Computational Physics II

Yin Guo

yinguo@ruc.edu.cn

Office: Physics Building Room 303

Course email:
rucyguo@163.com **password: xx**

Introduction to Computational Physics

- 计算物理学的诞生
- 计算物理学的研究内容和方法
- 计算物理学的发展
- 计算物理学在相关学科中的应用
- 本课程的授课内容、作业和考核方式

传统物理学

- **实验科学**—19世纪中叶前：原始积累时期，大部分的物理规律是基于实验归纳得出的。 ← 一切靠实验

- **实验+理论科学** --- 1886年Maxwell（麦克斯韦）给出了电磁场麦克斯韦方程组，预言了电磁波的存在，后被实验证实，初步展示了物理理论思维和归纳演绎方法的强大之处。从这时起，有别于实验物理，理论物理相对独立，开始形成了物理学的另一个重要分支。 ← 理论也能管点用

- **实验+理论科学** --- 20世纪初，量子力学和相对论的诞生，使物理学进入了一个全新的时代，理论物理发展成为一门成熟的物理学分支学科。由此物理学正式形成了实验、理论两大分支，并相互促进、相互发展，引发了20世纪科学技术的重大革命。 ← 理论能顶半边天

好景不长

随着研究体系复杂性的增加，理论与实验遇到了难以克服的困难：

系统复杂性体现在各个方面：

理论：由单体问题转变到多体问题，线性系统发展到非线性系统，低维体系到高维体系，标量系统扩展到矢量系统，常微分方程转变到偏微分方程、低级微扰转变到高级微扰，理想化模型扩展到实际复杂模型，单一物理学科发展到综合学科的研究 。

实验：研究对象和范围的拓广，研究精度、极限更高，设备更复杂，以及海量的的实验数据 。 ← 成本高、难度大

↓

计算物理学

省时、省力、省钱、灵活自由、可以模拟极端条件等。。。

原始推动力:核武器研制?

- 据查证："计算物理（ComputationalPhysics）"一词首次正式出现是在美国1963年出版的"计算物理方法"丛书中。该套丛书从1963年至1977年相继出版了17卷，是美国Manhattan（曼哈顿）计划解密的研究成果。其内容涉及统计物理、量子力学、流体力学、核物理、天体物理、固体物理、等离子体物理、受控热核反应等方面的物理问题，介绍了有关"计算物理"的概貌。因此，可以称"计算物理学"的原始推动力是（核）武器研制。直至今日，世界上速度最快的计算机仍然担负着武器研制和国家安全的任务。

METHODS IN
COMPUTATIONAL PHYSICS

Advances in Research and Applications

Edited by

BERNI ALDER
Livermore, California

SIDNEY FERNBACH
Livermore, California

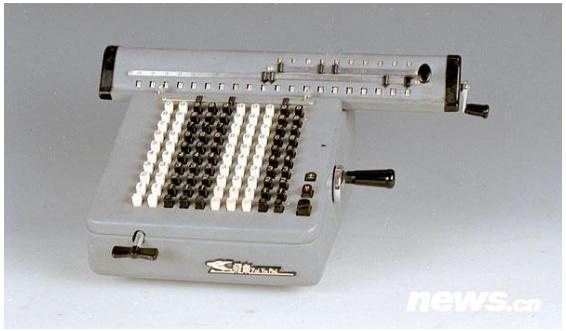
MANUEL ROTENBERG
Los Angeles, California

Volume 1

Statistical Physics

1963

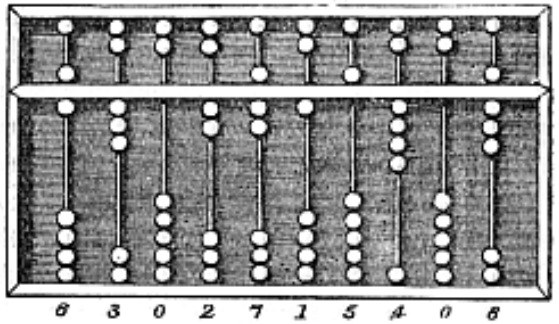
New York and London



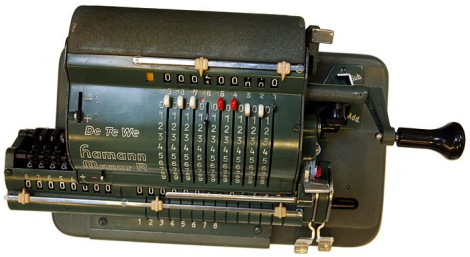
研制我国第一颗原子弹所采用的手摇计算机

Historic Tools in Computation

abacus

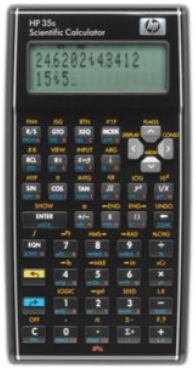


mechanic computer



ENIAC(**Electronic Numerical Integrator And Computer)**

Calculators



2007

1972

天河计算机

Introduction to Computational Physics

- 计算物理学的诞生
- 计算物理学的研究内容和方法
- 计算物理学的发展
- 计算物理学在相关学科中的应用
- 本课程的授课内容、作业和考核方式

计算物理学 – 定义

- 以**计算机和计算机科学技术**为工具和手段

  应用适当的**数学和物理方法**

对**物理问题**进行数值分析与研究、对**物理过程**进行数值模拟

- 是物理、数学、计算机应用三者**结合的产物**
- 是物理学的**第三大分支**

- 关键词：计算机为工具，物理问题与物理过程、数值分析与模拟

计算物理学 — 用计算机做实验

- 从本质而言：计算物理是对**复杂体系**的**物理规律**、**物理性质**进行研究（特别是**数值研究**）的一个重要手段。
- 不论计算物理所研究的课题是**理论**还是**实验**课题，计算的引入都极大的改善了其研究状况。
  - 使得理论研究从解析推理的束缚下解放出来
  - 使实验物理的研究手段得到了根本改革

- 计算物理学的研究方法及风格有接近实验物理的成分，有人称其为“**数值实验**”；有的则干脆的称为“**用计算机做实验**”；同时它又是用计算机武装起来的理论物理，也被称为“**实验的理论物理**”。

计算物理学的研究范围

- 计算理论物理

1、复杂物理体系的数值计算与模拟

2、复杂物理体系的解析计算与分析（符号运算）

- 计算实验物理

3、物理实验数据的采集、分析、处理

4、物理实验过程与实验系统的模拟与控制

5、物理图像的获得、识别、处理

计算物理学的研究方法 -- 三板斧

- 三板斧：建模(modeling)、模拟(simulation)、计算(computation)

- Modeling：偏重于物理、数学**模型的建立**，这是计算物理的**基础**。
- Simulation：是指对物理**过程的描述**、对物理现**象的表达**和对物理**规律的探索**。
- Computation：应用计算机的**数值研究**，包括数值计算和数值分析。与Simulation一通为计算物理的**基本核心内容**

- Modeling主要是人脑完成的 ← 极度重要+非常辛苦 ☹
- Simulation & Computation是电脑完成的

← 强悍的计算机可以弥补人脑的不足 ☺
← 辛苦程度不详
← 有悖低碳生活

计算物理学的研究方法 – 四步走

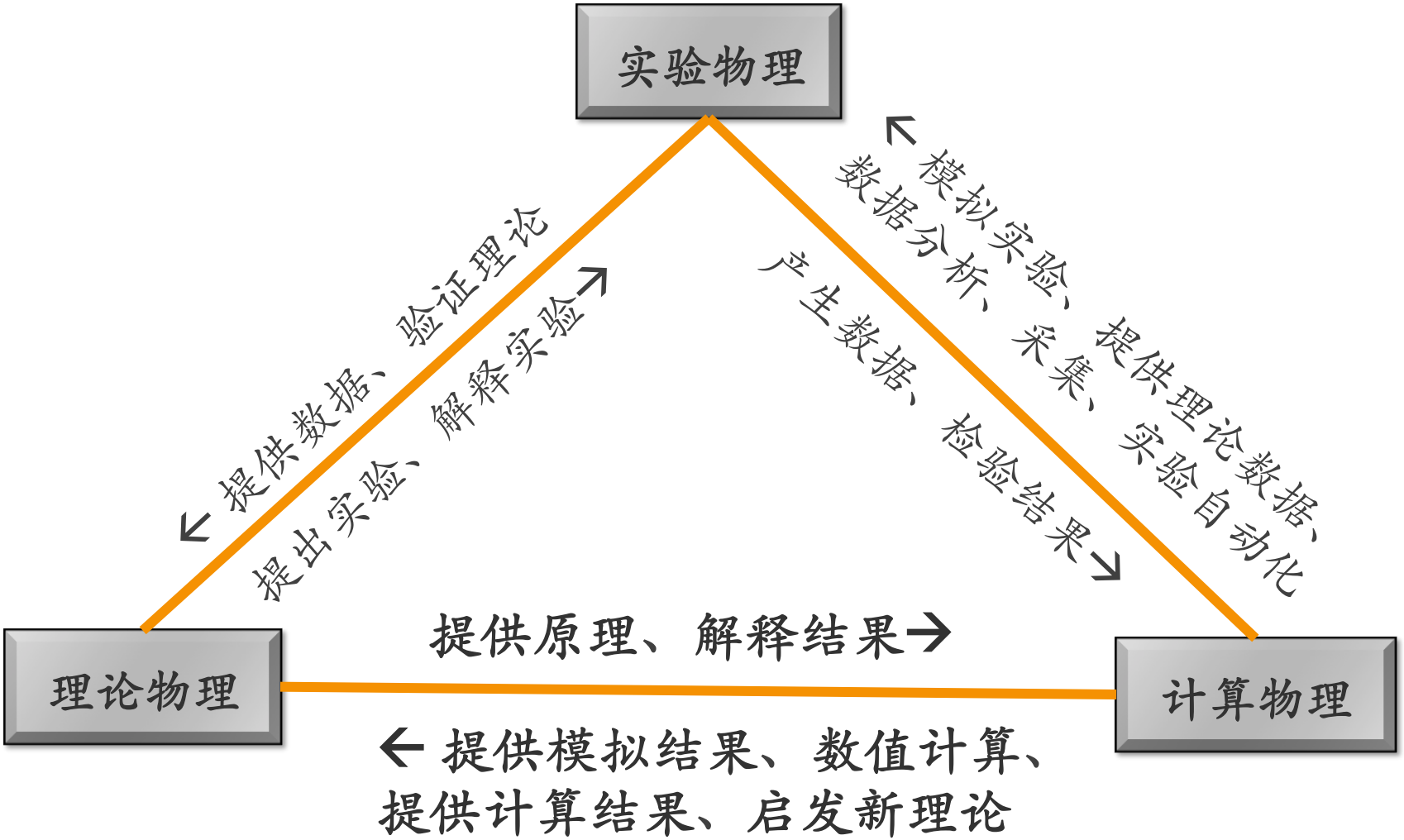
- 第一步：确定物理模型
  对物理问题进行分析，抓住主要因素，忽略次要因素，建立相应的物理模型

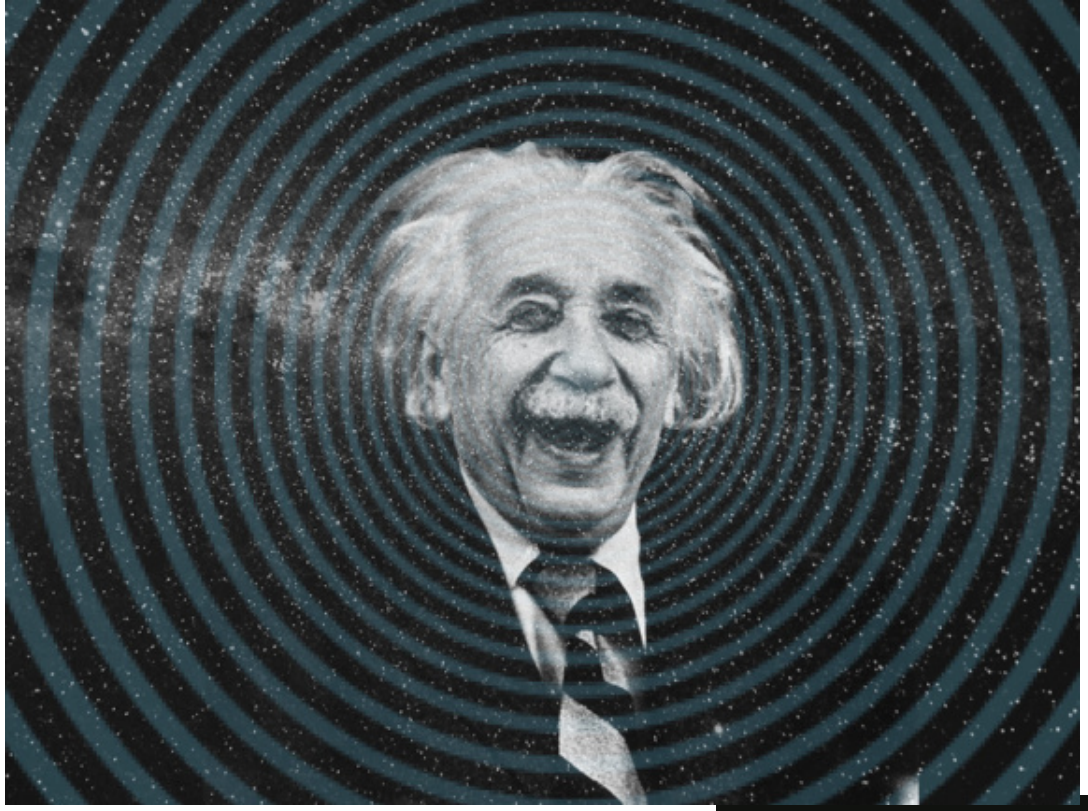
- 第二步：选取数值方法
  在第一步的基础上，选择合适的数值方法在计算机上实现。
  算法的重要性：计算能力不足以满足直接求解的需求，因此需要一个合适的算法，将复杂问题化简为简单问题、简单问题化简为基本问题，基本问题化简为计算机可以执行的运算。

- 第三步：分析计算结果
  对计算得到的结果进行分析，得到有价值的物理信息。同时要考虑到计算产生的误差、收敛性、稳定性等等因素。
  ← 正确的分析可以避免因为计算误差而给出错误的物理信息，不迷信数值结果

- 第四步：得出物理结论
  整理大量数据的基础上得出相关物理结论，反映物理规律，解释物理机制，进而给出可能的物理预言。

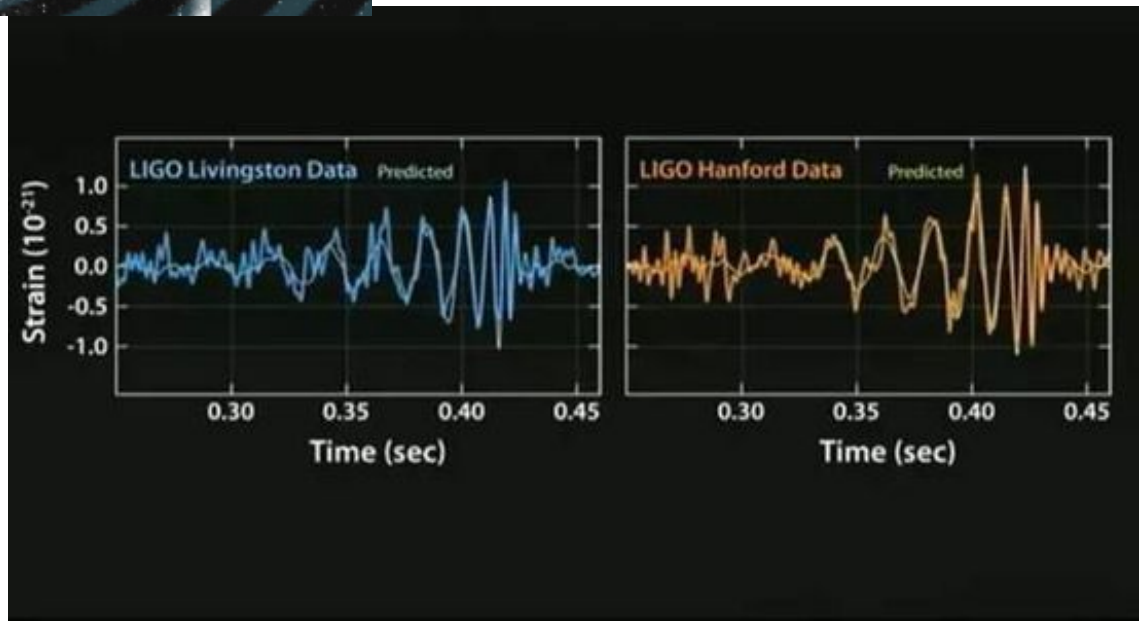
计算物理学和理论物理、实验物理的关系





Gravitational Wave

$$G_{\mu\nu} + \Lambda g_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu}$$



Introduction to Computational Physics

- 计算物理学的诞生
- 计算物理学的研究内容和方法
- 计算物理学的发展（Computer power, computational methods）
- 计算物理学在相关学科中的应用
- 本课程的授课内容、作业和考核方式

计算能力的发展

单个计算机的计算能力，包括大型机、小型机、工作站、个人电脑等。

	1944	1946	~1960	~1970	~1990	~2000	~2010
CPU (flop/s)	3 flop/s	5000	~1 M	~10 M	~100 M	~2 G	~40 G
RAM					32MB	1GB	32 GB

（超级）并行计算机

	1996	1997	2000	2003	2006	2009
CPU (flop/s)	10G	100G	1T	10T	100T	1 P
RAM	10GB	100GB	1TB	10TB	100TB	1PB

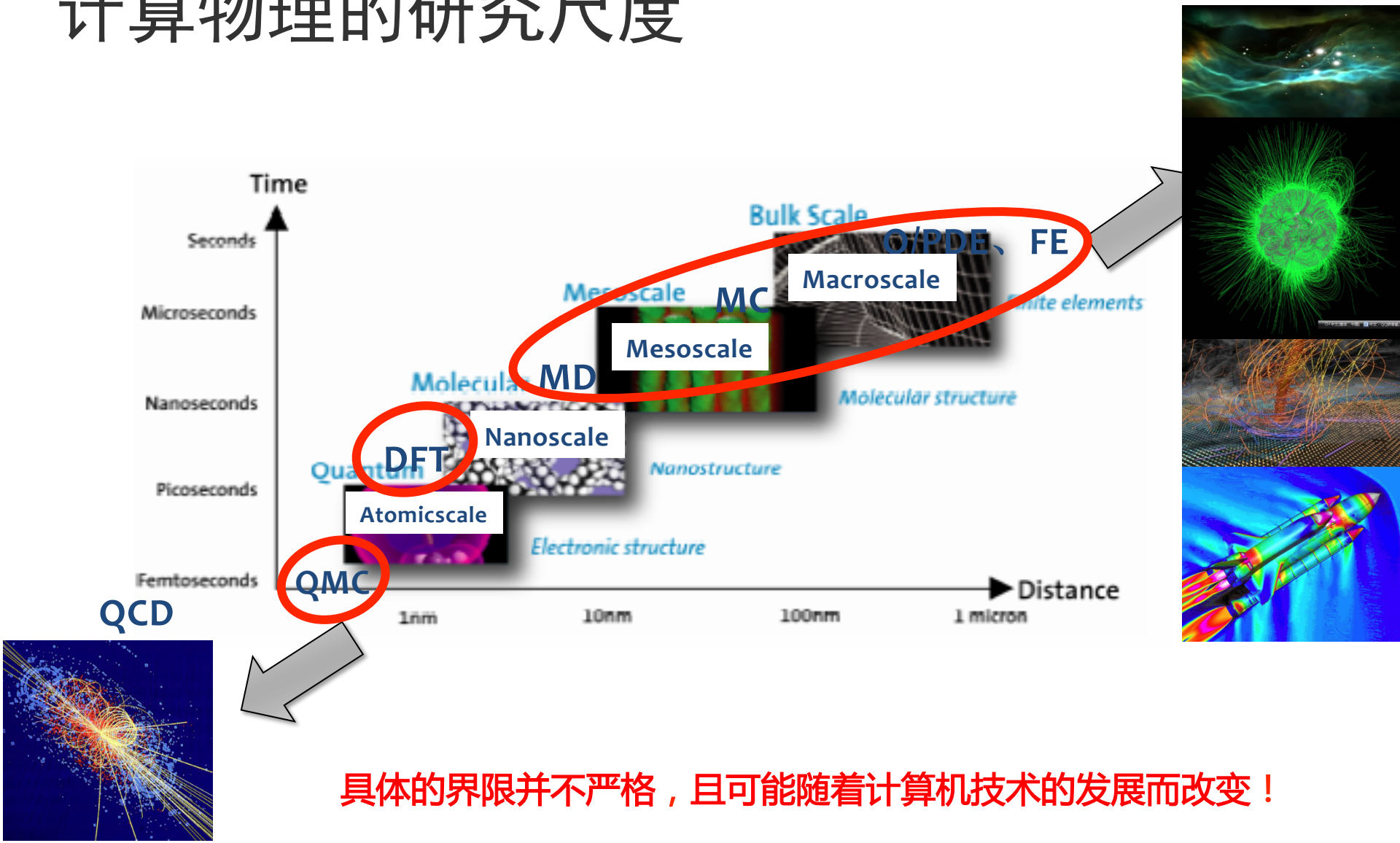
$1M=10^6$; $1G=10^9$; $1T=10^{12}$; $1P=10^{15}$

Moore’s Law

计算方法的发展

- 19世纪：
  - 常微分和偏微分方程
- 50年代：
  - Monte Carlo method (MC，蒙特卡洛)
- 60－70年代：
  - Density Functional Theory (DFT，密度泛函理论)、Molecular dynamics (MD，分子动力学)、Wilson numerical renormalization group (NRG，数值化重整化群)…
- 80－90年代：
- Quantum Monte Carlo methods (QMC，量子蒙特卡洛)、Car-Parrinello method (CP)、Density matrix renormalization group method (DMRG，密度矩阵重整化群) …

计算物理的研究尺度



具体的界限并不严格，且可能随着计算机技术的发展而改变！

Topics Covered in this Course

- Ordinary Differential Equations (ODE)
- Partial Differential Equations (PDE)
- Molecular Dynamics Simulations (MD)
- First-Principles Methods
- Monte Carlo Simulations (MC)
- Finite Elements (FE)

ODE/PDE 常/偏微分方程 – 19世纪

微分方程论是数学的重要分支之一。大致和微积分同时产生，并随实际需要而发展。含自变量、未知函数和它的微商（或偏微商）的方程称为常（或偏）微分方程。

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = F(x,t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

微分方程是研究自然科学和社会科学中的事件、物体和现象运动、演化和变化规律的最为基本的数学理论和方法。物理、化学、生物、工程、航空航天、医学、经济和金融领域中的许多原理和规律都可以描述成适当的微分方程。

然而，我们知道，只有少数十分简单的微分方程能够用初等方法求得它们的解，多数情形只能利用近似方法求解，如渐进法。还有一类近似方法称为数值方法，它可以给出解在一些离散点上的近似值。微分方程数值解就是在计算机上使用的，研究并解决数学问题的数值近似解的方法。它既有理论上的抽象性和严谨性，又有实用性和实验性的技术特征。因此，微分方程数值解已用到科学技术和社会生活的各个领域中。

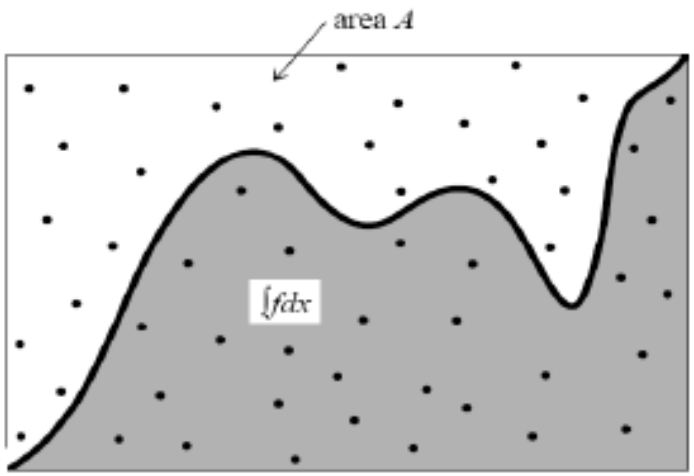
Monte Carlo (蒙特卡洛) – 上世纪40、50年代

计算机随机模拟方法，是一种基于“随机数”的计算方法。这一方法源于美国在第二次世界大战进研制原子弹的“曼哈顿计划”。冯·诺伊曼用摩纳哥赌城—Monte Carlo—来命名这种方法。

Monte Carlo方法的基本思想很早以前就被人们所发现和利用。早在17世纪，人们就知道用事件发生的“频率”来决定事件的“概率”。19世纪人们用投针试验的方法来决定圆周率π。本世纪40年代电子计算机的出现，特别是近年来高速电子计算机的出现，使得用数学方法在计算机上大量、快速地模拟这样的试验成为可能。

科技计算中的问题比这要复杂得多。比如金融衍生产品（期权等）的定价及交易风险估算，问题的维数（即变量的个数）可能高达数百甚至数千。对这类问题，难度随维数的增加呈指数增长，这就是所谓的“维数的灾难”(Course Dimensionality)，传统的数值方法难以对付（即使使用速度最快的计算机）。Monte Carlo方法能很好地用来对付维数的灾难，因为该方法的计算复杂性不再依赖于维数。以前那些本来是无法计算的问题现在也能够计算量。为提高方法的效率，科学家们提出了许多所谓的“方差缩减”技巧。

Simple Monte Carlo Integration



- Sample points within A
- Calculate proportion π of points in region of interest
- Area under the curve is the area A π

Application in statistical physics

Mean value of a physical quantity: $$\langle A \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int A(\mathbf{R}) e^{-U(\mathbf{R})/k_B T} \, d\mathbf{R} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} A(\mathbf{R}_i)$$

Molecular Dynamics(分子动力学) – 上世纪60、70年代

分子动力学是一门结合物理，数学和化学的综合技术。分子动力学是一套分子模拟方法，该方法主要是依靠牛顿力学来模拟分子体系的运动，以在由分子体系的不同状态构成的系综中抽取样本，从而计算体系的构型积分，并以构型积分的结果为基础进一步计算体系的热力学量和其他宏观性质。

分子动力学可以用于NPT，NVE，NVT等系综的计算，是一种基于牛顿力学确定论的热力学计算方法，与蒙特卡洛法相比在宏观性质计算上具有更高的准确度和有效性，可以广泛应用于物理，化学，生物，材料，医学等各个领域。

在实际应用中，经常把分子动力学方法和蒙特卡罗法联合使用。

MD与MC类似，都是“由小见大”的方法：刻画微观过程，统计的描述体系宏观性质。MD由牛顿方程支配，描述微观过程更准确。

Molecular Dynamics Simulations

For a system of N-particles, given the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = E_{\mathrm{K}} + E_{\mathrm{P}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i>j=1}^{N} V(\mathbf{r}_{ij}) + \sum_{i=1}^{N} U_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}_i)$$

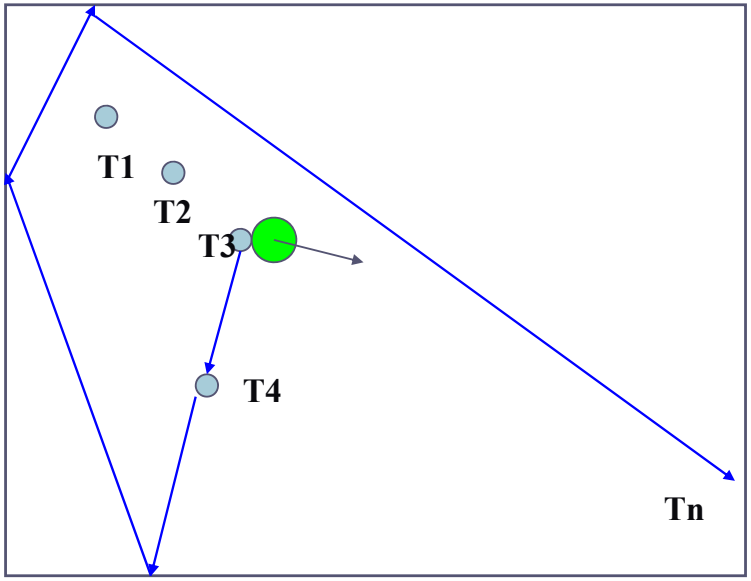
The position vector and momentum satisfy

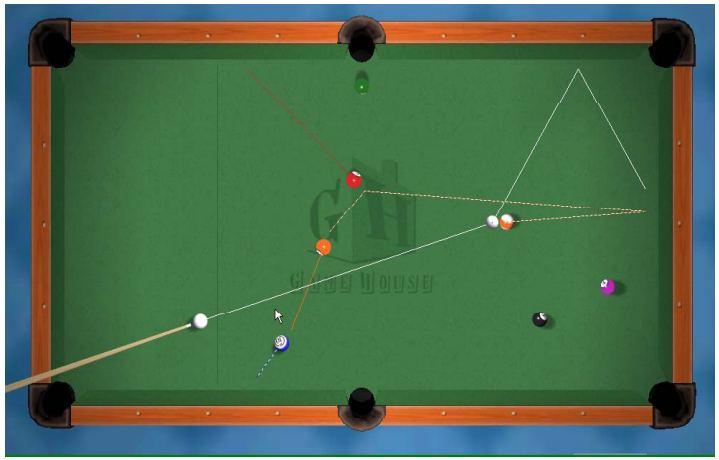
$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i} = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i},$$
$$\dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}_i} = \mathbf{f}_i,$$

where the force is given by

$$\mathbf{f}_i = -\nabla_i U_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}_i) - \sum_{j \neq i} \nabla_i V(\mathbf{r}_{ij})$$

Process of MD simulation





Atom1: x1, vx1, ax1, y1…

Atom2: x2, vx2, ax2, y2…

Atom2: x3, vx3, ax3, y3…

……

Atomn: xn, vxn, axn, yn…

Experimental observables:

Function of coordinates and velocities

第一性原理之从头算方法 （*Ab-initio*）

从第一性原理出发，通过解Schrödinger (or Dirac) 量子力学方程，求解材料的各种性质。

优点：

1、可以给出原子几何（力学）和电子结构信息。
2、可以处理化学键的断裂、形成或者电子结构的重新分布
3、知道计算误差的来源，可以较好的评估计算精度
4、原则上可以只输入原子种类和坐标就基本可以得到准确的物质性质

不足：

1、只能处理小的体系，$O(10^2)$ 个原子
2、只能处理较快的过程，O(10) ps.
3、计算机比较辛苦

第一性原理之密度泛函(DFT)方法－上世纪60、70年代

根据原子核和电子互相作用的原理及其基本运动规律，运用量子力学原理，从具体要求出发，经过一些近似处理后直接求解薛定谔方程的算法，习惯上称为第一原理。

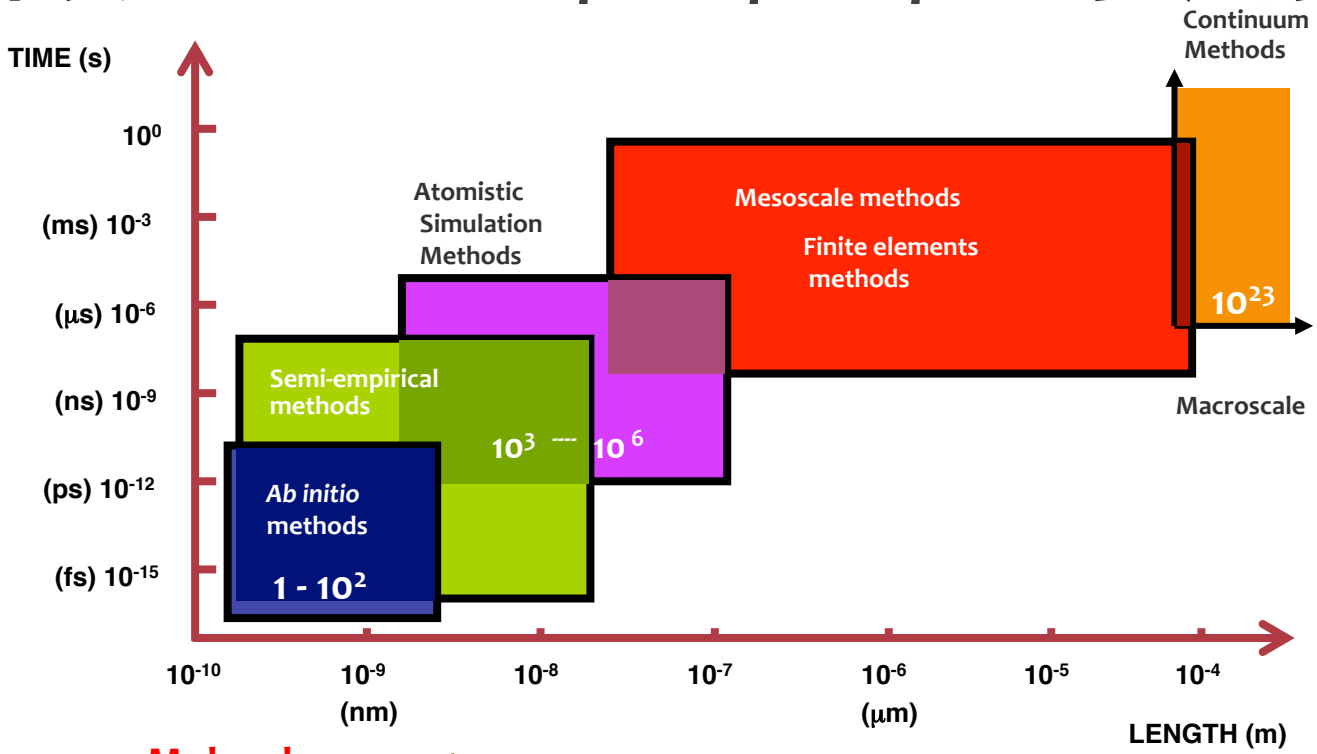
第一性原理通常是跟计算联系在一起的，是指在进行计算的时候除了告诉程序你所使用的原子和他们的位置外，没有其他的实验的，经验的或者半经验的参量，

难以承受直接求解

密度泛函理论是一种研究多电子体系电子结构的量子力学方法。核心思想是：体系的基态能量是体系电荷密度的泛函—这将最难处理的多体问题（由于处在一个外部静电势中的电子相互作用而产生的）被简化成了一个没有相互作用的电子在有效势场中运动的问题。

密度泛函理论在物理和化学上都有广泛的应用，特别是用来研究分子和凝聚态的性质，是凝聚态物理和计算化学领域最常用的方法之一。在多数情况下，与其他解决量子力学多体问题的方法相比，采用局域密度近似的密度泛函理论给出了非常令人满意的结果，同时计算相比实验的费用要少。

材料设计 – DFT/MD/MC/FE 多尺度方法



Molecules: 2-10 atoms

Nanoparticles: 10 - 10^4 atoms

Nanowires: 10 – 100 (diameter)， length: large scale

Nanofilms: 1 – 100 atoms (thickness), lateral: large scale

Nano-composites: Nanoparticle-nanotube, embedded nanostructures

半经验方法，Semi-Empirical Methods

包含一些从实验拟合或者严格重头算得到的参数，通过求解简化的Schrödinger (or Dirac) 量子力学方程，求解材料的各种性质。

优点：

1、同样可以处理化学键的断裂、形成或者电子结构的重新分布
2、可以求解更大的体系， $O(10^3)$个原子
3、可以求解更长时间尺度的物理问题，O(10) ns

不足：

1、计算误差的来源复杂，无法较好的评估计算精度
2、需要从实验拟合或者严格的第一性原理计算得到经验参数。

原子尺度模拟方法，Atomistic simulation methods

使用第一性原理方法或者半经验方法得到原子之间的相互作用势，结合半经典的统计力学，采用MC或者MD方法求解体系的热力学或输运性质等。适用从纳米到介观尺度。

优点：

1、可以求解微观体系的性质甚至更复杂一些的体系，$O(10^{4\text{-}6})$ atoms.
2、可以求解更、更长时间尺度的物理问题，O(1) μs

不足：

1、计算精度取决于原子之间相互作用势的好坏
2、无电子相关的任何信息
3、无法描述一些物理过程，例如时间尺度更短的：固体中的原子扩散、化学反应；时间尺度更长的：蛋白质折叠等。

介观尺度方法，Mesoscale Methods

在原子尺度方法的基础上进行简化，例如，不考虑时间尺度更短的自由度，将一些原子看成一个原子集合(‘blobs of matter’)，考虑集合-集合之间的相互作用—有效势。 (有限元、有限差分等方法)。适用范围从介观到宏观尺度。

优点：

1、可以求解介观尺度复杂体系的结构特性，O($10^{8\text{-}9}$) atoms
2、可以描述前面几种方法无法达到的长时间尺度，O(1) s

不足：

1、通常只能定性的给出趋势，较难给出定量的结果
2、因为引入的太多的近似，因此对结果的解释并不是非常确定

宏观尺度(Macroscale)方法，Continuum methods

假设物质是连续的（不考虑原子细节），且体系物理性质可以用场量来描述。数值求解与该现象（弹性力学、流体力学等等）相关的平衡方程（常、偏微分方程），预测体系的物理性质。（微分方程数值解、有限元、有限差分方法）

优点：

1、可以原则上解决任何宏观几何、时间适度的问题

不足：

1、需要输入大量参数(弹性张量、扩散系数、物态方程等等)，这些参数需要从实验或者更小尺度的模拟中得到。← 并不是那么容易。

2、无法从电子、原子、分子尺度的细节解释计算结果。

Introduction to Computational Physics

- 计算物理学的诞生
- 计算物理学的研究内容和方法
- 计算物理学的发展
- 计算物理学在相关学科中的应用
- 本课程的授课内容、作业和考核方式

计算物理的应用领域

- 物理学领域
  - **凝聚态物理**：模拟材料的力学、热学、电学、磁学、光学性质
  - **高能物理**：模拟核反应、粒子撞击
  - **大气物理**：模拟天气预报、台风
  - **地球物理**：模拟地球内部运动、火山、板块活动
  - **天体物理**：模拟星体的运动、诞生、湮灭
  - **理论物理**：符号运算，使用计算机“推公式”
  - **实验物理**：数据采集、处理、拟合
- **材料学领域**：多尺度模拟：量子力学← → 经典力学
- **化学领域**：化学反应动力学
- **生命科学领域**：生物大分子折叠、药物筛选、生物信息学
- **环境科学领域**：环境风险评估、污染检测
- **工程领域**：船舶、飞行器、汽车、建筑设计与评估
- **社会科学领域**：金融物理学、最优化策略

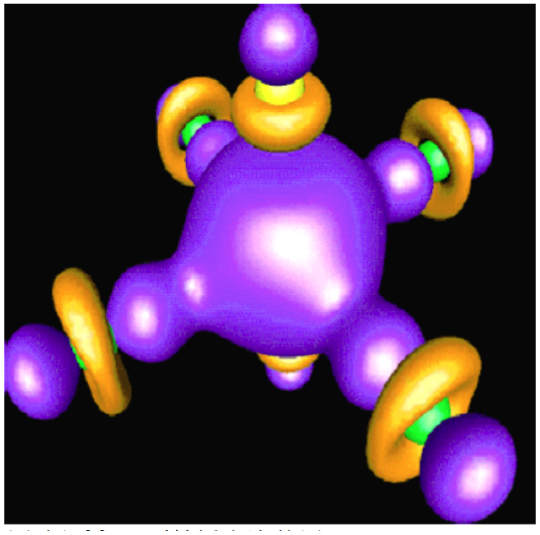
凝聚态物理 – DFT/MD 方法

晶格常数的预测

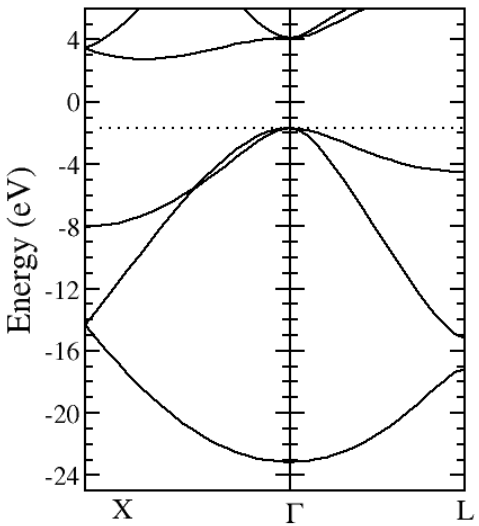
Material	Expt	Theory	Delta	Type
LaBi	6.57	6.648	1.2%	alloy
CaF_2	5.4626	5.496	0.6%	halide
Ag	4.086	4.112	0.6%	metal
V	3.028	3.019	-0.3%	metal
ZrN	4.62	4.634	0.3%	misc
NbO	4.2103	4.2344	0.6%	oxide
GaAs	5.653	5.663	0.2%	semiconductor
$CoSi_2$	5.36	5.3	-1.1%	silicide

凝聚态物理 – DFT/MD 方法

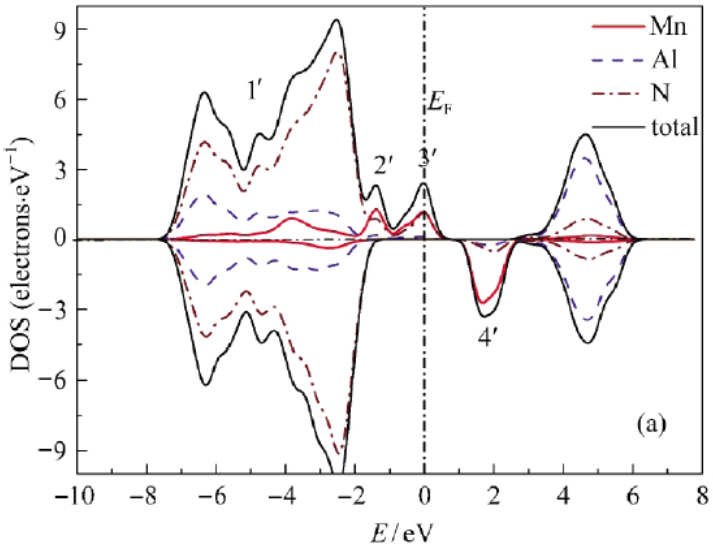
结构、电子（导电性、光学性质）、声子（热学性质）、磁性。。。



过渡金属氧化物中
O2s态的波函数实
空间分布



金刚石的
能带结构

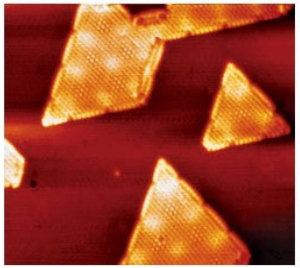


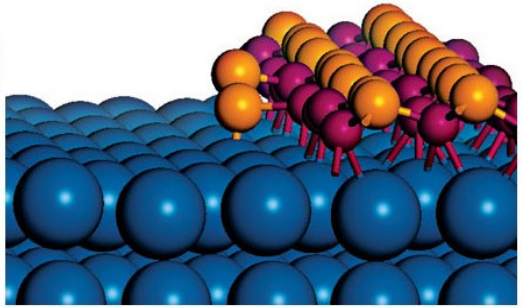
Al-Mn-N化合物的自
旋极化电子态密度
→ 半金属

化学反应过程 – QMC/DFT 方法

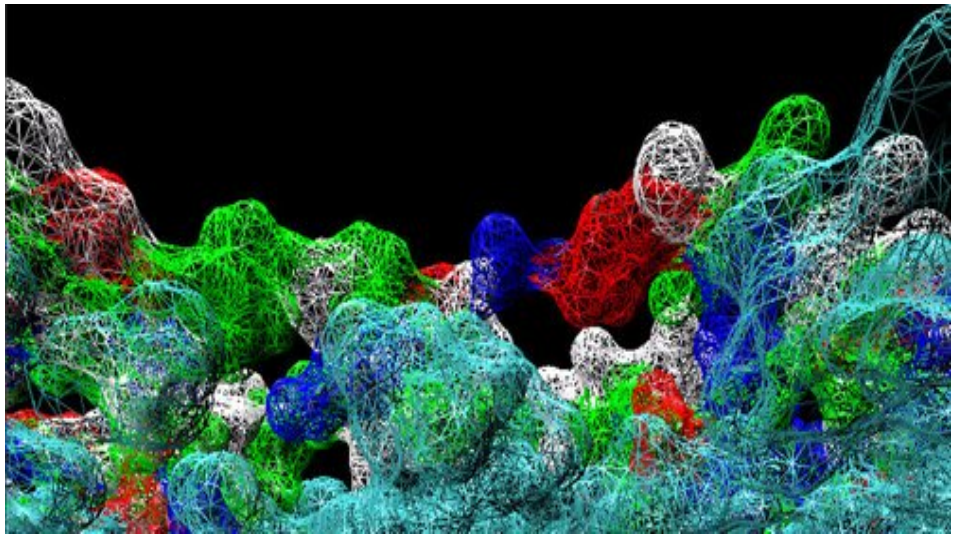
表面催化

金属纳米粒子催化氧化CO/NH/CH4
金属纳米粒子在石油化学中的脱硫





生命科学 – DFT/MD/MC 方法



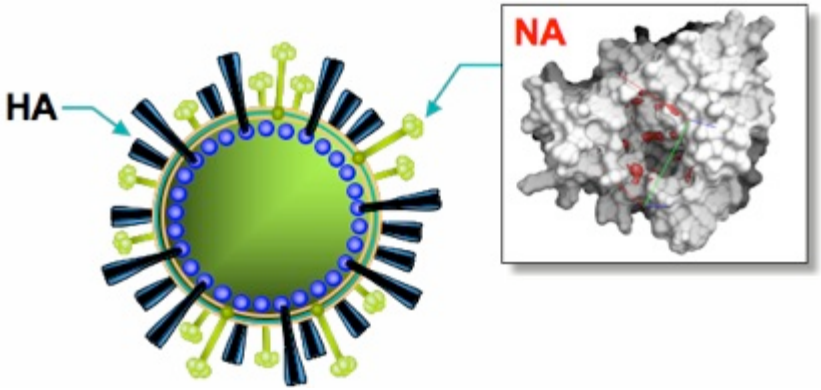
致病机理研究

帕金森氏病症会杀死控制协调移动的大脑细胞，患者将遭受肌肉震颤和僵硬。科学家最初认为一种叫做阿尔法核素的蛋白质分子能够形成束状，具有破坏性的纤维物质，然而其具体的形成过程尚不清楚。

模拟显示阿尔法核素分子可以在大脑细胞膜上穿孔(图像中绿色区域)聚集形成环状结构，从而导致大脑细胞死亡，引发帕金森氏症。这些模拟研究有助于研发新一代预防疾病药物。

药物筛选:

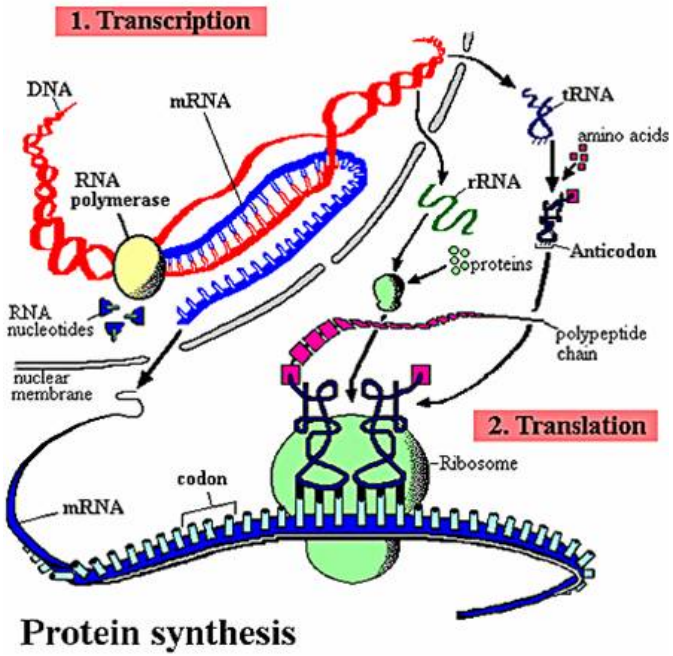
新药研发过程费用昂贵、时间冗长、淘汰率高。大约有90%的候选药物在临床期间被淘汰，这是新药研发过程费用昂贵的主要因素。所谓的药物虚拟筛选(virtual screening)，是指对化合物在其合成之前通过计算机模拟预测其药动学相关的特性而进行筛选。右图是对H1N1病毒受体的药物筛选。H蛋白质负责寄主识别，N蛋白质负责病毒传播，因此抑制N蛋白就可以有效防止细胞感染。

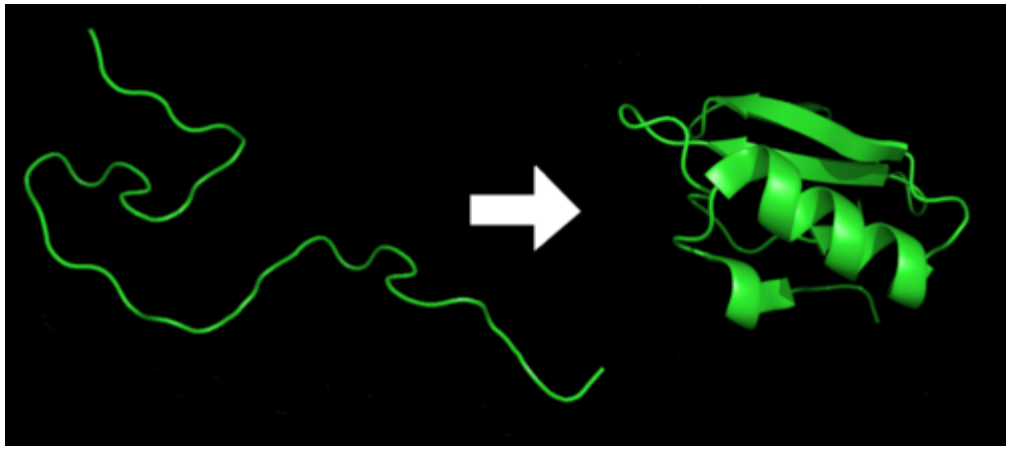


采用特定化学分子使N蛋白(神经氨酸)失活

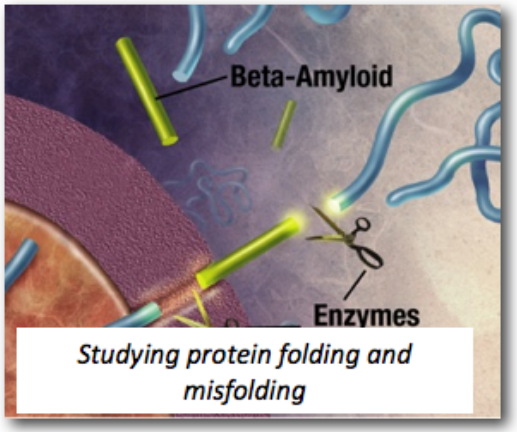
生命科学 -- 蛋白质折叠

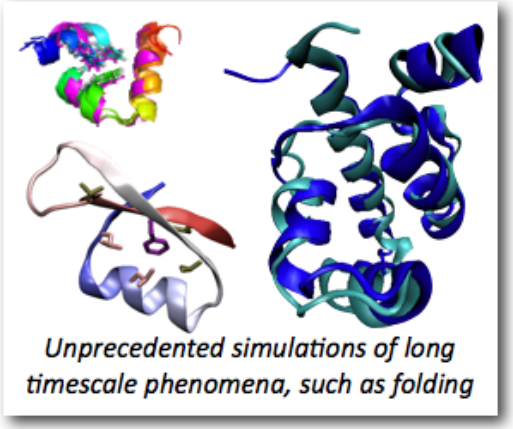
large timescale (~second) molecular dynamics



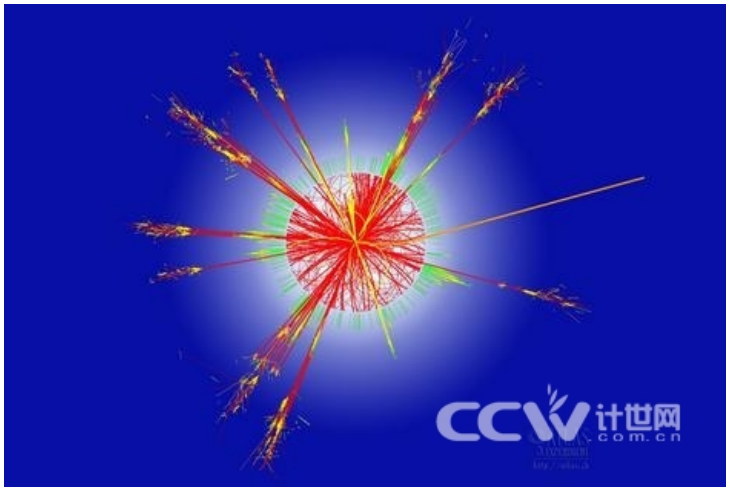


DNA 解旋 → mRNA转录→核糖体翻译→多肽链→折叠→具有功能的蛋白质



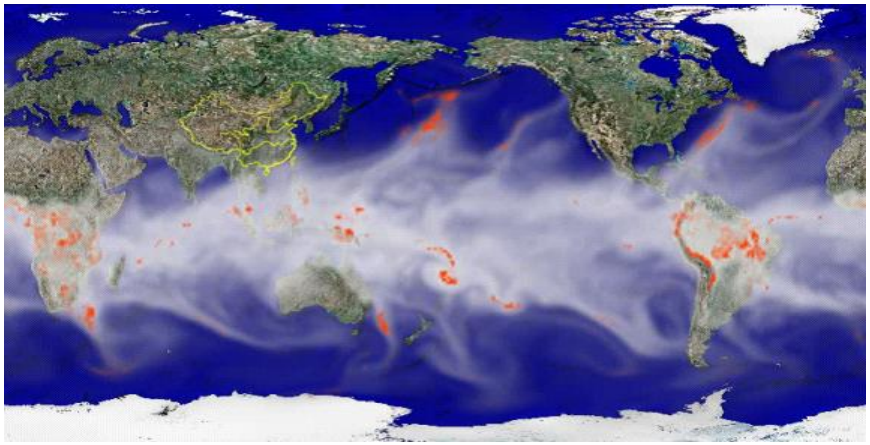


高能物理

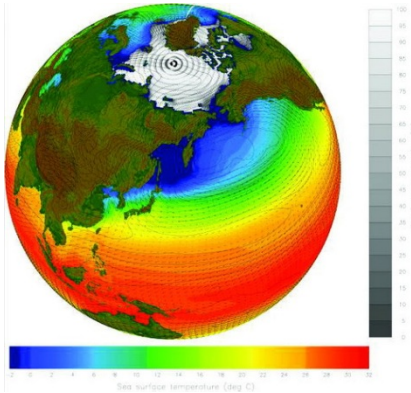


这张图片模拟的是ATLAS里产生的黑洞。这个轨迹是模仿大型强子对撞机(LHC)上的ATLAS探测器得出的模拟数据。如果质子-质子撞击期间产生了微型黑洞，这些轨迹就会形成。这种小型黑洞会通过霍金辐射(Hawking radiation)方式，立刻消失不见。

大气物理



全球湿度与降水的演化，白色的云代表湿度，色点代表降水。

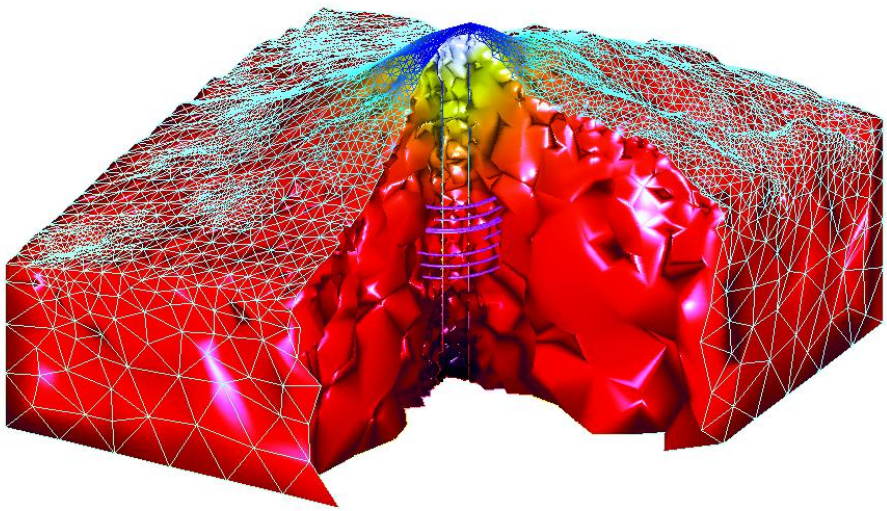


温度升高对格陵兰岛和南极洲上的巨大冰盖将产生什么样的影响？

未来几十年中，海洋和大气运动方式对区域气候将会产生什么样的影响？

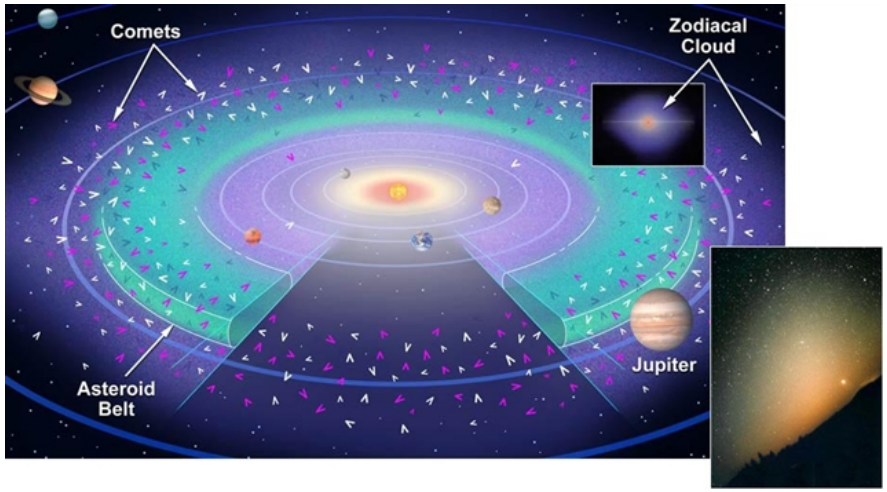
气候变化对包括飓风在内的热带气旋的强度和频率将产生何种影响？

地球物理



GeoPhysics：多种地球物理现象的耦合——火山内部电场、磁场、流体流动耦合分析。

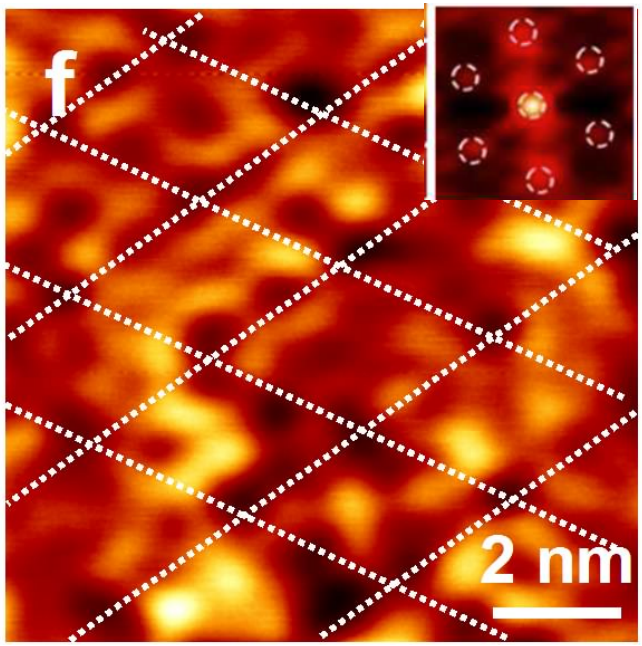
天体物理



位于地球上低纬度和中纬度地带的人们可看到，春季太阳西沉，黄昏过后之时，西方地平线有着微末的三角形光锥；而秋季太阳东升，晨曦未现之时，东方自地平线向上伸展出些许“火舌”， 这就是黄道光。科学家们认为黄道光的起因主要是行星际尘埃对太阳光的散射，类似一个庞大的以太阳为中心的“尘埃饼”，但至今仍对这些尘埃的来源摸不着头脑。美国行星动力学家用计算机模型破解了神秘的夜空辉光——黄道光形成之谜。结论认为，黄道光尘埃几乎全部来自短周期彗星，推翻了长久以来的推测。

实验物理

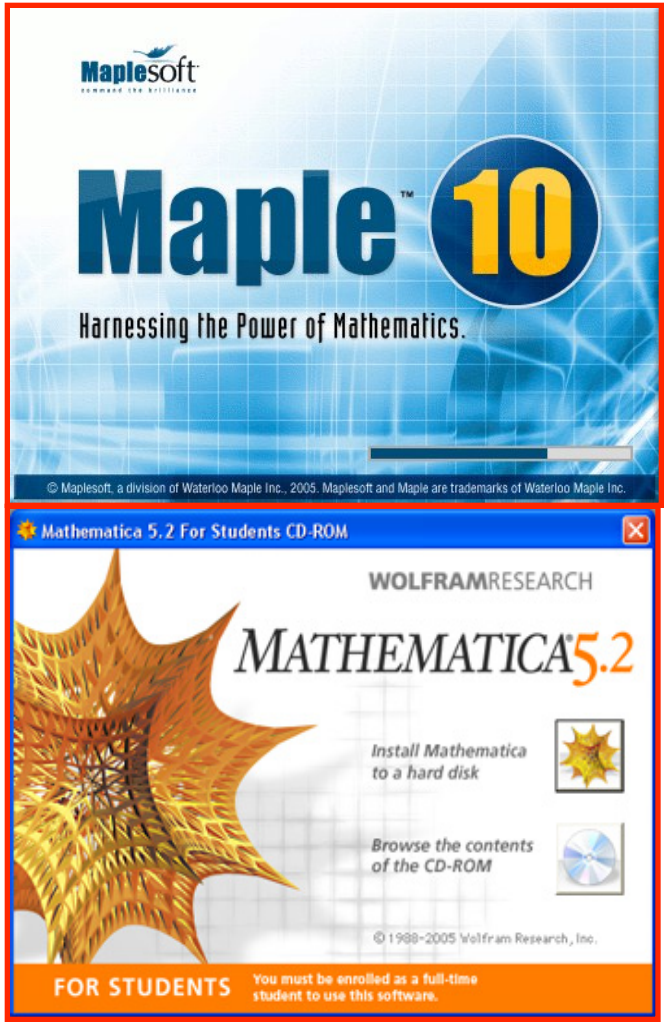
控制系统运行
采集实验数据
监视仪器状态
数据在线分析
…



周期性？

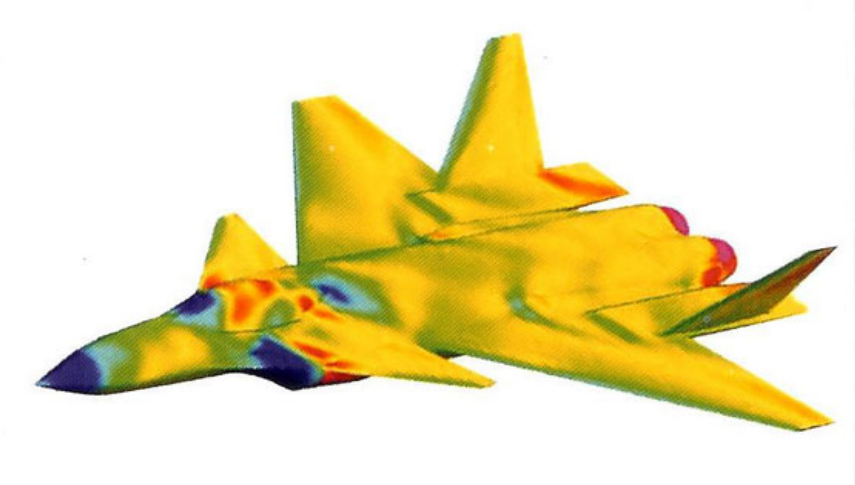
使用快速傅立叶变换(FFT)给出周期性

理论物理

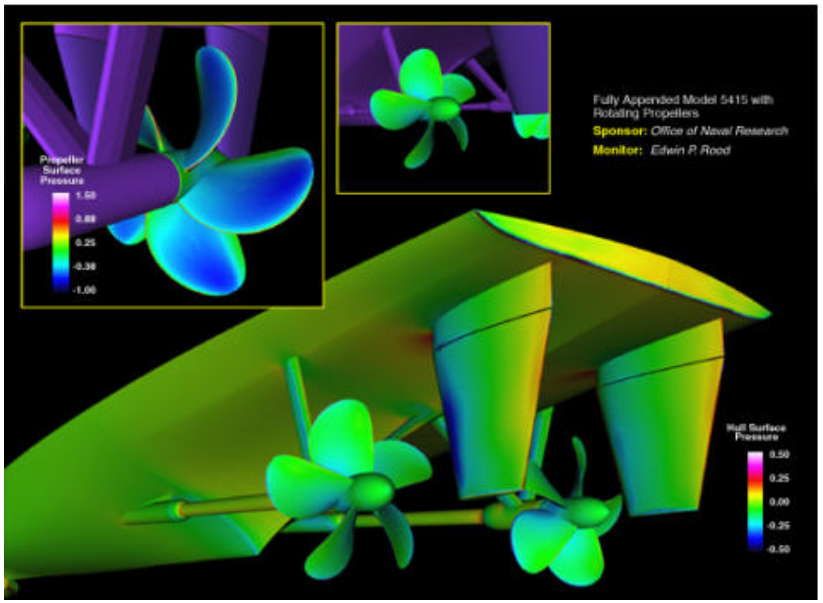


符号运算

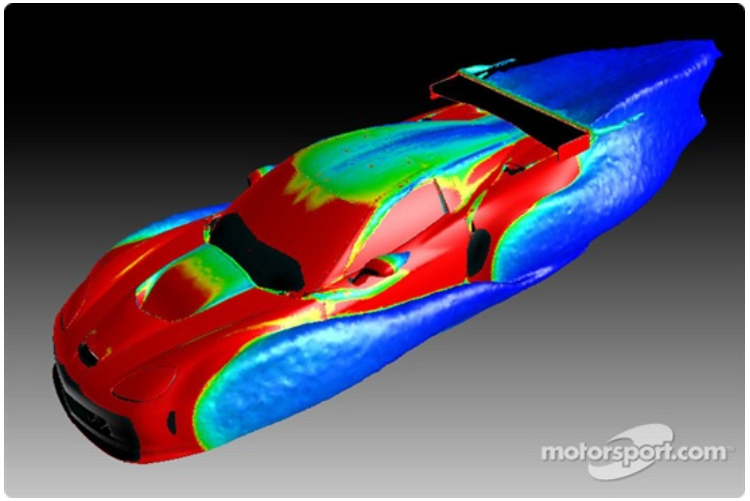
工程领域



J20红外信号模拟 – 红外隐身
解热传导方程



船舶水动力特性计算模拟，提高适航性，航速等。**解流体力学方程**



赛车行驶时气流旋涡的概况：气流流过车轮处开始紊乱并形成旋涡--如图中蓝色湍流所示；气流流过车顶时还保持良好秩序，经过尾翼下方时迅速紊乱并形成巨大的旋涡--这也是赛车前进阻力的最大源泉。 **解空气动力学方程**

金融物理

金融物理学的英文为Econophysics,是由波士顿大学的物理学教授H.E. Stanley 在1995 年首先提出的, 从而解决了“ 为什么物理专业的学生可以从事金融学研究并取得物理学位”这一实际问题。

金融物理学是用统计物理、理论物理、复杂系统理论、非线性科学、应用数学等的概念、方法和理论研究金融市场通过自组织而涌现的宏观规律及其复杂性的一门新兴交叉学科。简言之, 金融物理学家将金融市场看作一个复杂系统, 把其中的各种数据如个股价格、指数、房价等看作是物理实验数据, 力图寻找和阐释其中的“ 物理”规律。

Introduction to Computational Physics

- 计算物理学的诞生
- 计算物理学的研究内容和方法
- 计算物理学的发展
- 计算物理学在相关学科中的应用
- 本课程的授课内容、作业和考核方式

Topics Covered in this Course

- Ordinary Differential Equations (ODE)
- Partial Differential Equations (PDE)
- Molecular Dynamics Simulations (MD)
- First-Principles Methods
- Monte Carlo Simulations (MC)
- Finite Elements (FE)

Reference books：

1. ***An Introduction to Computational Physics*, 2nd ed.**
   Tao Pang, Cambridge University Press, 2006 (世界图书出版公司）

2. ***Computational Physics*，2nd ed. J. M. Thijssen,**
Cambridge University Press, 2007 (世界图书出版公司）

3. **《计算物理学》 刘金远、段萍、鄂鹏，科学出版社 2012**

Final grade (tentative):

Final grade = homework (40%) + final exam (60%)

Lectures: blackboard + ppt