中国海洋大学 计算物理专业实验 课程大纲

英文名称（Computing Physics Experiments）

【开课单位】 物理系 【课程模块】物理学、计算物理

【课程编号】071304102253 【课程类别】 选修/必修

【学时数 】48 【学分数 】 1.5

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) 使学生能全面地认识和理解数据采集和数值计算，系统地掌握经典和量子计算机

模拟的基本规律，具有一定的分析和解决基础物理科研的能力。

2) 通过对计算机物理学发展史上某些重大发现和发明的介绍以及计算机的发展历

史，使学生了解计算物理学的基本思想和基本编程方法。

2、修读要求

计算物理学与理论物理、实验物理一起构成了现代物理学的三个重要组成部分，

在高等院校的教学计划中是一门重要的基础专业课程。《计算物理学专业实验》 是培

养学生具备基本计算机操作的重要课程之一。这是一门应用性较强的课程，因此在

以简单课堂讲授的前提下，要充分了解学生的上机操作能力不强的实际，有针对性

地和手把手地进行上机操作训练和学习，使学生们能够初步掌握针对具体问题、解

决建模和编程的能力，并培养学生的逻辑思维能力，使学生具有将具体问题放到计

算机上解决的能力。

（三）先修课程

高等数学、大学物理、理论物理、固体物理、计算物理学

二、教学内容

（一）第一章 高等数学中一些问题的计算机数值解

1. 主要内容

微分的数值解、积分的数值解、数组的排列、方程组或矩阵的数值解等。

2. 教学要求

这一章较简单，并且不需要建模，具有编程简单，上机运行程序简单等特点。但这

些问题在物理科研中经常遇到，所以非常重要。 这一章特别适合学生，因为学生的上机

能力较弱，大多数学生就没有在计算机上操作这些数值计算的经验，所以这一章对学生

来说是太重要了。通过这一章的学习，使学生具备初步的上机经验，为下面几章的学习

打下一定的基础。

3. 重点和难点

重点：微分的数值解、积分的数值解、数组的排列、方程组或矩阵的数值解等。

难点：微分的数值解、积分的数值解、方程组或矩阵的数值解等

（二） 第二章 分子动力学计算机模拟

1. 主要内容

Verlet 算法编程、GEAR 预告-修正编程、麦克斯韦速率分布取样、真实小球的经典计

算机模拟等.

2. 教学要求

这一章的教学任务较重，因为学生进入了一个陌生的建模编程上机运行的领域，因而

需要手把手地耐心引导，一遍一遍不言其烦的示范。学生如果能够通过这一章的学习，

就具备了基本计算机模拟能力。

3. 重点和难点

重点： Verlet 算法编程、 GEAR 预告-修正编程、麦克斯韦速率分布取样、真实小球的

经典计算机模拟等.

难点： Verlet 算法编程、 GEAR 预告-修正编程、麦克斯韦速率分布取样、真实小球的

经典计算机模拟等.

（三）第三章蒙 特卡罗法的编程上机

1. 主要内容

蒙特卡罗积分编程、蒙特卡罗随机游走积分取样的编程、 METROPOLIS 随机游走取样

的编程等。

2. 教学要求

这一章也是经典计算机模拟，但是不同于上一章，用的是一套全新的方法。通过这一章

的学习，使同学们进一步理解经典计算机模拟的奥秘，拓展学生们的思路，加强学生们

编程上机能力，熟练编程上机技巧。

3. 重点和难点

重点：蒙特卡罗积分编程、蒙特卡罗随机游走积分取样的编程、METROPOLIS 随

机游走取样的编程等。

难点：蒙特卡罗积分编程、蒙特卡罗随机游走积分取样的编程、METROPOLIS 随

机游走取样的编程等。

（四）第四章 第一性原理的计算机模拟程序熟悉

1. 主要内容

从头算编程框图基本简介、密度泛函编程框图简介、迭代自洽方法编程框图简介等。

2. 教学要求

这一章是薛定谔方程量子力学精确解程序的基本介绍。目前这方面软件已有很多，比如

VASP、Siesta、 Dftb 等。

3. 重点、难点

重点：从头算编程框图基本简介、密度泛函编程框图简介、迭代自洽方法编程框图简介等。

难点：从头算编程框图基本简介、密度泛函编程框图简介、迭代自洽方法编程框图简介等。

三、教学环节及学时分配

本课程总学时 48 学时，其学时分配见下表。

大学物理 I-3 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 高等数学中一些问题的计

算机数值解

12 2 10

第二章 分子动力学计算机模拟 12

12

第三章 蒙特卡罗法的编程上机 12

12

第四章 第一性原理的计算机模拟

程序熟悉

12 12

12

合 计 48

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.《计算物理专业实验》自编教材。

主要参考书：

1. 《Computer Simulation Of Liquids》 M. P. Allen and D.J. Tildesley, Oxford Science Publication.

2. 马文淦编著，《计算物理学》，中国科技大学出版社， 2001 年

六、撰写小组成员：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