

《计算物理》课程教学大纲

一、课程基本信息

英文名称	Computational Physics	课程代码	PHYS2050
课程性质	专业必修课程	授课对象	物理学
学 分	2 学分	学 时	36 学时
主讲教师	丁泓铭	修订日期	2021.9
指定教材	彭芳麟,《计算物理基础》,高等教育出版社,2010年		

二、课程目标

(一) 总体目标:

本课程的知识目标:了解计算物理的发展简史,基本思想及其对现代物理学发展的支撑作用;系统掌握常见数据处理、解(常、偏)微分方程的基本思想,能够熟练使用 MATLAB 解决上述问题。能力目标:提高数据处理和解决实际物理问题的能力,培养科研创新素养,为今后科研和工作起到铺垫作用。素质目标:富有科学精神,勇于在物理学前沿及交叉领域探索与攀登。

(二) 课程目标:

课程目标 1:了解计算物理的发展简史,计算物理与实验物理、理论物理的区别和联系,了解计算物理研究的前沿进展和应用前景;使学生认识到计算物理在现代科学研究领域的重要性,掌握辩证唯物主义基本原理,建立科学的世界观和方法论。

课程目标 2:掌握 MATLAB 的基本使用方法;了解浮点运算与数值计算的误差来源;了解常见的分形结构,并能够利用 MATLAB 进行编程生成几种分形图形;掌握数值微分、数值积分、数据插值、曲线拟合、求方程(组)的根,傅里叶变换等基本算法,能够利用 MATLAB 相关指令进行数值运算;培养和提高学生误差分析和数据处理的能力。

课程目标 3:掌握解常微分方程、偏微分方程的基本思想,能够利用 MATLAB 编程或相关工具箱求解常见的弦振动方程,一维薛定谔方程、拉普拉斯与泊松方程、热传导方程等。培养和提高学术利用计算物理解决实际问题的能力。

(三) 课程目标与毕业要求、课程内容的对应关系

表 1: 课程目标与课程内容、毕业要求的对应关系表

课程目标	对应课程内容	对应毕业要求
------	--------	--------

课程目标 1	第一章 绪论 第八章 蒙特卡洛方法	毕业要求 3: 了解物理学前沿和发展动态, 新技术中的物理思想, 熟悉物理学新发现、新理论、新技术对社会的影响。 毕业要求 8: 具有自主学习和终身学习意识和社会适应能力。
课程目标 2	第二章 MATLAB 简介 第三章 迭代-分形图形 第四章 数值微分与数值积分 第五章 数据处理	毕业要求 2: 掌握数学、物理相关的基础知识、基本物理实验方法和实验技能, 具有运用物理学理论和方法解决问题、解释或理解物理规律。 毕业要求 7: 具有课题调研、设计、数据处理和学术交流能力。
课程目标 3	第六章 解常微分方程 第七章 解偏微分方程	毕业要求 2: 掌握数学、物理相关的基础知识、基本物理实验方法和实验技能, 具有运用物理学理论和方法解决问题、解释或理解物理规律。 毕业要求 7: 具有课题调研、设计、数据处理和学术交流能力。

三、教学内容

第一章 绪论

1. 教学目标

本章要求学生了解计算物理的发展简史, 计算物理与实验物理、理论物理的区别和联系, 了解计算物理研究的前沿进展和应用前景。

2. 教学重难点

无

3. 教学内容

计算物理的内涵，与实验物理、理论物理的区别联系，计算物理出现的时代背景和必然性，计算物理的流程、特点及其应用。

4. 教学方法

教师讲授。

5. 教学评价

无。

第二章 Matlab 简介

1. 教学目标

本章要求学生掌握 MATLAB 的计算功能、编程方法与作图技巧，了解浮点运算与数值计算的误差来源。

2. 教学重难点

MATLAB 编程与矩阵运算。

3. 教学内容

第一节 Matlab 操作界面

学习掌握操作界面介绍，指令窗中的功能，数据存储与显示

第二节 数据格式与算符

学习掌握向量的输入，矩阵，列阵，数据网格，基元列阵，结构数组，字符和文本

第三节 编程与作图

学习掌握编辑程序，调试程序，设置搜索路径，两类程序文件，流程控制，数据输入与输出，作图功能概述，二维曲线作图指令，复数作图，基本的三维图，四维数据的表现——切片函数 slice，复变函数图形

第四节 浮点运算与数值计算的误差

学习浮点数在 MATLAB 中的表示方式，理解 inf, eps, nan 等符号的含义，掌握数值计算中的误差来源及可能避免的方法，了解简单的物理应用：Logistic 模型的周期分岔与混沌现象。

4. 教学方法

教师讲授，师生讨论。

5. 教学评价

课后相应习题，补充习题。

第三章 迭代与分形图形

1. 教学目标

本章主要了解分形的基本知识，训练 MATLAB 的编程能力，对常见分形结构能够计算出其分形维数。

2. 教学重难点

分形结构的编程实现及分形维计算。

3. 教学内容

第一节 迭代与分形

学习掌握迭代与分形，分形树，Sierpinski 三角形，科赫雪花曲线，L 系统

第二节 复变函数迭代

学习掌握 Julia 集，Mandelbrot 集，分形与分形维

4. 教学方法

教师讲授，师生讨论。

5. 教学评价

课后相应习题，补充习题。

第四章 数值微分与数值积分

1. 教学目标

本章要求学生掌握数值微分、积分不同精度的公式及推导过程，能够利用 MATLAB 编程数值求解一元定积分，利用 MATLAB 指令或工具箱求解复杂微分及积分。

2. 教学重难点

不同精度的微分、积分公式，拉普拉斯算符作用于矩阵的数值计算。

3. 教学内容

第一节 数值微分与数值积分

学习掌握数值微分的算法，数值积分的算法

第二节 MATLAB 指令

学习掌握差分运算(diff)，梯度计算(gradient)，离散拉普拉斯算符(del2)，梯形积分(trapz)，累计梯形积分(cumtrapz)，函数积分(quad, quadl)，函数的二重积分(dblquad)，函数的三重积分(triplequad)，用符号工具箱计算微积分

第三节 简单应用

求解环形电流的磁场——物理场的可视化，分子振动的半经典量子化。

4. 教学方法

教师讲授，师生讨论。

5. 教学评价

课后相应习题。

第五章 数据处理

1. 教学目标

本章要求学生掌握数据插值、曲线拟合、求方程（组）的根，傅里叶变换等基本算法，能够利用 MATLAB 相关指令或编程进行相关的数值运算。

2. 教学重难点

数值求解多元方程组的根，快速傅里叶变化的原理及编程实现。

3. 教学内容

第一节 插值

学习掌握插值分类，拉格朗日插值法，分段三次埃尔米特插值，MATLAB 插值指令

第二节 曲线拟合

学习掌握曲线拟合的最小二乘法，多项式拟合，多项式拟合的指令 `polyfit`，图形窗口的曲线拟合功能，指数拟合，线性最小二乘法的一般形式，曲线拟合工具箱

第三节 求方程的零点

学习掌握求单调连续函数 $f(x)$ 的实数根的算法，MATLAB 解方程的指令，搜寻函数的极小值

第四节 快速傅里叶变换

学习掌握离散傅里叶变换，傅里叶级数与傅里叶积分，快速傅里叶变换的 MATLAB 指令，快速傅里叶变换的算法

4. 教学方法

教师讲授，师生讨论。

5. 教学评价

课后相应习题。

第六章 解常微分方程

1. 教学目标

本章要求学生掌握常微分方程的初值问题，边值问题与本征值问题，掌握不同精度的龙格-库塔法数值求解一般初值常微分方程，能够利用 MATLAB 相关指令或编程求解边值和本征值问题。

2. 教学重难点

高阶龙格-库塔法的推导和数值计算，本征值问题的求解。

3. 教学内容

第一节 龙格-库塔法

学习掌握基本思想，二阶龙格-库塔法，三阶与四阶龙格-库塔法，变步长的龙格-库塔法

第二节 常微分方程组的初值问题

学习掌握基本思想，二阶龙格-库塔法，三阶与四阶龙格-库塔法，变步长的龙格-库塔法，用 MATLAB 解常微分方程

第三节 常微分方程物理问题

学习掌握刚性问题，事件，误差，性能，物理应用，刚体绕瞬心的转动方程，弹簧摆动，圆锥陀螺运动

第四节 边值问题和本征值

学习掌握边值问题的直接积分，打靶法求弦振动方程本征值，一维薛定谔方程的定态解，用指令 `bvp4c` 解边值问题与本征值问题，用指令 `bvp4c` 解一维本征值问题，有两个解的边值问题，马蒂厄方程的本征值，艾登方程，Falkner-Skan 边值问题，在 $x=0$ 处有突变的问题

4. 教学方法

教师讲授，师生讨论。

5. 教学评价

课后相应习题。

第七章 解偏微分方程

1. 教学目标

本章要求学生掌握二阶偏微分方程的三种类型及其对应的典型物理问题，能够数值求解简单偏微分方程，了解偏微分方程工具箱的使用。

2. 教学重难点

偏微分方程的数值求解方法和解的稳定性判断。

3. 教学内容

第一节 差分法解热传导方程

学习掌握掌握显式差分公式，隐式公式与平均隐式公式

第二节 差分法解弦振动方程

学习掌握显式格式，初始条件，实例

第三节 差分法与松弛法解椭圆型方程

学习掌握显式差分公式，边界条件，迭代法与松弛法

第四节 偏微分方程的工具箱 (PDETOOL)

学习掌握 PDETOOL 的功能演示，PDETOOL 中方程的输入格式，边界条件，可解问题的分类，解题步骤，解一维与三维问题，拉普拉斯方程与泊松方程，热传导方程，波动方程，平面区域的本征值问题

第五节 特殊函数

学习掌握勒让德函数，贝塞尔函数，调用 MAPLE 计算特殊函数，平面波展开，高斯积分

4. 教学方法

教师讲授，师生讨论。

5. 教学评价

课后相应习题。

第八章 蒙特卡罗方法

1. 教学目标

了解蒙特卡洛方法的发展历史和基本思想，掌握利用蒙特卡洛方法进行数据分析和数值计算；了解蒙特卡洛方法在 Ising 模型等物理前沿问题中的应用。

2. 教学重难点

由均匀分布函数推出任意分布函数，求解 Ising 模型。

3. 教学内容

第一节 蒙特卡罗方法的发展过程

学习掌握蒙特卡罗方法的发展过程

第二节 蒙特卡洛的理论基础

学习掌握大数定理与中心极限定理，随机变量、密度函数与分布函数，随机数与随机抽样，随机数的产生，随机抽样

第三节 蒙特卡洛的应用

学习掌握计算定积分，热力学的平衡态，麦克斯韦速率分布律，链式反应的模拟，迭代函数系统 (IFS)，分形生长模型及 Ising 模型的求解

4. 教学方法

教师讲授，师生讨论。

5. 教学评价

课后相应习题，补充习题。

四、学时分配

表 2: 各章节的具体内容和学时分配表

章节	章节内容	学时分配
第一章	绪论	2
第二章	Matlab 简介	4
第三章	迭代与分形图形	4
第四章	数值微分与数值积分	4
第五章	数据处理	8
第六章	解常微分方程	6
第七章	解偏微分方程	4
第八章	蒙特卡罗方法	4

五、教学进度

表 3: 教学进度表

周次	日期	章节名称	内容提要	授课时数	作业及要求	备注
1		第一章	计算物理的发展简史，计算物理与实验物理、理论物理的区别和联系，计算物理研究的前沿进展和应用前景	2	无	

2-3		第二章	MATLAB 的计算功能、编程方法与作图技巧，浮点运算与数值计算的误差来源	4	本章习题 5, 7, 11, 13, 18, 22, 31	
4-5		第三章	分形的基本知识及编程实现，分形维数的计算	4	本章习题 2, 3, 4	
6-7		第四章	微分、积分不同精度的数值公式的推导、及编程计算	4	本章习题 2, 3, 4	
8-11		第五章	数据插值、曲线拟合、求方程（组）的根，傅里叶变换等基本算法及 MATLAB 编程实现	8	本章习题 2, 4, 8, 11	
12-14		第六章	常微分方程的初值问题，边值问题与本征值问题，不同精度的龙格-库塔法，MATLAB 相关指令或编程求解边值和本征值问题	6	本章习题 1, 2, 4	
15-16		第七章	偏微分方程的数值求解方法和解的稳定性判断	4	本章习题 2, 6, 9	
17-18		第八章	蒙特卡洛方法的发展历史和	4	本章习题 1, 2, 4, 7	

			基本思想，蒙特卡洛方法的数值计算及应用			
--	--	--	---------------------	--	--	--

六、教材及参考书目

(电子学术资源、纸质学术资源等，按规范方式列举)

1. 马文淦，《计算物理学》，科学出版社，2005年
2. 张志涌，《MATLAB 数值计算（中译本）》，北京航空航天大学出版社，2019年
3. Philipp Scherer,《Computational Physics》，Springer, 2013年
4. 温正等，《MATLAB 科学计算》，清华大学出版社，2017年

七、教学方法

(讲授法、讨论法、案例教学法等，按规范方式列举，并进行简要说明)

1. 讲授法 板书和 PPT 结合，兼取传统与现代化教学手段的优势
2. 讨论法 讲解习题、答疑并针对物理应用让学生自由讨论，老师点评

八、考核方式及评定方法

(一) 课程考核与课程目标的对应关系

表 4: 课程考核与课程目标的对应关系表

课程目标	考核要点	考核方式
课程目标 1	相关教学内容	平时+期中+期末成绩
课程目标 2	相关教学内容	平时+期中+期末成绩
课程目标 3	相关教学内容	平时+期中+期末成绩

(二) 评定方法

1. 评定方法

平时成绩：20%，期中考试：30%，期末考试 50%

2. 课程目标的考核占比与达成度分析

表 5: 课程目标的考核占比与达成度分析表

考核占比 课程目标	平时	期中	期末	总评达成度
课程目标 1	20%	20%	20%	课程目标 1 达成度= $\{0.2 \times$ 平时目标 1 成绩 $+0.3 \times$ 期 中目标 1 成绩 $+0.5 \times$ 期末 目标 1 成绩 $\}$ /目标 1 总分。 课程目标 2 达成度= $\{0.2 \times$ 平时目标 2 成绩 $+0.3 \times$ 期 中目标 2 成绩 $+0.5 \times$ 期末 目标 2 成绩 $\}$ /目标 2 总分。 课程目标 3 达成度= $\{0.2 \times$ 平时目标 3 成绩 $+0.3 \times$ 期 中目标 3 成绩 $+0.5 \times$ 期末 目标 3 成绩 $\}$ /目标 3 总分。 总评达成度= $0.2 \times$ 课程目 标 1 的达成度 $+0.4 \times$ 课 程目标 2 的达成度 $+0.4 \times$ 课 程目标 3 的达成度。
课程目标 2	40%	40%	40%	
课程目标 3	40%	40%	40%	

(三) 评分标准

课程 目标	评分标准				
	90-100	80-89	70-79	60-69	<60
	优	良	中	合格	不合格
	A	B	C	D	F
课程 目标 1	完全掌握计算物理的发展简史，计算物理与实验物理、理论物理的区别和联系，计算物理研究的前沿进展和应用前景	较好掌握计算物理的发展简史，计算物理与实验物理、理论物理的区别和联系，计算物理研究的前沿进展和应用前景	基本掌握计算物理的发展简史，计算物理与实验物理、理论物理的区别和联系，计算物理研究的前沿进展和应用前景	了解计算物理的发展简史，大致明白计算物理与实验物理、理论物理的区别和联系	不清楚计算物理的发展简史和计算物理与实验物理、理论物理的区别和联系
课程 目标 2	完全掌握 MATLAB 的基本使用方法，常见的分形结构，并	较好掌握 MATLAB 的基本使用方法，常见的分形结构，并	基本掌握 MATLAB 的基本使用方法，常见的分形结构；	了解 MATLAB 的基本使用方法；了解数值微分、数	不清楚 MATLAB 的基本使用方法；不了解数值微

课程 目标	评分标准				
	90-100	80-89	70-79	60-69	<60
	优	良	中	合格	不合格
	A	B	C	D	F
	能够利用 MATLAB 进行编程生成几种分形图形；完全掌握数值微分、数值积分、数据插值、曲线拟合、求方程（组）的根，傅里叶变换等基本算法，能够利用 MATLAB 相关指令进行相关的数值运算	能够利用 MATLAB 进行编程生成几种分形图形；较好掌握数值微分、数值积分、数据插值、曲线拟合、求方程（组）的根，傅里叶变换等基本算法，能够利用 MATLAB 相关指令进行相关的数值运算	基本掌握数值微分、数值积分、数据插值、曲线拟合、求方程（组）的根，傅里叶变换等基本算法，能够利用 MATLAB 相关指令进行相关的数值运算	值积分、数据插值、曲线拟合、求方程（组）的根，傅里叶变换等基本算法，能够利用 MATLAB 相关指令进行简单的数值运算	分、数值积分、数据插值、曲线拟合、求方程（组）的根，傅里叶变换等基本算法
课程 目标 3	完全掌握求解常微分方程、偏微分方程的基本思想，能够利用 MATLAB 编程或相关工具箱求解常见的弦振动方程，一维薛定谔方程、拉普拉斯与泊松方程、热传导方程等	较好掌握求解常微分方程、偏微分方程的基本思想，能够利用 MATLAB 编程或相关工具箱求解常见的弦振动方程，一维薛定谔方程、拉普拉斯与泊松方程、热传导方程等	基本掌握解常微分方程、偏微分方程的思想，能够利用 MATLAB 编程或相关工具箱求解常见的弦振动方程，一维薛定谔方程等	了解求解常微分方程、偏微分方程的思想，能够利用相关工具箱求解常见的弦振动方程，一维薛定谔方程等	不清楚求解常微分方程、偏微分方程的思想，不能够数值求解常见的弦振动方程，一维薛定谔方程等