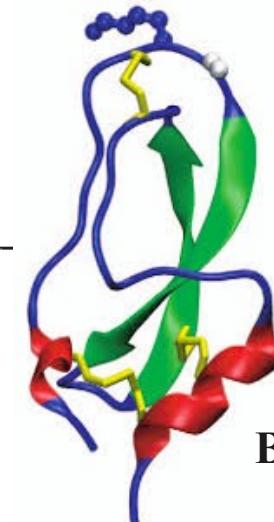
J. Andrew McCammon, Bruce R. Gelin & Martin Karplus

Department of Chemistry, Harvard University, Cambridge, Massachusetts 02138

The dynamics of a folded globular protein (bovine pancreatic trypsin inhibitor) have been studied by solving the equations of motion for the atoms with an empirical potential energy function. The results provide the magnitude, correlations and decay of fluctuations about the average structure. These suggest that the protein interior is fluid-like in that the local atom motions have a diffusional character.

RESULTS of X-ray crystallography provide a picture of a globular protein in its native conformation as a well defined, densely-packed structure. Other experimental data¹⁻¹⁰ and theoretical considerations¹¹⁻¹³ indicate that there is considerable local motion inside a protein at ordinary temperatures. Moreover, the structural data themselves show that significant

number of interactions which must be calculated and also permits larger steps in the trajectory calculation since the high frequency hydrogen vibrations have been eliminated. Integration of the equations of motion was performed by means of the Gear algorithm²² with time steps of 9.78×10^{-16} s. X-ray coordinates²¹ were used for the initial positions and the initial velocities were set equal to zero. After 100 equilibration steps, the stresses in the initial structure had partly relaxed and the system had an internal kinetic energy corresponding to a temperature of 140 K. At this point, all velocities were multiplied by a factor of 1.5 and 250 more equilibration steps were taken. The added kinetic energy (250.6 kcal mol⁻¹) partitioned itself between kinetic and potential terms during this interval, and an average kinetic temperature of 285 K was reached. The actual simulation consisted of 9,000 additional steps, corresponding to 8.8 ps. Some equilibration of the bond



Nanosecond Time Scale Folding Dynamics of a Pentapeptide in Water[†]

Douglas J. Tobias,^{‡,§} John E. Mertz,[¶] and Charles L. Brooks III^{*},[‡]

Department of Chemistry, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, Pennsylvania 15213, and Cray Research, Inc., 655-E Long Oak Drive, Eagan, Minnesota 55121

Received February 11, 1991; Revised Manuscript Received April 15, 1991

ABSTRACT: Reverse turns, four-residue sections of polypeptides where the chain changes direction by about 180°, are thought to be important protein folding initiation structures. However, the time scale and mechanism for their formation have yet to be determined experimentally. To develop a microscopic picture of the formation of protein folding initiation structures, we have carried out a pair of 2.2-ns molecular dynamics simulations of Tyr-Pro-Gly-Asp-Val, a peptide which is known to form a high population of reverse turns in water. In the first simulation, which was started with the peptide in an ideal type II reverse turn involving the first four residues, the turn unfolded after about 1.4 ns. After about 0.6 ns in the second simulation, which was started with the peptide in a fully extended conformation, the peptide folded into a type II turn which had a transient existence before unfolding. The peptide remained unfolded for another 0.9 ns before folding into a type I turn involving the last four residues. The type I turn lasted for about 0.2 ns before unfolding. Thus, these simulations showed that protein folding initiation structures can form and dissolve on the nanosecond time scale. Furthermore, the atomic-level detail of the simulations allowed us to identify some of the interactions which can stabilize the folded structures. The type II turns were stabilized by either a salt bridge between the terminal groups or a backbone-C-terminal group hydrogen bond, and the type I turns were stabilized by a hydrophobic interaction between the proline and valine side chains.



Pathways to a Protein Folding Intermediate Observed in a
1-Microsecond Simulation in Aqueous Solution

Yong Duan, et al.

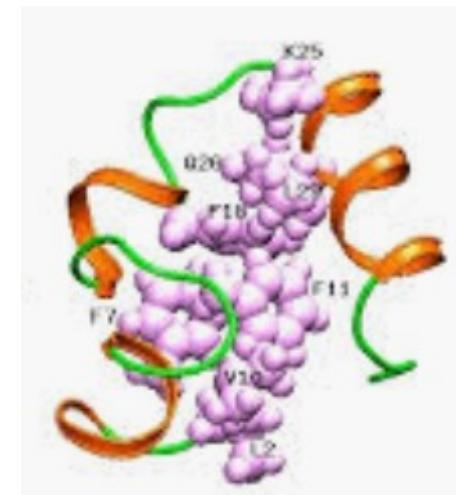
Science 282, 740 (1998);

DOI: 10.1126/science.282.5389.740

Pathways to a Protein Folding Intermediate Observed in a 1-Microsecond Simulation in Aqueous Solution

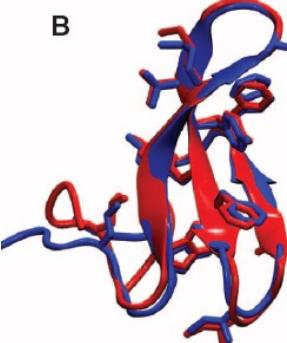
Yong Duan and Peter A. Kollman*

An implementation of classical molecular dynamics on parallel computers of increased efficiency has enabled a simulation of protein folding with explicit representation of water for 1 microsecond, about two orders of magnitude longer than the longest simulation of a protein in water reported to date. Starting with an unfolded state of villin headpiece subdomain, hydrophobic collapse and helix formation occur in an initial phase, followed by conformational readjustments. A marginally stable state, which has a lifetime of about 150 nanoseconds, a favorable solvation free energy, and shows significant resemblance to the native structure, is observed; two pathways to this state have been found.



HP36



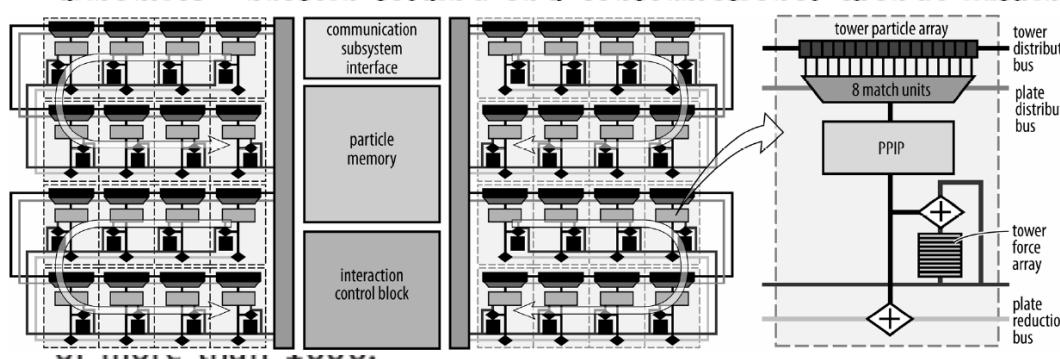


B

Atomic-Level Characterization of the Structural Dynamics of Proteins

David E. Shaw,^{1,2*} Paul Maragakis,^{1†} Kresten Lindorff-Larsen,^{1†} Stefano Piana,^{1†} Ron O. Dror,¹ Michael P. Eastwood,¹ Joseph A. Bank,¹ John M. Jumper,¹ John K. Salmon,¹ Yibing Shan,¹ Willy Wriggers¹

Molecular dynamics (MD) simulations are widely used to study protein motion at the atomic level of detail, but they have been limited to time scales shorter than those over which proteins undergo critical conformational changes. We examined two fundamental processes in protein folding and unfolding: the transition between the folded state and the unfolded state.

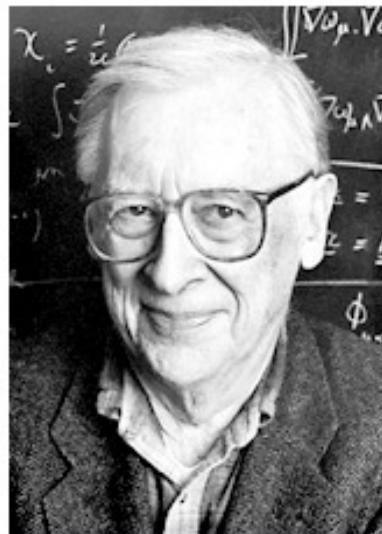


A supercomputer has been developed that can perform molecular dynamics simulations at the atomic level of detail over time scales of up to 1 millisecond. The machine is designed to be a general-purpose machine. Equilibrium and unfolding events that occur over time scales of milliseconds to seconds can be simulated. The simulations of the protein's constituent atoms are carried out in parallel. A **1-millisecond simulation** can be performed on the machine. The machine can distinguish between distinct conformational states of the protein. The rate of simulation is increased by a factor of more than 1000 compared to previous methods.





Walter Kohn



John A. Pople

1998年诺贝尔奖 (密度泛函+量化)

计算物理学
计算化学



© Nobel Media AB
Martin Karplus



Photo: Keilana via
Wikimedia Commons
Michael Levitt



Photo: Wikimedia
Commons
Arieh Warshel

2013年诺贝尔奖 (生物大分子多尺度模拟)

计算生物物理学



高性能计算机世界500强

HPC top 500 (2009)

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz , Cray/HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	224,162	1,759.0	2,331.0	6,950
2	Roadrunner - BladeCenter QS22/LS21 Cluster, PowerXCell 8i 3.2 Ghz / Opteron DC 1.8 GHz, Voltaire Infiniband , IBM DOE/NNSA/LANL United States	122,400	1,042.0	1,375.8	2,345
3	Kraken XT5 - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz , Cray/HPE National Institute for Computational Sciences/University of Tennessee United States	98,928	831.7	1,028.9	3,090
4	JUGENE - Blue Gene/P Solution , IBM Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	294,912	825.5	1,002.7	2,268
5	Tianhe-1 - NUDT TH-1 Cluster, Xeon E5540/E5450, ATI Radeon HD 4870 2, Infiniband , NUDT National SuperComputer Center in Tianjin/NUDT China	71,680	563.1	1,206.2	
6	Pleiades - SGI Altix ICE 8200EX, Xeon QC 3.0 GHz/Nehalem EP 2.93 Ghz , HPE NASA/Ames Research Center/NAS United States	56,320	544.3	673.3	2,348



HPC top 500 (2010)

Rank	System		Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Tianhe-1A - NUDT TH MPP, X5670 2.93Ghz 6C, NVIDIA GPU, FT-1000 8C , NUDT National Supercomputing Center in Tianjin China		186,368	2,566.0	4,701.0	4,040
2	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz , Cray/HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States		224,162	1,759.0	2,331.0	6,950
3	Nebulae - Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, NVidia Tesla C2050 GPU , Sugon National Supercomputing Centre in Shenzhen (NSCS) China		120,640	1,271.0	2,984.3	2,580
4	TSUBAME 2.0 - HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows , NEC/HPE GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan		73,278	1,192.0	2,287.6	1,399
5	Hopper - Cray XE6 12-core 2.1 GHz , Cray/HPE DOE/SC/LBNL/NERSC United States		153,408	1,054.0	1,288.6	2,910
6	Tera-100 - Bull bullx super-node S6010/S6030 , Atos Commissariat a l'Energie Atomique (CEA) France		138,368	1,050.0	1,254.5	4,590



HPC top 500 (2011)

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect , Fujitsu RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
2	Tianhe-1A - NUDT YH MPP, Xeon X5670 6C 2.93 GHz, NVIDIA 2050 , NUDT National Supercomputing Center in Tianjin China	186,368	2,566.0	4,701.0	4,040
3	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron 6-core 2.6 GHz , Cray/HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	224,162	1,759.0	2,331.0	6,950
4	Nebulae - Dawning TC3600 Blade System, Xeon X5650 6C 2.66GHz, Infiniband QDR, NVIDIA 2050 , Sugon National Supercomputing Centre in Shenzhen (NSCS) China	120,640	1,271.0	2,984.3	2,580
5	TSUBAME 2.0 - HP ProLiant SL390s G7 Xeon 6C X5670, Nvidia GPU, Linux/Windows , NEC/HPE GSIC Center, Tokyo Institute of Technology Japan	73,278	1,192.0	2,287.6	1,399
6	Cielo - Cray XE6, Opteron 6136 8C 2.40GHz, Custom , Cray/HPE DOE/NNSA/LANL/SNL United States	142,272	1,110.0	1,365.8	3,980



HPC top 500 (2012)

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x , Cray/HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
2	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom , IBM DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,864	16,324.8	20,132.7	7,890
3	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect , Fujitsu RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
4	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom , IBM DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	786,432	8,162.4	10,066.3	3,945
5	JUQUEEN - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect , IBM Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	393,216	4,141.2	5,033.2	1,970
6	SuperMUC - iDataPlex DX360M4, Xeon E5-2680 8C 2.70GHz, Infiniband FDR , IBM/Lenovo Leibniz Rechenzentrum Germany	147,456	2,897.0	3,185.1	3,423



HPC top 500 (2013)

Rank	System		Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P , NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China		3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
2	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x , Cray/HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States		560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
3	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom , IBM DOE/NNSA/LLNL United States		1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
4	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect , Fujitsu RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan		705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
5	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom , IBM DOE/SC/Argonne National Laboratory United States		786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
6	Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.600GHz, Aries interconnect , NVIDIA K20x , Cray/HPE Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland		115,984	6,271.0	7,788.9	1,754



HPC top 500 (2014)

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P , NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
2	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x , Cray/HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
3	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom , IBM DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
4	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect , Fujitsu RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
5	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom , IBM DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
6	Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.600GHz, Aries interconnect , NVIDIA K20x , Cray/HPE	115,984	6,271.0	7,788.9	1,754



HPC top 500 (2015)

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P , NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
2	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x , Cray/HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
3	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom , IBM DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
4	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect , Fujitsu RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
5	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom , IBM DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
6	Trinity - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect , Cray/HPE DOE/NNSA/LANL/SNL United States	301,056	8,100.9	11,078.9	4,233



HPC top 500 (2016)

Rank	System		Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway , NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China		10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
2	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P , NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China		3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
3	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x , Cray/HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States		560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
4	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom , IBM DOE/NNSA/LLNL United States		1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
5	Cori - Cray XC40, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Aries interconnect , Cray/HPE DOE/SC/LBNL/NERSC United States		622,336	14,014.7	27,880.7	3,939
6	Oakforest-PACS - PRIMERGY CX1640 M1, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Intel Omni-Path , Fujitsu Joint Center for Advanced High Performance Computing		556,104	13,554.6	24,913.5	2,719



HPC top 500 (2017)

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway , NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
2	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P , NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
3	Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect , NVIDIA Tesla P100 , Cray/HPE Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	361,760	19,590.0	25,326.3	2,272
4	Gyoukou - ZettaScaler-2.2 HPC system, Xeon D-1571 16C 1.3GHz, Infiniband EDR, PEZY-SC2 700Mhz , ExaScaler Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology Japan	19,860,000	19,135.8	28,192.0	1,350
5	Titan - Cray XK7, Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x , Cray/HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
6	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom , IBM DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890



HPC top 500 (2018)

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband , IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,397,824	143,500.0	200,794.9	9,783
2	Sierra - IBM Power System S922LC, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband , IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94,640.0	125,712.0	7,438
3	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway , NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
4	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, TH Express-2, Matrix-2000 , NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China	4,981,760	61,444.5	100,678.7	18,482
5	Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect , NVIDIA Tesla P100 , Cray/HPE Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	387,872	21,230.0	27,154.3	2,384
6	Trinity - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz, Aries interconnect , Cray/HPE DOE/NNSA/LANL/SNL United States	979,072	20,158.7	41,461.2	7,578



HPC top 500 (2019)

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148,600.0	200,794.9	10,096
2	Sierra - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94,640.0	125,712.0	7,438
3	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway, NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
4	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, TH Express-2, Matrix-2000, NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China	4,981,760	61,444.5	100,678.7	18,482
5	Frontera - Dell C6420, Xeon Platinum 8280 28C 2.7GHz, Mellanox InfiniBand HDR, DELL EMC Texas Advanced Computing Center/Univ. of Texas United States	448,448	23,516.4	38,745.9	
6	Piz Daint - Cray XC50, Xeon E5-2690v3 12C 2.6GHz, Aries interconnect , NVIDIA Tesla P100, Cray/HPE Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	387,872	21,230.0	27,154.3	2,384

HPC top 500 (2020)

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Supercomputer Fugaku - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442,010.0	537,212.0	29,899
2	Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148,600.0	200,794.9	10,096
3	Sierra - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94,640.0	125,712.0	7,438
4	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway, NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
5	Selene - NVIDIA DGX A100, AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR Infiniband, Nvidia NVIDIA Corporation United States	555,520	63,460.0	79,215.0	2,646
6	Tianhe-2A - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692v2 12C 2.2GHz, TH Express-2, Matrix-2000, NUDT National Super Computer Center in Guangzhou China	4,981,760	61,444.5	100,678.7	18,482

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Supercomputer Fugaku - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442,010.0	537,212.0	29,899
2	Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148,600.0	200,794.9	10,096
3	Sierra - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94,640.0	125,712.0	7,438
4	Sunway TaihuLight - Sunway MPP, Sunway SW26010 260C 1.45GHz, Sunway, NRCPC National Supercomputing Center in Wuxi China	10,649,600	93,014.6	125,435.9	15,371
5	Perlmutter - HPE Cray EX235n, AMD EPYC 7763 64C 2.45GHz, NVIDIA A100 SXM4 40 GB, Slingshot-10, HPE DOE/SC/LBNL/NERSC United States	761,856	70,870.0	93,750.0	2,589
6	Selene - NVIDIA DGX A100, AMD EPYC 7742 64C 2.25GHz, NVIDIA A100, Mellanox HDR Infiniband, Nvidia NVIDIA Corporation United States	555,520	63,460.0	79,215.0	2,646

盛宴还在继续，中国正在研制E级超级计算机（百亿亿次）…

计算物理课程介绍

课程特点：

实践性强、多学科交叉、物理问题为中心

学情分析：

熟悉基本物理理论、渴望学以致用；缺乏用物理知识解决实际问题的训练；需要提升实践能力

课程目标：

训练学生利用计算机解决物理问题的能力，让计算机成为学习与科研的得力助手

教学理念：

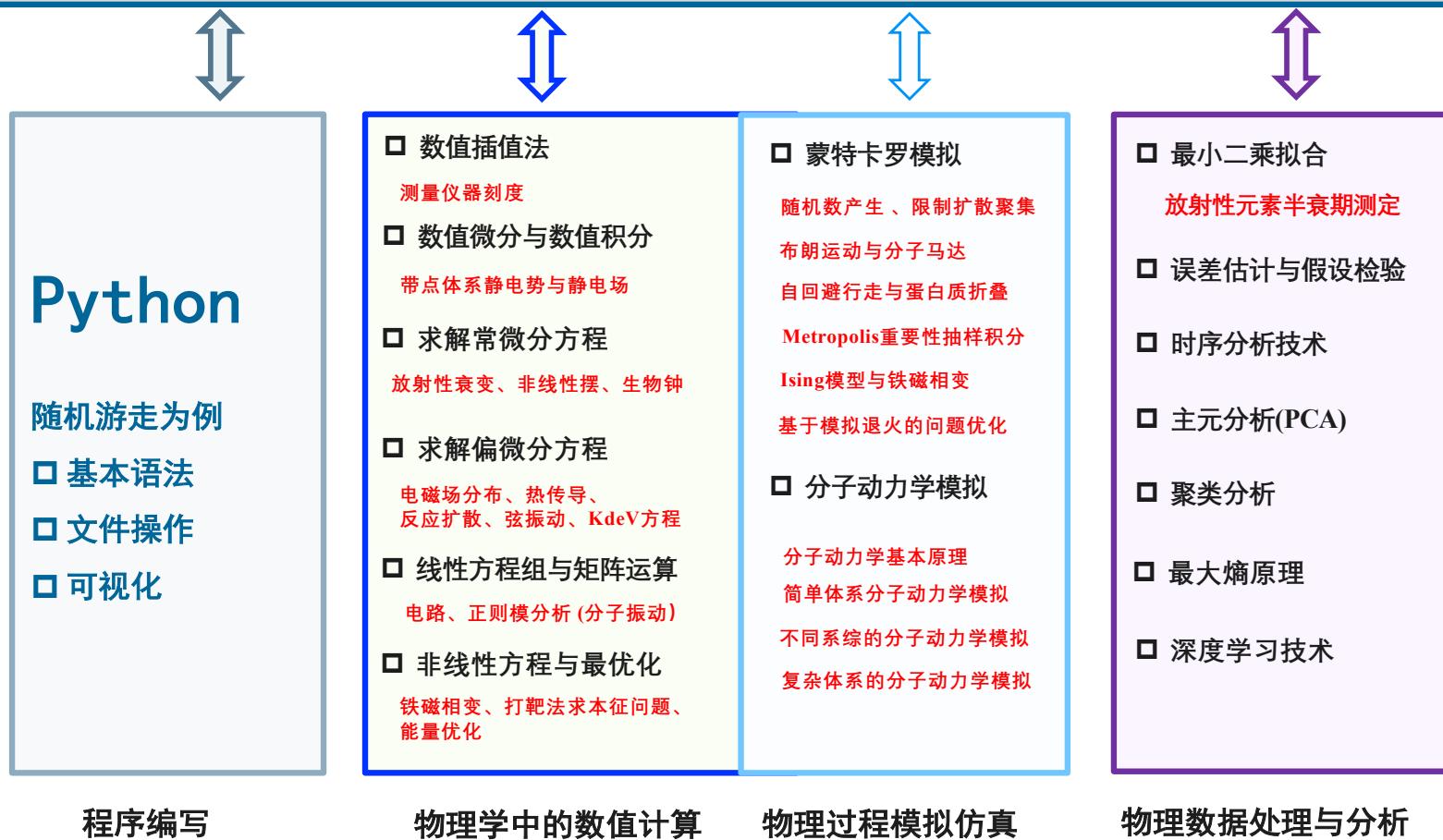
突出实践能力培养； 学科融合

计算物理课程介绍

计算物理学什么？

教学模块

问题驱动：实践训练课题”贯穿教学过程（跨学科、前沿性、趣味性、计算为主）



教学计划：

1. 基于python语言的科学计算与可视化

2. 基本的数值计算及在相关物理问题中的应用

- ❖ 插值与微分，数值积分（探测器刻度，生物大分子比热计算，简单分布电荷的电势、电场计算）
- ❖ 非线性方程求根（中心力场散射问题，磁化强度温度相关性平均场求解）
- ❖ 求解线性方程组，矩阵对角化，本征值问题（物理数据的最小二乘拟合，分子振动谱，主元分析）
- ❖ 求解常微分方程（RLC电路，阻尼运动，混沌与有序，生物钟）
- ❖ 求解偏微分方程-1（热传导与扩散问题，波动方程，薄膜振动问题，KdV方程与孤子）
- ❖ 求解偏微分方程-2（分离变量，本征值问题，打靶法求简单系统本征值与本征函数）

3. 计算机模拟物理

- ❖ Monte-Carlo模拟-1（随机抽样与Monte-Carlo 积分，DLA与分形，布朗运动，沙堆模型与自组织临界）
- ❖ Monte-Carlo模拟-2（随机游走问题与Metropolis重要性采样，二维Ising模型，蛋白质折叠）
- ❖ 分子动力学模拟（简单分子体系相变，模拟退火与结构优化）

4. 数据统计与分析

- ❖ 物理数据分析处理（频谱分析，马尔科夫态模型，聚类算法）
- ❖ 机器学习与物理模型参数提取（神经网络模型，最大熵原理，最大似然估计）

5. 高性能计算简介

- ❖ 高性能计算机使用入门与并行计算。



计算物理课程咋学 ...

基础要求：

大学物理(力，热，光，电，近代物理学)

计算机高级语言(最好学过一门计算机语言，了解计算机操作)

学习方法：

动手操作，解决实际物理问题，参与科学研究。

今年开始，尝试：1) 线上线下混合教学；2) 问题驱动教学

课程目的：

能够运用计算机解决一般物理问题,使计算机真正成为研究与学习中的得力助手，培养动手解决实际科学与技术问题的能力。

计算物理课程成绩 ...

考试方式: 笔试

总成绩 = 平时成绩 (60%) + 考试成绩 (40%)

平时成绩 = 出勤情况 + 作业情况 + 课程论文 + 线上课程

考试成绩 = 笔试成绩

<https://www.icourse163.org/spoc/course/NJU-1467285164>



课程实践论文（占总成绩20%）

要求：

- ✓ 运用计算物理知识，解决实际问题，形成论文，并用PPT展示；
- ✓ 题目有趣、PPT生动、能体现计算物理内容、有一定工作量；
- ✓ 小组成员不多于4人、组长负责制。

评分：

- ✓ 1) 自愿报名PPT展示（同学打分）；
- ✓ 2) 小论文、PPT、相关程序及文档。

其它事项：

- ✓ 原创性、不得抄袭已有工作；
- ✓ 推荐部分优秀课题发表



课程论文备选主题：

传染病模型、光学模拟、声学模拟、放射性衰变模拟、反应堆链式反应、三体问题、复摆振动、数学动力系统、混沌、分形图、陀螺进动、种群进化、进水防水中的浴缸温度、扩散反应和斑图形成模拟、扩散限制聚集（DLA）模拟（雪花、灰尘聚集等）、复杂网络模拟、分子振动的正则模分析和振动谱计算、双原子分子在不同相互作用势（如单势阱LJ势，双势阱LJ势等）下可能的相变和结构研究，模拟热传导动态展示、波的传播、原子轨道计算和展示、分子结构优化、分子模拟、高聚物/蛋白质运动模拟、（群鸟、昆虫、羊群、鱼群等）的集体运动效应（可以理论模拟，可以摄像后分析轨迹）、聚类分析、细胞群生长、突发事件下的拥挤人群模拟、电磁场演示、物理系统动画展示、图像识别、布朗运动、具有某种电荷分布体系的电势电场计算、蛋白质分子表面积计算、水分子体系的分子动力学模拟、生物网络模拟、各种算法改进、大学物理实验模拟或数据处理分析、粒子探测器模拟、或任何其它题目。

课程实践论文题目 (2018)

目录

1 基于社会力模型的拥挤人群模拟与改进研究——许煜麟-伍柏西	4	29 拥挤人群问题——黎雨欣-李易文	471
2 对弗兰克-赫兹实验的计算机模拟——顾杰-张煦劼-余熊毅	21	30 背外侧额叶神经网络对空间刺激记忆的模拟——孟令羽-邓钦文-吴湘锦	487
3 暗物质晕中的星系演化模拟——马越-梁泓-沈瑞哲	28	31 莫尔现象的计算机模拟——刘志红	498
4 CNN网络与GAN网络的pytorch实现——司文达	38	32 群鸟模拟——周文翔-陶韬-尹成昊	506
5 基于蒙特卡罗方法的逾渗模型相变计算——臧胤兴-曹开力	47	33 基于boid是模型的鸟群模拟——代言-樊咏博-陈春辉	513
6 鸟群模拟——粒子群算法的应用——马翰章-戴佳平-欧阳鸿宇	62	34 弗兰克-赫兹实验的蒙特卡洛模拟与现象分析——潘书宁-刘知锐-洪泓	530
7 利用机器学习的加速蒙特卡罗——罗遥-董家豪-周卫涛	93	35 氢原子能级计算与概率密度图——刘志平-沈昌慧	537
8 波色爱因斯坦凝聚的计算机模拟——廖鸿钰-刘腾	113	36 三体问题的模拟——沈希-侯本硕-李凜然	554
9 三体问题——刘睿哲-李桓国-景永鑫	123	37 研究声波的传播——方成-范锐	562
10 二氧化钛薄膜表面腐蚀——徐锦涛-彭璞-甘祺康	139	38 社会力模型下的拥挤人群紧急疏散模拟——阮浩鑫-田昊-王丹青	585
11 Vicsek-model和Boids-model鸟群模拟的简单研究——石煜楷-张弛	152	39 利用python研究陀螺的进动问题——鲁清-吴兆曦-毛祥琳	654
12 基于社会力模型的拥挤人群问题研究——宋蔚枝-王凯-赵一心	164	40 KdV-NLS-Sine-Gordon三大典型孤波方程解的模拟——杨文杰-许峰-袁泽	659
13 群鸟模拟——王康康-闫睿戈-张海浪	180	41 二维多体弹性碰撞模拟——姚静宇	666
14 公式识别——王雪鹏-沙其雨-李岩	212	42 二维伊辛模型的蒙特卡洛模拟——张帆-郭建豪	674
15 拥挤人群疏散场景模拟——张峻豪-陶醉-张楚	218		
16 捕食关系双种群的协同进化算法模拟——杨钰廷-张珂	231		
17 肿瘤生长的元胞自动机模拟——姚明朕-王洁融-夏天	267		
18 种群进化的计算机模拟——周杰-周涵婧-郑沛	278		
19 种族隔离——谢源-张蒲逸-熊俊年	290		
20 K-means-聚类分析的研究——蔡玉立-陈曦	295		
21 波色爱因斯坦凝聚理论模拟研究——杨有行-张笑颖	304		
22 对几种捕食-食饵模型的分析——刘雨鑫-周安保	315		
23 RLC电路模拟——曹啸宇-蔡箫-包彧	324		
24 陀螺的进动分析——程渊祺-田齐-韦巍	335		
25 分形与自相似性——马小林-刘铁群-尹博	352		
26 模式识别实践——管星悦-赵诣-徐李达	368		
27 原子轨道和能量的数值计算与展示——黄松涛-肖尹子	379		
28 机器学习与混沌动力学预测——管晨光-肖荣-陈明远	416		

课程实践论文题目 (2019)

目录

1 理想气体的分子动力学模拟——朱洪	1	21 关于某非线性摆的动力学行为的探究——周博然-刘含洋	250
2 基于遗传算法的进化博弈模拟——龙雨	7	22 基于 PSO 算法的群鸟模拟——王识清-张博乔	262
3 二维波动方程、输运方程动态演示——李子爽-曾钰伦	16	23 借助径向速度优化求解物体运动参数的方法——孙新宇-毕千惠	271
4 传染病传播模型及其模拟——刘天宇-杨镇	26	24 旅行商问题(TSP)的遗传算法实现和优化——傅代恒-卞响	288
5 Mutually Unbiased Bases 问题的数值计算方法改进与分析——蔡康乐	41	25 基于全连接神经网络的手写数字识别——李昊-卢义-周煜恒	294
6 半无限介质空间对平面孤立点电荷电磁场的改变——童磊	50	26 热传导动态展示——刘开-崔展豪	311
7 蒙特卡洛方法的简单数字模拟——H 原子电子云模拟——郭栩烜	53	27. 三体问题模型的构建与计算——郑宇威-刘哲-苏浩	318
8 Julia 集和 Mandelbrot 集——胡沁雯-高艺	60	28 三体问题——李卓林	324
9 三体问题的研究——钱睿昕-胡义轩-周谷全	69	29 三体运动模拟——胡一鸣-丁可	339
10 从磁畴理论计算模拟磁滞回线形成——徐时帆-刘黎航-田盛亚	92	30 数字全息算法模拟、优化及实验验证——范文琳-白峻林	363
11 对称刚体运动的数值模拟及动画演示——邵逸轩-李晨龙	107	31 双摆运动理论和计算方法——李广隆-李家聰	380
12 分形图的 Python 实现——王俊谦-王洲洋-薛宇航	118	32 限制性三体问题的解与三体问题的混沌现象——邬得涛-储时哉-杨利宁	391
13 复摆运动的计算机模拟——刘泽川-邱天宇	141	33 利用神经网络求解常微分方程——唐竞-傅涵婧-范文琳	418
14 关于数字全息及加密技术的研究——黄宇阳-谢宇烽	156	34 氢原子薛定谔方程计算和几种简单电子云图绘制——王焱 -李炳宏	430
15 三体轨迹数值计算——傅加豪	173	35 物平面信息在相位和振幅中的分布——邢以宁-侯智勇	438
16 三体模型及最简单的三体模型 (地球-太阳-月亮) 的程序实现——张越	180	36 用鸟群模拟求方程最小值与TSP问题——马翰章	446
17 三体问题的 Python 模拟——杨锦程-孙嘉程	193	37 利用元胞自动机及蚁群算法研究密集人群的疏散问题——郑宇威-苏浩-刘哲	453
18 三体问题的模拟——梁智新-林桐羽	203	38 生物种群繁衍与进化过程模拟——孔令行-闵成-张强	456
19 三体问题的研究——钱睿昕-胡义轩-周谷全	215	39 自组织动力学和集群行为的理论及其计算方法——肖林涛-贾秋涵	461
20 人群拥挤模型实验——李洁-杨言	238		

课程实践论文题目（2020-1）

目录

利用 python 处理“星际子弹”在气体云中运动的问题	1	Phase Transitions in k-SAT Problems	231
蚁群算法在二维蛋白质折叠中的应用	19	背包问题的算法改进	235
疫情散播的简单模拟及模型建立	27	基于扩散限制聚集 (DLA) 的蒙特卡洛模拟与改进	253
三体问题的简单模拟	32	库伦势中粒子的自发凝聚行为的理论及模拟	277
电偶极子在任意电磁场中的电场分布模拟	41	遗传算法计算平面光源分布最优解	297
双原子分子的 NVT 三维空间分子动力学模拟	55	研究新型冠状病毒肺炎疫情的传播模型以及无症状感染者对流行趋势的影响	301
Python 分离变数法求解齐次方程	69	优化的遗传算法和免疫算法--以旅行商问题为例	309
传染病模型（以 Cov-19 新冠肺炎为例）	78	递归问题及其处理方式	325
关于室内 WiFi 信号的强度分布模拟	83	传染病模型	328
基于 YOLOv3 的口罩佩戴检测	87	病毒在人群中的传播模拟	332
分形图的分析与绘制	101	针对新型冠状病毒的传染病模型讨论	334
三体问题的数值模拟	111	基于受限玻尔兹曼机的偏好判断与推荐程序	349
用遗传算法寻找稳定三体运动	120	传染病传播问题的元胞自动机模拟	363
基于 PSO 算法确定运载火箭直接入轨的最佳路径	138	基于 Eden 模型模拟雪花生成	378
对放射性气体扩散的研究以及对此危害的避免	149	分形与 DLA 模型	381
液体的粒子模拟	158	传染病的蒙特卡洛模拟与模型	387
布朗运动的模拟	177	双忆阻五阶混沌电路以及几类混沌系统的数值模拟	401
泵浦激光器热透镜效应计算及补偿方法	180	K-Means 聚类分析方法改进	440
蛋白质 HP 模型的蒙特卡洛算法改进	215	对光学实验中衍射和干涉现象的初步计算机模拟	468
关于新型冠状病毒肺炎的 SEIR 模型拟合	227	基于元胞自动机的细胞生长模拟	477
		关于种群发展的几种模拟	510
		新设计的一种考虑延迟性和床位数的传染病模型	515

课程实践论文题目（2020-2）

关于三体运动的研究	523	三体问题的数值模拟求解	813
突发事件下人群疏散情况的计算机模拟与研究	552	夫琅禾费衍射的 Python 模拟与电子双缝衍射的 Python 模拟	821
同步粒子加速器相关的计算机模拟	575	对影响扫地机器人清扫效率的一些因素的探究	835
分形图的一些研究和实际应用	583	波的线性叠加	841
分形图的形成—4种方法生成 Sierpinsky 三角形	591	TSP 问题以及其在光路计算中的应用	847
无阻力任意角度配重复摆的周期研究	605	鸟群的集体动力学研究	856
数值方法求解限制性三体问题的拉格朗日点	615	二阶 Rouge-Kutta 法模拟三体运动	872
突发情况下拥挤人群基于传染病 SIR 模型的改进社会力模型	632	SEIR 传染病模型及其优化	878
利用 Python 绘出传染病传播的直观图像	643	限制扩散凝聚(DLA)等模型的计算机模拟	888
基于线种 DLA 模型的模拟与改进研究	651	SEIR 传染病模型构建优化	960
二维平面上“三体”问题的模拟与讨论	660	向列相液晶相变的蒙特卡洛模拟	969
关于软绳运动模拟的研究	675		
K-Means 聚类的简单研究	700		
三体问题的计算机 Python 模拟	708		
多粒子碰撞体系的元胞自动机模拟	714		
用蒙特卡洛模拟几种自旋模型	730		
用 Python 建模模拟三体问题	740		
分形问题的模拟	758		
考虑个体年龄的传染病模型	766		
传染病模型的实现--以 SARS 和新型冠状病毒为例	774		
二维 Ising 模型的蒙特卡洛模拟	783		
改进的遗传算法绘图	799		

课程实践论文题目 (2021)

目录

1 利用图像处理计算不同空间尺度上的恒星形成定律——黄霆涛-丁怡然	2	24 基于 DLA 模型对粒子在一定浓度分布下的仿真模拟研究——宋子航-韩昱-李欣怡	401
2 应用机器学习判断 LHC 实验中 $\tau \rightarrow 3\mu$ 反应是否发生——陈宇轩-姜汉纯	12	25 利用 DMC 求解氢气分子结合能——江文涛	406
3 计算量子化学方法——崔畅	51	26 双星系统引力辐射的牛顿近似——周辛辰-李仕根-刘高恒	411
4 克尔黑洞的轨道计算——陈国银-邓云未	63	27 人脸识别及表情预测有关探究——刘奕飞-李良杰-刘晋	422
5 使用数值模拟的方法探究雪花六角形结构的生成——邬骐远	77	28 利用神经网络数值求解偏微分方程——毛仲维-毛逸夫-沈禹	429
6 基于排队论模型的 5G 基站分布分析——郑耀杰	105	29 利用传染病模型对印度新冠疫情的分析——顾立文-霍星媛-彭于娟	436
7 相位解缠算法优化——杨宇航-鹿驰-涂治卓	124	30 内卷模型的搭建与迭代模拟——蔡乐雨-尚一丁-温伯赓	441
8 足球中弧线轨迹模拟与进球概率分析——邹当逸-蔡增听	131	31 虹和霓的计算机模拟——孙皓楠-唐之珩-李攸煦	460
9 通过干涉条纹分析溶液温度、浓度分布——刘家轩-马传龙†-钱昕洲‡	137	32 基于相场模型的二维固液相变(过冷晶体生长)模拟——汤诚至-文慧敏-徐文杰	467
10 萨克逊碗沉没耗时的数值求解——张廷钧-石昕宇-王徐升	160	33 基于卷积神经网络的超声检测图像缺陷提取——王力波-李灏天-王浩宁	485
11 蒙特卡洛模拟研究二维三角晶格伊辛模型——王子昂	182	34 弗兰克赫兹实验的计算机模拟——魏孝龙	497
12 噪声影响下的生物系统的计算探究——马成功-严泽宇-徐智广	197	35 几种生长模型的蒙特卡洛模拟及分形维数的计算——许诺-张德志	500
13 变分蒙特卡洛算法及基于机器学习的优化——周东奥-吕君坤	238	36 含时薛定谔方程的数值求解方法探讨——许夏泽	504
14 图灵的沙盘——严维林-刘懿文-魏海洋	259	37 激光光镊捕获下微粒所受光阱力与位移的模拟与改进研究——杨星月-尹一涵	519
15 随机级数展开法求解二维海森堡——汪隽琪-张润轲	271	38 铁磁材料磁滞回线的实验测量 和数学模型拟合——陈宇轩-董帅	532
16 群鸟模拟——邓徐雨桐	290	39 三节点适应性模型的参数优化——高立晖-刘鑫龙	567
17 DCT 隐写术与优化问题——杜绍伟-施达-张国勇	302	40 利用神经网络数值求解偏微分方程——毛仲维-毛逸夫-沈禹	578
18 用 Python 计算模拟鱼群的集群运动行为——段皓天	331	41 反应扩散合斑图形成——钱嘉欣-邹禄军	604
19 基于 LBM 理论对受干扰流体的模拟——方亦舟-姚哲涵	337		
20 计算物理方法研究期权定价——以美股 BIDU 期权为例——冯英杰-封懿磊-胡杨	361		
21 利用双目测量原理确定影长实现定位——杨子洋 顾天予 白承熙	372		
22 基于社会力的突发事件下拥挤人群的计算机模拟——仲豪爽-郭腾	382		
23 合作的演化 ——公共物品博弈中的博弈策略进化——韩飞-郭宇程	392		

课程实践论文题目（2024）

目录

1.Python 在天体力学中的应用——董一帆 江思源	1	28.整合生物网络中的动力学模型以解析细胞命运决策	328
2.半导体 PN 结电学特性的一维数值求解——余苏霖	6	29.Monte Carlo 方法模拟 Bhabha 过程与探测器作用过程——孙行阳 李沅镁	342
3.比较两种近似方法对 SK 模型的模拟——曾梓源 吴晨怡	20	30.K-均值聚类及层次聚类进行城市属性初步分类——冯煜山	359
4.编码空间光调制器进行激光光束整形及相关光学成像过程的计算机模拟——郑天泰	35	31.Frank-Hertz 实验的曲线特征分析与分子动力学模拟——谷怡昊 王靖 朱迅达	370
5.超声检测 B 型扫描缺陷成像的算法实现——林炜伦 朱宗恒 韩知君	48		
6.传染病模型的模拟——艾厚琦	61		
7.对三体系统的数值模拟及对其特性的讨论——蒋立杰	67		
8.对头传递相关函数(HRTF) 模型的简化求解——余锦洋 王润邦 马浩源	77		
9.仿真计算的超透镜设计及优化实现——尹远哲 尹诺诚 张艺琛	98		
10.非对称细菌生长模型——徐东南 刘宗岳	110		
11.灰尘聚集的扩散限制凝聚模拟——沈陈一 朱思齐 王蕊	118		
12.基于 U-net 深度学习网络对双随机相位加密系统的破密——赵思扬 刘力心 顾知航	132		
13.基于超声检测和固体黑盒超声探伤实验的改进研究——张俊彦 朱茂源 冯煜山	138		
14.基于混沌系统的图像加密模拟与改进研究——崔静宣 陈琳琳 吴祉诺	157		
15.基于蒙特卡洛方法的酱油热透镜效应仿真模拟——苏铭洋 马子鸣	165		
16.基于天体物理模拟的太阳系运动与星际航行——曾祥智 倪好 余天泽	202		
17.极端天气季节性预测——张智尧 胡宇桐 杜成凯	225		
18.煎饼旋转——王懿 裴易简	235		
19.利用机器学习算法分类快速射电暴——李锐楠 吴岳	242		
20.群鸟模拟-PSO 算法基础和优化——孙彭哲 高力 陈雨菲	254		
21.日冕环路混合加热机制模型的数值求解——郭文灵 魏佳瑶	261		
22.沙堆模型中崩塌事件的周期性行为研究——师一帅	278		
23.生物震荡：阿特金森振荡器——陈嘉璐 李陆洋	286		
24.探寻铁电材料产生电滞回线的原因并模拟电滞回线——吴樊	291		
25.行人与车辆仿真：基于 A*算法与社会力模型的多智能体系统模拟——张育琪 汪琳晗 吴子涵	295		
26.用蒙特卡洛方法模拟二维薄膜生长过程——乔莹 张凯瑞	306		
27.用蒙特卡洛模拟探究隐形的兔子问题——周伟凡	320		

在线课程：

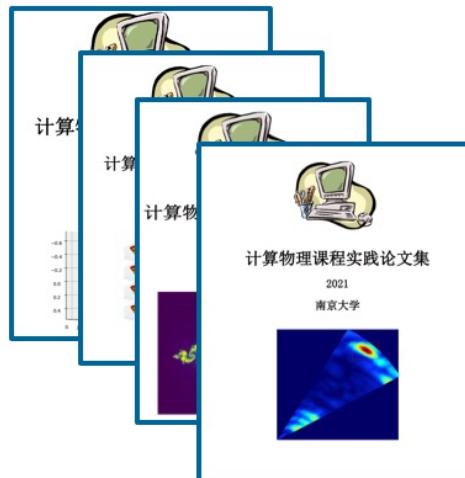
<https://www.icourse163.org/spoc/course/NJU-1467285164>

The screenshot displays the course configuration page for '计算物理' (Computational Physics) on the iCourse163 platform. The page is divided into several sections:

- 左侧栏:** Shows the course title '计算物理', its status as '已参加, 等待开课', and a brief description: '本课程主要训练学生利用计算机解决实际物理问题的能力。通过本课程学习,让计算机真正成为学习与助手!'.
- 右侧栏:** Contains tabs for '评分标准', '题型设置', and '总分及成绩设置'. The '总分及成绩设置' tab is active.
- 总分设置:** This section allows setting the total score and its components. It includes:
 - 参与计分类型:** Options include '单元测验' (checked), '单元作业', '考试', and '新版考试'.
 - 总分占比(%):** Corresponding percentage values: 20, 0, 0, 0, and 70.
 - 课程讨论:** Set up discussion participation points.
 - 活跃度:** Input field: 10.
 - 内容质量:** Input field: 0.
 - 域外成绩:** Option checked.
 - 视频学习完成度:** Options include '视频学习时长' (checked) and '学习课件个数'.
 - 总分占比(%):** Corresponding percentage values: 0, 0, 0, 0, and 70.
- 成绩设置:** (Only course administrators can set grades). It includes:
 - 仅有合格成绩:** Grade requirement: 60 ≤ 得分 ≤ 100. Input field: 请输入阿拉伯数字.
 - 有合格成绩, 还有优秀成绩:** Grade requirements: 60 ≤ 得分 < 90 and 90 ≤ 得分. Input fields: 请输入阿拉伯数字.

课程实践（大作业）课题

建设成效：课程实践论文集（创新实践能力提升）



目录

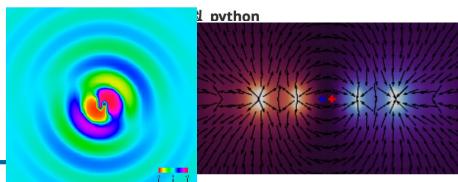
1 利用图像处理计算不同空间尺度上的恒星形成定律——黄霆涛-丁怡然	2
2 应用机器学习判断 LHC 实验中 $\tau \rightarrow 3\mu$ 反应是否发生——陈宇轩-姜汉纯	12
3 计算量子化学方法——崔畅	51
4 克尔黑洞的轨道计算——陈国银-邓云未	63
5 使用数值模拟的方法探究雪花六角形结构的生成——邬骐远	77
6 基于排队论模型的 5G 基站分布分析——郑耀杰	105
7 相位解缠算法优化——杨宇航-鹿驰-涂治卓	124
8 足球中弧线轨迹模拟与进球概率分析——邹当逸-蔡增昕	131
9 通过干涉条纹分析溶液温度、浓度分布——刘家轩-马传龙†-钱昕洲‡	137
10 萨克逊碗沉没耗时的数值求解——张廷钧-石昕宇-王徐升	160
11 蒙特卡洛模拟研究二维三角晶格伊辛模型——王子昂	182
12 噪声影响下的生物系统的计算探究——马成功-严泽宇-徐智广	197
13 变分蒙特卡洛算法及基于机器学习的优化——周东奥-吕君坤	238
14 图灵的沙盘——严维林-刘懿文-魏海洋	259
15 随机级数展开法求解二维海森堡——汪隽琪-张润珂	271
16 群鸟模拟——邓徐雨桐	290
17 DCT 隐写术与优化问题——杜绍伟-施达-张国勇	302
18 用 Python 计算模拟鱼群的集群运动行为——段皓天	331
19 基于 LBM 理论对受干扰流体的模拟——方亦舟-姚哲涵	337
20 计算物理方法研究期权定价——以美股 BIDU 期权为例——冯英杰-封懿磊-胡杨	361
21 利用双目测量原理确定影长实现定位——杨子洋-顾天予-白承熙	372
22 基于社会力的突发事件下拥挤人群的计算机模拟——仲豪爽-郭鹏	382
23 合作的演化——公共物品博弈中的博弈策略进化——韩飞-郭宇程	392

电偶极子在任意电磁场中的电场分布模拟

徐豪^{(1)*} 孙承凡⁽²⁾ 周晓⁽³⁾
(1) (南京大学18级物理学院拔尖班,南京,210093,181840270@smail.nju.edu.cn)
(2) (南京大学18级物理学院拔尖班,南京,210093,181840042@smail.nju.edu.cn)
(3) (南京大学18级物理学院拔尖班,南京,210093,181840357@smail.nju.edu.cn)

摘要:

电偶极子的电场分布模拟是一个计算物理模拟的经典问题。对于静态或简谐振荡的电偶极子通常可借助解析来画出电势与电场线。但对于任意电磁场中的电偶极子，我们难以用解析的方法来画出电场线方程。在本篇文章中，我们以“电磁场以光速传播”和“在任意参考系下光速不变”为切入点，建立了“延时算法”，从物理本质角度进行计算模拟。我们将整个过程分段为三个主要部分：首先是求解微分方程，利用方程解求出各时间空间内电场、电势分布，最后利用得到的结果画图、动画绘制、图形化界面生成都将用python语言完成。文章还将偶极子简谐振动的模拟结果进行了对比，一定程度上验证了模型的准确性。



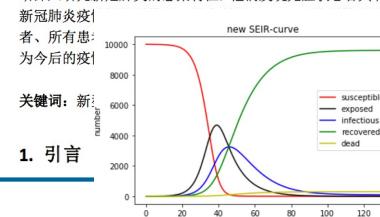
研究新型冠状病毒肺炎疫情的传播模型以及无症状患者对

流行趋势的影响

黄一城¹⁾ 陶林润德²⁾

1)(南京大学物理学院物理学系 2018 级, 学号: 181830080, Email:
2)(南京大学物理学院物理学系 2018 级, 学号: 181840214, Email:

摘要：2019 年 12 月，新型冠状病毒肺炎 (novel coronavirus-infecting pneumonia, COVID-19) 在中国武汉开始爆发，直到 2020 年 5 月已蔓延至全球 200 多个国家，感染人数上升至 500 多万例。因此，科学有效地预测疫情流行趋势对疫情防控至关重要。为了深入研究新冠肺炎的感染特性，他们发现无症状患者具有一定传染性，所有患者都有可能成为新的感染者，从而导致疾病的广泛传播。



1. 引言

17 肿瘤生长的元胞自动机模拟——姚明辰-王洁融-夏天

肿瘤生长的元胞自动机模型

姚明辰 161240082, 王洁融
南京大

【】
姚明辰 161240
王洁融 161130
夏天 1612400

【摘要】应用元胞自动机原理，依据肿瘤生长动态过程进行了模拟，并进一步考察了不同参数对肿瘤生长的影响。模拟结果显示了不同情形下肿瘤细胞的生长情况。

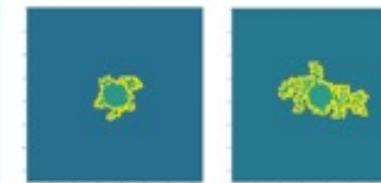
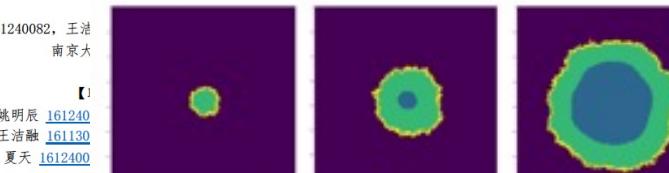
一、引言

恶性肿瘤是危害人类生命健康的严重疾病，其生长过程涉及多阶段的极其复杂的生物学现象，具有高度的非线性和非平衡性。肿瘤可被视为自组织的复杂动态系统，本文采用元胞自动机对肿瘤的生长进行模拟，这种仿真模拟有助于我们理解肿瘤的生长特

克尔黑洞的轨道计算*

陈国银¹⁾ 邓云未¹⁾

1) (南京大学天文与空间科学学院, 南京 210046)



课程实践（大作业）课题



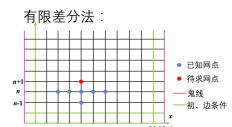
课程实践（大作业）课题

成效：创新意识提升



寓学于乐、寓乐于学！

弦振动问题：有限差分法求解波动方程！

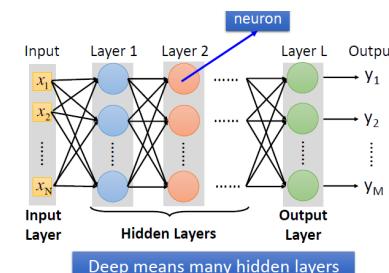


南京大学校歌



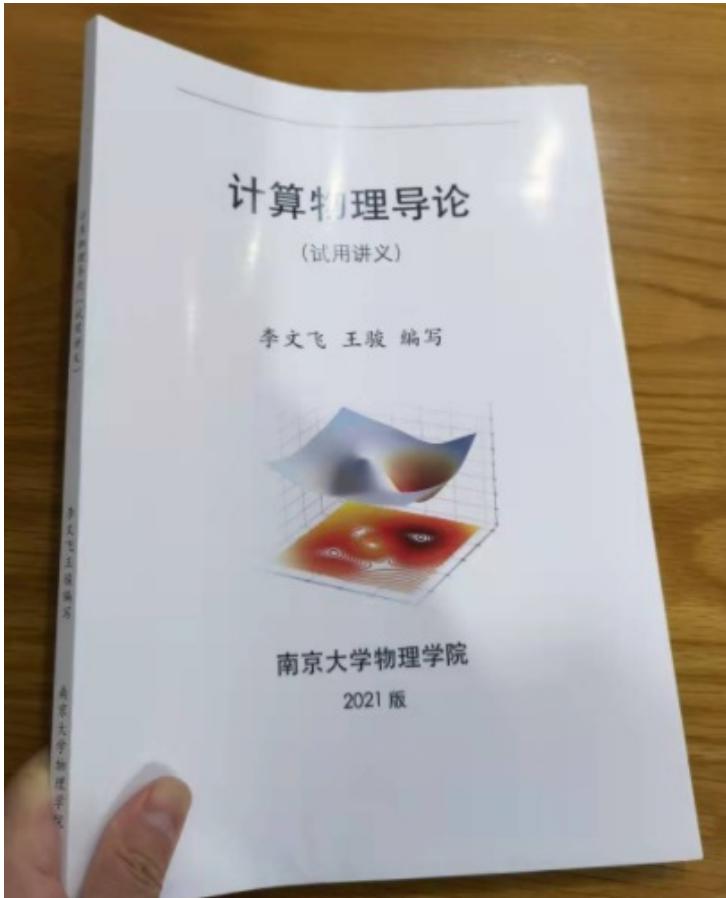
聆听方程的解！

机器学习：神经网络让电脑自己玩转超级玛丽！



教材：自编计算物理导论讲义

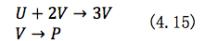
在教学立方即时更新，在线浏览（暂不提供下载！）



计算物理导论讲义

第四章

南京大学 李文飞



式(4.15)中的两个反应皆为不可逆反应。其中，分子U在分子V的催化下生成分子V，而分子V可进一步反应生成分子P。上述反应可用如下反应扩散方程组描述：

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} &= D_u \nabla^2 U - UV^2 + F(1-U) \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= D_v \nabla^2 V - UV^2 - (F+r)V \end{aligned} \quad (4.16)$$

其中，U, V表示分子U和V的浓度。方程右侧第一项为扩散项，第二、三项为化学反应项。F表示分子U的供给速率以及所有分子的排出速率。r为V \rightarrow P的反应速率。 D_u 和 D_v 分别为分子U和V的扩散系数。偏微分方程(4.16)与有内部热源的二维热传导方程相似，但涉及两个方程。采用有限差分法，可以写出相应的差分方程：

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j,k+1}-u_{i,j,k}}{\tau} &= D_u \left(\frac{u_{i-1,j,k}-2u_{i,j,k}+u_{i+1,j,k}}{h^2} + \frac{u_{i,j-1,k}-2u_{i,j,k}+u_{i,j+1,k}}{h^2} \right) - u_{i,j,k} v_{i,j,k}^2 + f(1-u_{i,j,k}) \\ \frac{v_{i,j,k+1}-v_{i,j,k}}{\tau} &= D_v \left(\frac{v_{i-1,j,k}-2v_{i,j,k}+v_{i+1,j,k}}{h^2} + \frac{v_{i,j-1,k}-2v_{i,j,k}+v_{i,j+1,k}}{h^2} \right) + u_{i,j,k} v_{i,j,k}^2 - (f+r)v_{i,j,k} \end{aligned} \quad (4.17)$$

将式(4.17)整理可得：

$$u_{i,j,k+1} = \left(1 - \frac{4\tau D_u}{h^2} \right) u_{i,j,k} + \frac{\tau D_u}{h^2} (u_{i-1,j,k} + u_{i,j-1,k} + u_{i+1,j,k} + u_{i,j+1,k}) - u_{i,j,k} v_{i,j,k}^2 + f(1-u_{i,j,k})$$



扫码直接查看共享的内容

参考书目：

1. Giordano NJ, Computational Physics, 清华大学出版社影印版, 2007
2. 马文淦, 计算物理学, 科学出版社, 2002
3. 陈钟贤, 计算物理学, 哈工大出版社, 2001
4. 彭芳麟, 计算物理基础, 高等教育出版社, 2010
4. 郝柏林, 张淑誉, 数字文明:物理学和计算机, 科学出版社, 2005
5. Numerical recipes, W. M. Press, Cambridge
6. Scientific Computing with Python, 电子档



课堂要求

- ✓ 除非另行通知，需要带笔记本电脑；
- ✓ 没有笔记本电脑的同学，提前找其他同学共享电脑；
- ✓ 上课前给 电脑充好电。





学习计算物理，让计算机真正成
为学习和科研的得力助手！

Enjoy It!

