

# 2023 《计算物理 B》

## 1. 绪论

一些概念：计算物理的定义；与实验物理和理论物理相比，优势与局限；计算物理的作用。

## 2-3. 蒙特卡洛方法及应用

蒙特卡洛方法的定义、基本思想及理论基础；随机数的种类，产生伪随机数的方法，伪随机数的均匀性和独立性检验。

叠加原则；抽样方法：直接抽样、变换抽样和舍选法（第一类）；蒙卡中减少方差的技巧：分层抽样和重要抽样法；随机游走模型；Metropolis 方法。

积分计算（平均值法和投点法）；统计力学中的蒙卡方法：Ising 模型。

## 4. 有限差分法

了解有限差分法的一些具体操作。

有限差分方程组的求解方法；三种迭代法。

## 5. 有限元素法

了解有限元素法的基本思想和一般步骤；有限元素法和有限差分法的比较。

## 6. 分子动力学方法

Verlet 算法；元胞及周期性边界条件；分子力场；与截断距离相关的概念；时间步长的选择；约束动力学；SHAKE 算法；微正则系综和正则系综分子动力学的模拟流程；分子动力学和蒙卡的比较；分子动力学的局限。

## 7. 高性能计算

串行计算和并行计算中的一些基本概念；并行效率；MPI 并行编程模式；基本 MPI 函数；两种分子动力学并行算法。

## 8-9. 计算机代数及 Mathematica

基本概念

## 10. 机器学习

机器学习的定义；机器学习与深度学习和人工智能的关系；机器学习的类型。

线性回归：基本定义；损失函数、代价函数和目标函数；最小二乘法和梯度下降；梯度下降的三种形式；学习率；数据规范化；欠拟合和过拟合；正则化；R 方

逻辑回归：基本思想；sigmoid 函数及作用；逻辑回归的代价函数。

决策树：基本概念；决策树基本类型；信息增益、信息增益率和 Gini 指数；剪

枝。

集成学习：基本原理；集成学习框架，装袋法和提升法；随机森林和自适应增强算法；

神经网络：定义；基本结构；反向传播算法；

聚类：定义；聚类尺度函数；主要聚类算法。

降维：主成分分析基本原理；得到主成分的步骤。

1. 平时的作业和相关的知识点就是本课程的重点；
2. 题型主要包括：（1）类似平时作业的程序题，但考试不要求写出完整代码，只要写或者画出程序流程图；（2）列出一段代码，进行注释；（3）概念题（平时作业没有布置），比如一些方法的基本思想和实现步骤，并行编程的一些基本概念等，以填空、简答和判断题等题型进行考察。