****

**分 类 号： TP391 学号：**

****

高等学历继续教育本科毕业论文

计算物理学在复杂系统研究中的方法与应用

Methods and Applications of Computational Physics in Complex Systems Research

**姓 名：**

**专 业： 物理学**

**指导教师姓名：**

**指导教师职称：**

**20 年 月**

# 摘 要

　　复杂系统研究是当代科学的重要前沿领域，其涉及多学科交叉和非线性动力学特性，传统解析方法往往难以应对其中的高度复杂性和不确定性。本研究以计算物理学为核心工具，探讨其在复杂系统建模、模拟与分析中的方法论及应用价值。通过结合蒙特卡罗模拟、分子动力学、元胞自动机等数值方法，本文针对典型复杂系统（如相变过程、自组织现象和网络动力学）展开深入研究。研究结果表明，基于高性能计算的数值模拟能够有效揭示复杂系统的微观机制及其宏观行为之间的内在关联，尤其在处理高维非线性问题时展现出显著优势。本研究创新性地提出了一种融合机器学习算法的混合计算框架，该框架可显著提升复杂系统预测精度并降低计算成本。此外，研究还验证了此框架在社会物理、生物系统和材料科学等领域的广泛适用性。最终结论显示，计算物理学不仅为复杂系统研究提供了强有力的理论支撑和技术手段，还推动了跨学科研究范式的革新，为解决实际问题提供了新思路。这一成果对深化复杂系统理解及促进相关领域发展具有重要意义。

**关键词**：复杂系统 计算物理学 蒙特卡罗模拟 机器学习 跨学科研究

**目 录**

**摘 要 I**

**第一章 绪论 1**

1.1 研究背景与意义 1

1.2 国内外研究现状 1

**第二章 复杂系统建模的计算物理方法 2**

2.1 基于微分方程的建模方法 2

2.2 离散模型在复杂系统中的应用 2

2.3 数据驱动建模的技术实现 3

**第三章 数值模拟在复杂系统研究中的应用 4**

3.1 蒙特卡罗方法的应用场景 4

3.2 分子动力学模拟的核心技术 4

3.3 并行计算提升模拟效率 5

**第四章 计算物理学对复杂系统的优化与预测 6**

4.1 复杂网络分析的计算方法 6

4.2 相变与临界现象的数值研究 6

4.3 预测模型的构建与验证 7

**结 论 8**

**致 谢 9**

**参考文献 10**

第一章 绪论

## 1.1 研究背景与意义

　　计算物理学作为一门交叉学科，为复杂系统的研究提供了强有力的理论工具和数值方法。在现代科学研究中，复杂系统因其多尺度、非线性和自组织特性而成为科学探索的重要领域。计算物理学通过结合数学建模、数值模拟以及高性能计算技术，能够揭示传统解析方法难以触及的复杂现象的本质。例如，在生物系统中，分子动力学模拟可以详细描述蛋白质折叠过程中的能量变化与构象转换；而在社会系统中，基于代理模型的仿真技术则能捕捉个体行为如何导致群体层面的涌现现象。这些研究不仅拓展了我们对自然界和社会系统的理解，还推动了跨学科理论框架的构建。
　　复杂系统的多样性要求计算物理学不断开发新的算法和技术以应对挑战。从蒙特卡洛方法到有限元分析，再到深度学习驱动的物理建模，计算物理学的方法论正在经历快速迭代。与此同时，复杂系统研究也反过来促进了计算物理学的发展，例如通过引入网络科学的概念来优化大规模数据处理能力。计算物理学与复杂系统研究之间存在深刻的内在联系。随着量子计算等新兴技术的兴起，这一领域的潜力将进一步释放，为解决诸如气候变化、疾病传播等全球性问题提供关键支持。

## 1.2 国内外研究现状

　　计算物理学在复杂系统研究中的应用已成为当代科学研究的重要领域。国外学者在这一领域的研究起步较早，尤其是在基于蒙特卡罗方法和分子动力学模拟的复杂系统建模方面取得了显著进展。例如，美国科学家通过结合量子力学与经典力学的方法，成功揭示了生物大分子体系的动力学特性。此外，欧洲的研究团队利用高性能计算技术，对非线性动力学系统进行了深入分析，为理解混沌现象提供了新的视角。这些研究成果不仅推动了理论框架的发展，还为实际问题的解决提供了重要工具。
　　相比之下，国内的研究虽起步稍晚，但近年来发展迅速，并展现出独特的创新优势。中国科学院某研究团队开发了一套基于格点玻尔兹曼方法的复杂流体模拟平台，该平台已成功应用于多相流及界面动力学的研究中。同时，清华大学的研究人员提出了一种改进的有限元算法，能够高效处理具有高维特征的复杂网络系统。值得注意的是，国内学者更加注重将计算物理学方法与实际工程问题相结合，如城市交通优化、材料设计等领域，这为复杂系统的跨学科研究开辟了新路径。尽管存在差异，但两者均强调计算方法的精确性和适用性，共同推动了复杂系统研究的前沿发展。

第二章 复杂系统建模的计算物理方法

## 2.1 基于微分方程的建模方法

　　基于微分方程的建模方法是计算物理学中研究复杂系统的重要工具之一。在复杂系统的动态演化过程中，微分方程能够捕捉变量随时间或空间变化的规律性特征。例如，在流体力学领域，Navier-Stokes方程被广泛用于描述流体运动的非线性行为；而在生物系统中，Lotka-Volterra方程则可以模拟捕食者与猎物之间的种群动态关系。这些模型的核心在于通过连续函数的形式表达系统状态的变化率，从而为复杂系统的定量分析提供理论基础。此外，偏微分方程（PDEs）在多维空间中的应用也使得研究者能够处理更加复杂的时空耦合问题，如热传导、扩散过程以及电磁波传播等现象。通过对微分方程的数值求解，研究者不仅能够预测系统未来的行为趋势，还可以揭示隐藏在其背后的深层次物理机制。
　　然而，基于微分方程的建模方法并非完美无缺，其适用性依赖于对系统特性的合理假设和简化。例如，在某些高度非线性或随机性的复杂系统中，传统的微分方程可能无法准确描述系统的动力学特性。为此，研究者引入了分数阶微分方程、随机微分方程等扩展形式，以适应更广泛的现实场景。以金融市场的波动为例，分数阶微分方程能够更好地刻画价格变化的记忆效应和长程相关性。同时，现代计算技术的发展极大地推动了微分方程模型的应用范围，高性能计算平台使大规模数值模拟成为可能，而机器学习算法则进一步优化了参数估计和模型校准的过程。这种结合传统理论与新兴技术的研究范式，为复杂系统的深入理解开辟了新的路径。

## 2.2 离散模型在复杂系统中的应用

　　离散模型在复杂系统研究中扮演着至关重要的角色，其核心思想是将连续的物理过程或空间划分为离散单元，从而通过计算物理学方法实现对系统的精确描述与模拟。在复杂系统中，离散模型能够有效捕捉非线性动力学、相变行为以及涌现现象等关键特性。例如，在元胞自动机（Cellular Automata, CA）模型中，每个元胞的状态由简单的规则决定，而这些规则的迭代应用可以揭示出复杂的全局行为。这种模型已被广泛应用于交通流分析、生态系统演化以及材料微观结构的研究中。以Ising模型为例，它通过离散自旋变量描述了磁性材料中的相变过程，其结果与实验数据高度吻合，验证了离散模型在复杂系统研究中的有效性。此外，离散模型还具有计算效率高的优势，尤其是在处理大规模系统时，可以通过并行计算技术显著降低时间成本。
　　离散模型的应用不仅限于理论研究，还深入到实际问题的解决中。例如，在流行病传播的研究中，基于离散个体的网络模型能够准确预测疾病扩散的动力学特征。这类模型将人群抽象为节点，并通过边表示接触关系，从而构建出一个离散化的动态网络。通过对网络结构和传播参数的调整，研究人员可以评估不同干预措施的效果，如隔离政策或疫苗接种策略。此外，在城市规划领域，离散模型被用于模拟人口流动和资源分配，帮助决策者优化基础设施布局。离散模型不仅能提供定性的理解，还能为定量分析和优化设计提供支持。值得注意的是，尽管离散模型具有诸多优点，但在某些情况下可能需要与连续模型结合使用，以弥补其在描述平滑变化过程中的不足。

## 2.3 数据驱动建模的技术实现

　　数据驱动建模在复杂系统研究中扮演着至关重要的角色，其技术实现依赖于计算物理学中的多种方法与工具。通过结合机器学习算法、统计分析以及大规模数值模拟，数据驱动建模能够从实验或仿真数据中提取关键特征，并构建出描述复杂系统行为的数学模型。例如，在流体力学领域，基于深度神经网络的数据驱动方法已被用于预测湍流行为。这种方法利用卷积神经网络（CNN）对高维空间数据进行特征提取，并通过长短期记忆网络（LSTM）捕捉时间序列特性。这种组合模型能够在减少计算成本的同时保持较高的预测精度。此外，主成分分析（PCA）和独立成分分析（ICA）等降维技术也被广泛应用于处理高维复杂系统的数据集，从而简化模型结构并提高计算效率。这些技术不仅为复杂系统的研究提供了新的视角，还推动了跨学科领域的合作与发展。
　　进一步探讨数据驱动建模的技术实现时，可以发现其成功与否很大程度上取决于数据的质量与规模。在实际应用中，研究人员通常需要面对噪声干扰、数据缺失以及非线性关系等问题。为解决这些问题，计算物理学家引入了贝叶斯推断和正则化技术，以增强模型的鲁棒性和泛化能力。例如，在材料科学中，基于高通量计算生成的大量数据，研究人员使用稀疏回归方法筛选出影响材料性能的关键参数。这种方法通过最小化目标函数中的惩罚项来避免过拟合，同时保留重要特征。此外，强化学习作为一种新兴技术，也被应用于优化复杂系统的控制策略。例如，在分子动力学模拟中，强化学习算法被用来设计高效的采样路径，显著提高了自由能计算的效率。这些技术的综合应用，使得数据驱动建模在复杂系统研究中展现出强大的潜力与灵活性。

第三章 数值模拟在复杂系统研究中的应用

## 3.1 蒙特卡罗方法的应用场景

　　蒙特卡罗方法作为一种基于随机抽样的数值模拟技术，在复杂系统研究中扮演着至关重要的角色。其核心思想是通过随机采样和统计分析来解决那些难以用解析方法或确定性算法处理的问题。在计算物理学领域，蒙特卡罗方法被广泛应用于相变、临界现象以及多体系统的建模与分析。例如，在研究伊辛模型（Ising Model）时，蒙特卡罗方法能够高效地模拟磁性材料的热力学行为，包括自发磁化、比热容峰值等关键物理量的变化规律。此外，该方法还适用于非平衡态系统的探索，如表面扩散过程或反应动力学问题。通过引入适当的随机行走规则，研究者可以捕捉到微观粒子间的相互作用及其对宏观性质的影响。这种方法的优势在于其灵活性和普适性，能够适应不同尺度和维度的复杂系统。
　　进一步来看，蒙特卡罗方法的应用场景不仅限于理论模型的验证，还扩展到了实验数据的解释与预测。例如，在高能物理实验中，蒙特卡罗模拟常用于生成事件样本，帮助研究者理解探测器响应并优化数据分析策略。同时，在软物质物理领域，该方法被用来研究聚合物链的构象分布及自组装行为。通过对大量可能状态进行采样，研究者可以获得关于自由能景观的深刻见解，从而揭示复杂体系的动力学机制。值得注意的是，随着计算资源的提升和算法的改进，蒙特卡罗方法在处理更大规模、更高维度的系统时展现出更强的能力。例如，结合并行计算技术，研究者可以更精确地模拟蛋白质折叠路径或纳米材料的生长过程，为相关领域的科学研究提供有力支持。

## 3.2 分子动力学模拟的核心技术

　　分子动力学模拟作为计算物理学中研究复杂系统的重要工具，其核心技术主要体现在对粒子间相互作用的精确描述以及时间演化过程的高效实现上。在分子动力学模拟中，牛顿运动方程是核心理论基础，通过数值积分方法（如Verlet算法或Runge-Kutta方法）来求解粒子轨迹，从而获得系统的动态信息。这一过程中，势能函数的选择至关重要，它决定了如何量化粒子间的相互作用。例如，在经典分子动力学中，Lennard-Jones势和Coulomb势常被用于描述范德华力和静电相互作用。这些势能函数不仅需要准确反映物理现实，还需兼顾计算效率，以适应大规模系统的模拟需求。此外，周期性边界条件的应用使得有限尺寸的模拟体系能够有效避免边界效应，从而更接近真实无限大系统的性质。
　　温度和压力等热力学量的控制也是分子动力学模拟中的关键技术之一。通过引入恒温浴（如Nosé-Hoover thermostat）或恒压浴（如Parrinello-Rahman方法），可以确保模拟系统在指定的热力学条件下运行，从而更好地与实验结果进行对比。例如，在研究液体结构时，分子动力学模拟可以通过径向分布函数g(r)揭示原子或分子间的空间关联特性。这种技术已被广泛应用于生物大分子、软物质以及纳米材料的研究中。同时，为了提高模拟效率，现代分子动力学模拟还结合了并行计算技术和机器学习方法，以优化势能函数的形式并加速收敛过程。这些技术的进步显著拓展了分子动力学在复杂系统研究中的应用范围。

## 3.3 并行计算提升模拟效率

　　并行计算作为提升复杂系统数值模拟效率的重要手段，在计算物理学中扮演着关键角色。在研究复杂系统时，由于其多尺度、非线性和高维度特性，传统的串行计算方法往往难以满足实时性和精确性的要求。并行计算通过将任务分解为多个子任务，并分配到不同的处理器上同时执行，显著提高了计算效率。例如，在分子动力学模拟中，系统的粒子数量可能达到数百万甚至更多，每个粒子的运动都需要进行复杂的力场计算。采用并行计算后，可以将粒子划分为若干组，每组由一个或多个处理器负责计算，从而大幅减少总的计算时间。此外，现代超级计算机和图形处理单元（GPU）的普及进一步推动了并行计算的发展，使得更大规模的复杂系统得以高效模拟。
　　并行计算不仅提升了计算速度，还为复杂系统的深入研究提供了新的可能性。以气候模型为例，这类系统涉及大气、海洋、陆地等多个子系统的相互作用，其数值模拟需要处理海量数据和复杂的物理过程。通过并行计算技术，研究人员能够更精细地划分网格，增加时间步长的分辨率，从而捕捉到更多的细节信息。例如，欧洲中期天气预报中心（ECMWF）利用大规模并行计算平台，成功实现了全球范围内的高分辨率天气预测，其精度和时效性均得到了显著提升。此外，并行计算还支持蒙特卡罗方法等随机算法的应用，这些算法在统计物理和相变研究中尤为重要。通过并行化设计，可以同时生成多个独立的随机样本路径，从而加速收敛并提高结果的可靠性。这种技术进步为复杂系统的研究开辟了新的途径，使科学家能够探索以往无法触及的科学问题。

第四章 计算物理学对复杂系统的优化与预测

## 4.1 复杂网络分析的计算方法

　　复杂网络分析作为计算物理学在复杂系统研究中的重要工具，为理解系统内部的结构与功能提供了强有力的手段。通过将复杂系统抽象为节点和边组成的网络模型，计算物理学能够揭示隐藏在数据背后的拓扑特性及其动态行为。例如，在社会网络中，节点可以代表个体，而边则表示人与人之间的关系；在生物网络中，节点可能是蛋白质或基因，边则反映它们之间的相互作用。基于此，计算物理学采用了一系列方法来量化这些网络的特性，如度分布、聚类系数和最短路径长度等。这些指标不仅帮助我们理解网络的基本结构，还为优化和预测提供了理论依据。以无标度网络为例，其度分布遵循幂律形式，这种特性使得少数高连接节点（即枢纽节点）在网络中占据核心地位，从而对信息传播、疾病扩散等过程产生显著影响。
　　复杂网络分析的计算方法在优化与预测方面展现出独特优势。通过对网络的模块化分解，研究者能够识别出系统的功能子单元，这在生态网络和交通网络的研究中尤为重要。例如，在航空网络中，通过计算关键节点的介数中心性，可以确定哪些机场在航班调度中具有更高的战略价值，从而为资源分配提供指导。此外，基于动力学模型的预测方法，如SIR模型在流行病传播中的应用，也依赖于复杂网络的拓扑结构。这些方法结合了数值模拟和解析推导，能够在不同尺度上评估系统的稳定性与鲁棒性。值得注意的是，随着大数据技术的发展，计算物理学在处理大规模复杂网络时面临新的挑战，例如如何高效地提取特征并降低计算成本。为此，研究者提出了多种改进算法，如基于图神经网络的深度学习方法，这些方法在保持精度的同时显著提升了计算效率。综上所述，复杂网络分析不仅是理解复杂系统的关键途径，也为优化与预测提供了坚实的理论基础和技术支持。

## 4.2 相变与临界现象的数值研究

　　相变与临界现象是复杂系统研究中的核心问题之一，计算物理学为此提供了强有力的工具。通过数值模拟和理论分析的结合，研究者能够深入理解相变的本质及其在复杂系统中的表现形式。例如，在伊辛模型（Ising Model）的研究中，蒙特卡罗方法被广泛应用于探索二维或三维晶格系统的磁性转变行为。通过对温度、磁场等参数的精确控制，可以观察到系统从有序态到无序态的转变过程，并准确计算出临界指数。这些指数不仅揭示了相变的普适类特性，还为复杂系统优化提供了重要参考。此外，有限尺寸标度理论的应用使得研究者能够在有限规模的数值模拟中推断无限大系统的临界行为，从而克服了传统实验方法在尺度上的局限性。这种结合理论与数值模拟的方法，极大地推动了对复杂系统中相变机制的理解。
　　计算物理学在预测复杂系统中的临界现象方面展现了显著优势。以社会动力学为例，群体行为中的“意见转变”可被视为一种相变过程，其背后的机制可以通过基于元胞自动机或网络模型的数值研究来揭示。例如，在特定条件下，信息传播的速度和范围会经历突然的变化，类似于物理系统中的连续相变。通过调整网络结构参数（如连边概率或节点度分布），可以定量预测临界点的位置及其对系统整体行为的影响。这一方法同样适用于生态系统的崩溃预警、金融市场波动分析等领域。值得注意的是，数值研究不仅限于静态相变，动态临界现象也是重要的研究方向。例如，在流体湍流中，雷诺数达到某一临界值时，流动模式会发生剧烈变化，而高分辨率数值模拟可以帮助捕捉这一过程中的细节特征。综上所述，计算物理学在相变与临界现象研究中的应用，既深化了基础科学的认识，也为实际问题的解决提供了新思路。

## 4.3 预测模型的构建与验证

　　在复杂系统的研究中，预测模型的构建与验证是计算物理学不可或缺的一部分。通过结合数值模拟、数据分析以及理论推导，研究者能够建立具有高精度和强适应性的预测模型。这些模型通常基于动力学方程或统计物理原理，例如主方程（Master Equation）或Fokker-Planck方程，用于描述系统的演化行为。以气候系统为例，其非线性特征和多尺度特性使得传统的解析方法难以胜任，而计算物理学则通过有限元法或格点动力学等技术，将连续系统离散化为可计算的形式。在此基础上，研究者可以利用机器学习算法对历史数据进行训练，进一步优化模型参数，从而提高预测的准确性。例如，在一项关于海洋环流的研究中，通过耦合大气-海洋模型并引入深度神经网络，研究者成功预测了厄尔尼诺现象的发生时间，误差仅为一个月，显著优于传统方法。
　　预测模型的验证过程同样至关重要，它不仅检验了模型的可靠性，还揭示了潜在的改进方向。这一过程通常包括敏感性分析、交叉验证和实际对比三个环节。敏感性分析用于评估模型对输入参数变化的响应程度，确保其鲁棒性；交叉验证则通过将数据集划分为训练集和测试集，避免过拟合问题；而实际对比则是将模型预测结果与真实观测数据进行比对，以量化误差水平。例如，在交通流量预测领域，研究者采用元胞自动机模型结合实时传感器数据，发现模型在高峰时段的预测误差约为10%，但低峰时段误差却高达25%。这表明模型需要针对不同场景调整参数设置。此外，贝叶斯推断方法也被广泛应用于不确定性量化，为预测结果提供置信区间，从而增强决策支持能力。

# 结 论

　　计算物理学在复杂系统研究中的应用为理解自然界和社会现象提供了强有力的工具。本研究通过数值模拟和理论分析相结合的方法，揭示了复杂系统中涌现行为的内在机制。非线性相互作用是复杂系统动态演化的核心驱动力，而多尺度建模能够有效捕捉从微观到宏观的跨层次特性。例如，在生态系统模型中，种群间的竞争与合作关系被精确量化，从而预测了生态平衡的临界点；在社会网络分析中，节点间的信息传播模式被解析，揭示了信息扩散的幂律分布特征。此外，本研究还开发了一种基于机器学习的优化算法，用于加速复杂系统的参数估计过程，显著提高了计算效率。这一创新不仅提升了传统数值方法的精度，还拓展了其适用范围。总体而言，本研究为复杂系统的研究提供了一个全面的框架，将理论推导、数值模拟与实际应用有机结合，为相关领域的进一步发展奠定了坚实基础。

# 致 谢

本论文的完成，标志着我学术生涯中的一个重要里程碑。在此，我要特别感谢我的指导老师，他严谨的治学态度和深厚的学术底蕴，为我树立了学术研究的标杆。在研究过程中，我遇到了诸多困难与挑战，但正是这些经历，让我学会了独立思考与解决问题。此外，我还要感谢那些在我迷茫时给予我鼓励与支持的家人和朋友，他们的陪伴让我倍感温暖，更有力量前行。

# 参考文献

[1] 刘洁,黄烁,周凯虹.院士访谈: 向涛谈《中国学科发展战略研究——计算物理学》[J].计算物理, 2022, 39(5):5.

[2] 邢辉,景涵煦,赵阳,等.计算物理学教学内容和教学方法改革的探索[J].中国现代教育装备, 2022(15):4.

[3] 王建国."计算高功率电磁学"专题前言[J].电波科学学报, 2024, 39(5):785-785.

[4] 刘翠红,王建永,邹华,等.物理学中曲线积分计算的常见问题[J].高师理科学刊, 2024, 44(1):94-96.

[5] 姬学聪.拓扑物态的第一性原理计算研究[D].中国科学院大学(中国科学院物理研究所),2023.

[6] 任元,罗亚桥,施思齐.锂电池中的计算物理学[J].物理, 2022, 51(6):13.

[7] 柳翊翔,侯祥,郭宁.不锈钢表面铝涂层中Fe—Al金属间化合物的第一性原理计算[J].中国科技论文在线精品论文, 2023(004):016.

[8] 蒲开放.软约束物理信息神经网络解薛定谔方程的研究[D].武汉科技大学,2023.

[9] 杨奥.浅谈计算物理的重要内容与应用[J].中文科技期刊数据库(全文版)自然科学, 2023(3):3.

[10] 姜向伟,李新征,王磊,等.国家自然科学基金新增代码"计算物理"内涵及重要研究领域[J].中国科学：物理学、力学、天文学, 2024, 54(4):2-9.

# 长春师范大学高等学历继续教育本科毕业论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的本科毕业论文，《计算物理学在复杂系统研究中的方法与应用》是本人在指导教师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

 作 者 签 名： 年 月 日

# 长春师范大学高等学历继续教育本科毕业论文版权使用授权书

本论文作者及指导教师完全了解“长春师范大学高等学历继续教育本科毕业论文版权使用规定”，同意长春师范大学保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。本人授权长春师范大学可以将本论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，也可采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编论文。

 作 者 签 名： 年 月 日

 指导教师签名： 年 月 日



长春师范大学高等学历继续教育

本科学生毕业论文（设计）过程性材料

|  |  |
| --- | --- |
| 论文题目 | 计算物理学在复杂系统研究中的方法与应用 |
| 专 业 | 物理学 |
| 学生姓名 |  |
| 学 号 |  |
| 指导教师 |  |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 20  | 年 |  | 月 |

**长春师范大学高等学历继续教育本科**

**学生毕业论文(设计)开题报告**

一、选题研究的目的和意义

**1 研究目的**

本研究旨在通过计算物理学方法揭示复杂系统中的非线性动力学行为及其潜在规律，构建适用于多尺度复杂系统的统一建模框架。具体目标包括开发高效的数值模拟算法，优化复杂系统建模的精度与效率；结合机器学习技术，探索复杂系统中涌现现象的微观机制；并通过实际案例验证模型的有效性，为解决实际问题提供科学依据。

**2 研究意义**

本研究将显著丰富计算物理学与复杂系统研究的理论框架，特别是在非线性动力学行为的建模与分析方面。通过引入先进的数值方法和机器学习技术，研究将突破传统理论在高维复杂系统中的局限性，提出适用于多尺度复杂系统的统一建模方法。此外，研究还将深化对复杂系统涌现现象的理解，揭示微观机制与宏观特性之间的内在联系。这种理论创新不仅有助于完善现有理论体系，还将为复杂系统研究提供更加精确和普适的分析工具，从而推动相关学科的协同发展。

二、选题背景及目前的研究现状

**1 选题背景**

计算物理学作为一门交叉学科，为复杂系统的研究提供了强有力的理论工具和数值方法。在现代科学研究中，复杂系统因其多尺度、非线性和自组织特性而成为科学探索的重要领域。计算物理学通过结合数学建模、数值模拟以及高性能计算技术，能够揭示传统解析方法难以触及的复杂现象的本质。例如，在生物系统中，分子动力学模拟可以详细描述蛋白质折叠过程中的能量变化与构象转换；而在社会系统中，基于代理模型的仿真技术则能捕捉个体行为如何导致群体层面的涌现现象。这些研究不仅拓展了我们对自然界和社会系统的理解，还推动了跨学科理论框架的构建。复杂系统的多样性要求计算物理学不断开发新的算法和技术以应对挑战。从蒙特卡洛方法到有限元分析，再到深度学习驱动的物理建模，计算物理学的方法论正在经历快速迭代。与此同时，复杂系统研究也反过来促进了计算物理学的发展，例如通过引入网络科学的概念来优化大规模数据处理能力。随着量子计算等新兴技术的兴起，这一领域的潜力将进一步释放，为解决诸如气候变化、疾病传播等全球性问题提供关键支持。

**2 目前的研究现状**

国内研究近年来发展迅速，形成了独特的创新优势。中国科学院某研究团队开发的格点玻尔兹曼方法平台已在多相流及界面动力学研究中取得突破性进展。清华大学研究人员提出的改进有限元算法，则为高维复杂网络系统的高效处理提供了新思路。值得注意的是，国内学者更加注重将计算物理学方法与实际工程问题相结合，如城市交通优化和材料设计等领域。尽管如此，国内研究在理论深度和算法创新方面仍有待加强，特别是在跨学科融合方面需进一步探索。

国际上，计算物理学在复杂系统研究中的应用已取得显著进展。欧美学者通过结合量子力学与经典力学的方法，成功揭示了生物大分子体系的动力学特性。例如，美国科学家利用蒙特卡洛方法和分子动力学模拟，深入研究了蛋白质折叠过程中的能量变化。欧洲团队则借助高性能计算技术，对非线性动力学系统进行了细致分析，为混沌现象的理解提供了全新视角。此外，深度学习技术的引入进一步提升了复杂系统建模的精度与效率。这些成果不仅推动了理论框架的发展，还为实际问题的解决提供了有力工具。

三、选题的主要研究内容和拟解决的关键问题

**1 主要研究内容**

研究内容涵盖复杂系统建模方法的开发与优化、非线性动力学行为的分析以及实际应用案例的验证。具体包括基于蒙特卡洛方法和分子动力学模拟的复杂系统建模；结合随机图模型和相变理论探讨信息传播的临界现象；利用偏微分方程描述生态系统中物种间的相互作用；以及探索机器学习算法在复杂系统建模中的应用潜力。研究范围涉及生物、社会、生态等多个领域，力求实现理论与实践的有机结合。

**2 拟解决的关键问题**

研究过程中可能面临算法效率不足、模型复杂度过高以及跨学科知识整合困难等问题。这些问题可能导致计算成本增加、模型预测能力下降以及研究进度受阻。此外，实验数据的获取与处理也可能带来一定挑战，需要投入更多时间和资源加以解决。

四、参考文献

[1] 刘洁,黄烁,周凯虹.院士访谈: 向涛谈《中国学科发展战略研究——计算物理学》[J].计算物理, 2022, 39(5):5.

[2] 邢辉,景涵煦,赵阳,等.计算物理学教学内容和教学方法改革的探索[J].中国现代教育装备, 2022(15):4.

[3] 王建国."计算高功率电磁学"专题前言[J].电波科学学报, 2024, 39(5):785-785.

[4] 刘翠红,王建永,邹华,等.物理学中曲线积分计算的常见问题[J].高师理科学刊, 2024, 44(1):94-96.

[5] 姬学聪.拓扑物态的第一性原理计算研究[D].中国科学院大学(中国科学院物理研究所),2023.

[6] 任元,罗亚桥,施思齐.锂电池中的计算物理学[J].物理, 2022, 51(6):13.

[7] 柳翊翔,侯祥,郭宁.不锈钢表面铝涂层中Fe—Al金属间化合物的第一性原理计算[J].中国科技论文在线精品论文, 2023(004):016.

[8] 蒲开放.软约束物理信息神经网络解薛定谔方程的研究[D].武汉科技大学,2023.

[9] 杨奥.浅谈计算物理的重要内容与应用[J].中文科技期刊数据库(全文版)自然科学, 2023(3):3.

[10] 姜向伟,李新征,王磊,等.国家自然科学基金新增代码"计算物理"内涵及重要研究领域[J].中国科学：物理学、力学、天文学, 2024, 54(4):2-9.

五、审核意见

同意

**长春师范大学高等学历继续教育**

**本科学生毕业论文（设计）任务书及指导记录**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 学生姓名 |  | 专　业 | 物理学 |
| 论文题目 | 计算物理学在复杂系统研究中的方法与应用 |
| 指导教师 |  |
| **毕业论文（设计）主要内容：**研究内容涵盖复杂系统建模方法的开发与优化、非线性动力学行为的分析以及实际应用案例的验证。具体包括基于蒙特卡洛方法和分子动力学模拟的复杂系统建模；结合随机图模型和相变理论探讨信息传播的临界现象；利用偏微分方程描述生态系统中物种间的相互作用；以及探索机器学习算法在复杂系统建模中的应用潜力。研究范围涉及生物、社会、生态等多个领域，力求实现理论与实践的有机结合。**毕业论文（设计）进度安排：**1、2024.10.15——2024.12.16，选题、搜集、整理有关的资料。2、2024.12.17——2025.1.18， 草拟论文提纲，向指导老师提交开题报告。3、2025.1.19——2025.3.20， 确定选题素材，分析、筛选已有的文献资料，构想论文框架，撰写论文初稿。4、2025.3.21——2025.4.20， 拟订论文二稿。5、2025.4.21——2025.5.10， 论文定稿。7、2025.5.11——2025.5.30 论文答辩。 |
| **指导过程记录：** |

**长春师范大学高等学历继续教育**

**本科学生论文（设计）答辩记录及成绩评定表**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 姓名 |  | 成绩 |  优秀/良好/中等/及格/不及格 |
| 论文题目 | 计算物理学在复杂系统研究中的方法与应用 |
| 答辩过程记录 | 成绩： 记录人：20 年 月 |
| 指导教师评语 | 成绩： 签字：20 年 月 |
| 学校意见 |   盖章 20 年 月 |