中国海洋大学 计算物理基础 课程大纲

英文名称（Computing Physics Basic）

【开课单位】 物理系 【课程模块】物理学

【课程编号】071303101291 【课程类别】 必修

【学时数 】34 【学分数 】 2

一、课程描述

本课程大纲根据 2011 年本科人才培养方案进行修订或制定。

（一） 教学对象

教学对象为物理学专业、光信息科学专业大学四年级学生。

（二）教学目标及修读要求

1、教学目标

1) 使学生能初步地了解和认识物理学基础研究中遇到问题的计算机数值解，帮助同

学们能够借助于计算机初步地解决一些问题，具有一定的分析和解决物理实验

结果的能力、 用计算机演示实验结果的能力、在计算机上展示围观世界的能力。

2) 通过对计算机模拟发展史的介绍，使学生了解计算物理学的思想和计算方法。

2、修读要求

《计算物理学》在高等院校的教学计划中是一门重要的、新兴的基础理论课程，

是培养学生具备基本的科学素质的重要课程之一。这是一门使用性较强的课程，理

论与科研中的规律和现象密切联系，因此在以课堂讲授为主的前提下，又要注重理

论联系科研，能过对计算物理的学习，使学生们能够掌握分析问题、解决问题的能

力，并培养学生的计算机编程能力开阔眼界，丰富其知识结构，了解这门新兴并且

非常重要的学科。

（三）先修课程

高等数学、计算机编程、大学物理、理论物理、固体物理。

二、教学内容

（一）第一章 绪论

1. 主要内容

计算机模拟的发展史、计算模型的建立以及相互作用势的构造等。

2. 教学要求

通过计算机模拟发展史的介绍理解它怎么随着计算机物理科研发展而发展的，理解

它怎么随着计算机的发展而发展，从而让学生理解将来计算机的发展既迅速而又前景广

阔，所以计算物理即不断更新而又将来越来越重要。 使学生了解将来如果学不好这门课，

不管是物理、化学、生物，生物化学、生物物理等学科的科研都没法开展。

3. 重点和难点

重点：计算机模拟的发展史、计算模型的建立以及相互作用势的构造等。

难点：计算模型的建立。

（二） 第二章 分子动力学模拟

1. 主要内容

有限差分法（包含 Verlet 算法、Gear 预告修正法等）、硬分子模型等.

2. 教学要求

这一章是分子动力学计算机模拟核心，特别是 Verlet 算法、Gear 预告修正法是重点。

通过对这些数值求解方法的介绍，初步理解经典分子动力学的基础知识。

3. 重点和难点

重点：有限差分法（包含 Verlet 算法、Gear 预告修正法等）、硬分子模型等.

难点：有限差分法（包含 Verlet 算法、Gear 预告修正法等）。

（三）第三章 蒙特卡罗方法

1. 主要内容

蒙特卡罗积分、蒙特卡罗游走积分、蒙特卡罗游走取样、METROPOLIS 取样等。

2. 教学要求

蒙特卡罗方法是经典计算机模拟的另一种方法，它的应用也很广泛。它的方法很别致，

给同学们展现出另外的一片天地。

3. 重点和难点

重点： 蒙特卡罗积分、蒙特卡罗游走积分、蒙特卡罗游走取样、 METROPOLIS 取样等。

难点：蒙特卡罗积分、蒙特卡罗取样、METROPOLIS 取样等。

（四）第四章 第一性原理计算机模拟

1. 主要内容

薛定谔方程的数值求解、从头算、密度泛函方法等。

2. 教学要求

这一章是第一性原理计算机模拟，它是近十年发展起来的新兴的一门科学方法。目前一

些重要的计算机模拟研究都是由它来开展和发展起来的，所以让学生有初步了解是很重

要。

3. 重点、难点

重点：薛定谔方程的数值求解、从头算、密度泛函方法。

难点：从头算、密度泛函方法。

三、教学环节及学时分配

本课程总学时 34 学时，其学时分配见下表。

计算物理学课程教学学时分配表

教学内容 总学时

课堂教学学时

课外辅导/课

外实践学时

备注

理论讲授 实践环节

第一章 绪论 6 6

第二章 分子动力学模拟 10 10

第三章 蒙特卡罗方法 10 10

第四章 第一性原理计算机模拟 8 8

合 计 34

四、考核方式及评价体系

1、考核方式：开卷考试

2、评价体系：平时成绩： 40 %，期末考试： 60 %

五、选用教材及必读参考书

1、选用教材: 《计算物理学》自编

2、主要参考书：

1) 《 Computer Simulation of Liquids> M.P. Allen and D. J. Tildesley, Oxford Science

Publications.

2．陈锺贤编著, 计算物理学，哈尔滨工业大学出版社，2001 年

六、撰写成员： 董顺乐

撰写时间：2012 年 5 月 20 日

七、审核人：

八、院（系）学术委员会签章