

# 如何在计算物理教学中融入人工智能的应用

刘 敏

北京化工大学数理学院, 北京

收稿日期: 2024年6月4日; 录用日期: 2024年7月8日; 发布日期: 2024年7月12日

## 摘 要

在全球人工智能的大背景下, 随着数据科学和机器学习的融合, 计算物理领域将越来越多地把数据科学和机器学习的方法应用于问题求解。通过数据驱动的方法和机器学习算法, 计算物理可以更好地处理复杂的物理现象, 并从大量的数据中提取有用的信息。如何在高校计算物理教学中融入人工智能是非常必要的, 我们主要从三个方面展开指导学生熟悉计算物理中常用的计算方法; 人工智能训练优化已有的计算方法; 国际合作共建知识共享平台等, 通过这三个方面使得计算物理与物理学、材料科学、化学和生物学等学科进行交叉与合作, 共同解决复杂的科学和工程问题, 推动技术创新和应用拓展。

## 关键词

计算物理, 人工智能, 计算方法, 智能优化, 国际合作

# How to Integrate the Application of Artificial Intelligence into Computational Physics Education

Min Liu

College of Mathematics and Physics, Beijing University of Chemical Technology, Beijing

Received: Jun. 4<sup>th</sup>, 2024; accepted: Jul. 8<sup>th</sup>, 2024; published: Jul. 12<sup>th</sup>, 2024

## Abstract

In the context of global artificial intelligence, with the fusion of data science and machine learning, the field of computational physics will increasingly apply methods from data science and machine learning to problem-solving. Through data-driven approaches and machine learning algorithms, computational physics can better handle complex physical phenomena and extract useful infor-

mation from large datasets. Integrating artificial intelligence into university-level computational physics education is highly necessary. We primarily focus on three aspects: guiding students to become familiar with commonly used computational methods in computational physics; training artificial intelligence to optimize existing computational methods; and fostering international cooperation to build knowledge-sharing platforms. Through these three aspects, computational physics can engage in cross-disciplinary collaboration with physics, materials science, chemistry, biology, and other fields, jointly addressing complex scientific and engineering problems, and promoting technological innovation and application expansion.

## Keywords

Computational Physics, Artificial Intelligence, Computational Methods, Training Artificial Intelligence, International Cooperation

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

计算物理是物理学与计算机科学的交叉领域,利用数值方法和计算机技术来解决物理问题的学科[1]。它涉及将物理现象转化为数学模型,并使用计算机进行模拟、分析和预测。计算物理、实验物理和理论物理是物理学研究中的三种基本研究方法,在当代物理学发展中扮演着不可替代的角色[2]。计算物理的研究范围广泛,涵盖了经典物理、量子物理、相对论物理等各个领域。计算物理与量子化学、计算力学、材料科学等其他学科之间也存在着不可分割的联系。这使得计算物理具有较强的实践性和应用性,能够为其他学科提供关键的数值模拟和数据分析。最近几年由于人工智能的快速发展,特别在科学教育中的影响也非常大[3]-[13]。在智能技术的大背景下,计算物理的发展也面临巨大的改革。我们国家对计算物理的发展也特别重视,在“十四五”和中长期发展规划中,都把“计算物理”作为物理学单独的分支学科进行战略研究。特别在2024年,国家基金委自然科学基金新增代码“A2015 计算物理”,申请代码下设研究方向包括计算物理方法、电子结构与物性计算、量子多体计算、动力学计算与模拟、非平衡态与输运计算、复杂系统与计算统计物理、计算物理软件开发等[14]。这进一步强调了“计算物理”的现状和发展态势的重要性,还提出了发展思路和发展方向。

目前国外计算物理发展的现状分为以下几个方面:学术研究合作,国际计算物理领域的研究者之间积极展开合作和交流,共同解决复杂的科学问题。跨国合作项目、国际研讨会和会议等活动为学者提供了平台,促进了学术合作与知识共享。特别是数值方法与算法的发展,近几年各国都投入了大量的科研经费鼓励学者们在不断的创新与发展。新的数值方法和计算算法的提出,使得计算物理能够更高效、精确地模拟和分析物理系统,推动了该领域的研究进展。怎么能更好地将这些计算算法用于科研实践生产中,取决于算力的发展。算力的发展是数字经济时代的核心生产力,以及全社会数智化转型的基石,特别是随着人工智能的发展,对算力的要求越来越高。这主要体现在超级计算、云计算和智能计算,随着计算机技术的飞速发展,超级计算机、云计算和智能计算的应用推动了计算物理的发展。欧美国家的许多高校都成立了超级计算中心。其中美国在智能计算领域处于国际前列,其智能超算中心布局可基本分为三大体系:美国能源部下属的六大国家实验室、美国国家科学基金会支持的依托高校的智能超算中心、

美国航空航天局(NASA)下属的 Ames 研究中心超级计算中心。这些计算资源的可用性和处理能力的提升,为计算物理研究者提供了更强大的计算平台,加快了科学模拟和计算实验的进展。在人才培养与教育方面,国外的高校和研究机构致力于学生的原创新代码开发,并且有相应的经费支持去组织各种研讨会,让本科生能积极地对前沿的算法发展有所了解。

我国的计算物理领域在过去的几十年取得了显著的发展,成为国内科研和教育的重要组成部分,具体的发展现状如下:我国有众多研究机构和团队致力于计算物理的研究。这些机构包括大学的物理学、计算机科学和工程学院,以及科研院所和实验室。一些研究机构的团队在计算物理领域具有国际声誉,他们的研究成果在国际上发表并得到广泛认可。比如:中国科学院物理所的向涛院士团队一直致力于张量网络方法的开发[15];吉林大学马琰铭院士团队开发的晶体结构预测程序 CALYPSO [16];中国科学技术大学赵瑾教授团队致力于开发激发态分子动力学方法等等[17]。国内在高性能计算方面也取得了显著进展,拥有多个世界级的超级计算机,比如天津超算中心、长沙超算中心、济南超算中心、广州超算中心等等。这些高性能计算平台为国内计算物理研究提供了强大的计算能力和资源支持,加速了科学模拟和数据处理的发展。计算物理在国内的应用领域正在不断拓展。除了传统的物理学领域,如凝聚态物理、材料科学和天体物理等,计算物理还在能源、环境科学、生物医药等领域发挥着重要作用。尤其是在新材料设计、药物研发和环境模拟等方面,这种学科交叉促进了不同领域之间的合作研究,推动了跨学科研究的发展。我国的高校和研究机构致力于计算物理人才的培养和教育。许多大学开设了计算物理的本科和研究生课程,并鼓励和支持学生参与计算物理领域的研究和创新,推动新一代计算物理学者的培养。

## 2. 高校计算物理在人工智能背景下如何开展

基于国内外计算物理的发展情况,作为高校教师如何在人工智能的大背景下给大学生教授计算物理非常重要,因此我们从以下几个点展开。

### 2.1. 指导学生熟悉计算物理中常用的计算方法

在物理研究中,计算物理方法发挥着关键作用。比如以下是一些常用的计算方法在凝聚态物理研究的应用:密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT),一种基于电子密度的量子力学方法,广泛应用于研究凝聚态物理中的电子结构、晶体结构、电荷密度分布等问题。分子动力学方法(Molecular Dynamics, MD),模拟通过数值解牛顿运动方程来模拟原子和分子在时间上的演化,用于研究凝聚态物质的热力学性质、动力学行为等。蒙特卡罗方法(Monte Carlo, MC),MC方法通过随机抽样和概率分布来模拟系统的行为,用于模拟统计物理系统、相变现象等。张量重正化群(Tensor Renormalization Group, TRG): TRG是一种用于处理多体系统的计算方法,特别适用于处理高度关联的系统,例如量子多体系统。动力学平均场理论(Dynamical Mean-Field Theory, DMFT): DMFT将多体问题近似为单体问题,广泛用于研究强关联电子系统的性质,如金属-绝缘体相变、高温超导等。格林函数方法(Green's Function Methods):格林函数方法用于处理系统的激发态和动态响应,如电子结构计算、光学性质等。结构预测和材料逆向设计方法:这些方法包括晶体结构预测、材料模拟和设计等,用于探索新型材料的结构和性质,以及提出材料设计的方案,等等其他计算物理的数值方法,这些计算方法在凝聚态物理研究中相互补充,为研究人员提供了多样化的工具和途径,帮助他们理解物质的性质、探索新的物理现象,并为材料设计和应用提供了重要的支持。因此,作为高校教师我们指导学生熟悉常见的计算方法,并让其能够熟练使用其中的几种。

### 2.2. 人工智能训练优化已有的计算方法

针对上述常用的几种计算方法,我们可以教学生利用人工智去训练某种特定计算方法中已有的算法

框架,使得计算更智能化。具体的可以从以下几个方面入手:1) 重构和发展现有计算框架:比如利用机器学习的微分编程框架和专用硬件,重构和发展现有的计算物理框架,以加速计算过程和提高计算效率。2) 开发机器学习力场和机器学习密度泛函:致力于开发准确高效、符合物理约束、普遍适用的机器学习力场和机器学习密度泛函,用于模拟和预测物质的结构、性质和相互作用。3) 构建原子尺度预训练模型:基于科学数据(包括文献、实验和计算数据),构建关于物质科学的原子尺度预训练模型,为物性预测和逆向设计提供基础,加速材料发现和设计过程。4) 探索生成式人工智能方法的应用:研究生成式人工智能方法在识别集体变量、增强采样以及在自由能计算方面的应用,为更有效地模拟复杂系统的动力学行为和热力学性质提供新的思路和方法。这些研究方向将推动计算物理的发展,提高计算方法的准确性、效率和适用性,加速科学发现和技术创新,为解决复杂的物理问题和实际应用提供新的解决方案。

在上述利用人工智能训练已有的算法框架中,计算物理软件扮演了实现算法的关键角色。计算物理软件开发涉及多个方面,包括程序框架设计、数据结构、高性能计算以及可视化等。在凝聚态计算领域,涵盖了诸多软件类型,如电子结构计算、分子动力学模拟、量子多体模拟、光与物质相互作用模拟、量子算法与量子计算、连续介质模拟、多尺度模拟、缺陷和杂质模拟、材料计算前后处理以及材料数据库相关软件等。软件开发的目的在于构建计算物理的开源基础设施、标准测试和生态链,实现计算物理领域的可持续发展。除此之外,还需要重视对专用硬件与国产硬件的软件重构与适配,以及数据与智能驱动的计算物理软件的研究。这些努力将推动计算物理领域的不断发展和创新。

### 2.3. 国际合作共建知识共享平台

我们可以带领学生建立国际化的合作项目和交流平台,通过互相提供技术支持和合作机会,促进学术交流和合作。通过公共的学术社区可以共享教学资源、课程设计和科研成果,提高教育质量和学生的全球竞争力。特别是在计算物理领域,国际合作可以加速科研进展,推动新技术和方法的发展和应用。计算物理需要学生具备物理学、数学和计算机科学等多个学科的知识 and 技能,培养了学生跨学科的综合能力。因此计算物理的国际化研究可以让学生接触不同的文化和学术环境,培养跨文化交流和合作的能力,提高学生的国际视野。计算物理的发展离不开科学家们的推动,国际上有很多计算物理的领军人物,比如:戴维·波尔斯(David P. Landau),他是计算物理领域的重要人物之一。他在统计物理和计算相变方面做出了重要的理论和模拟工作,并开发了著名的蒙特卡罗方法[18] [19]。丹尼尔·斯特雷奇(Daniel Stroud),他在凝聚态物理和计算物理领域有着重要的地位。他的研究涵盖了超导性、介观尺度系统和量子计算等方面[20]-[22]。格里高利·沃伦(Gregory A. Voth),他在分子模拟和多尺度计算方面有着杰出的贡献。他开发了许多重要的计算方法,应用于生物分子、软物质和复杂流体等领域[23]。罗兰·奥姆斯(Roland Omnes),他在量子力学的计算方法和解释方面作出了重要贡献[24] [25]等等众多计算物理学大家。因此高校教师可以积极拓展国际学术合作,只有这样才能带领学生了解并参与到具体的项目中来。

在全球人工智能的大背景下,我国的计算物理学科该如何发展,如何接轨国际化非常重要。目前我国计算物理学科仍然存在很多不足,在国内的计算物理领域,研究主要集中在传统的凝聚态物理、统计物理和量子物理等方面,相对较少涉及到其他领域的交叉研究。这导致了一些新兴领域和跨学科研究的相对欠缺,限制了计算物理在多个领域的应用和发展。其次尽管国内有一些杰出的计算物理研究团队和学者,但整体上研究水平还存在一定的不均衡。一些高水平的研究机构 and 大学在计算物理领域取得了重要突破,但仍有一些地区和学校的力量较弱,研究成果较少,这限制了整体的发展水平。还有在计算物理研究中,计算设备和大规模计算资源是非常重要的。然而,一些研究团队在获取高性能计算设备和充足的计算资源方面仍然面临困难。这可能会限制他们在大规模计算和复杂模拟方面的研究能力和发展潜力。最后,尽管我国有大量的计算物理研究人员,但整体上还存在着缺乏创新型人才的问题。因此,

需要从本科生开始培养他们的创新能力, 让其具备创新思维、跨学科能力和科学领导力, 能够引领计算物理研究的前沿和推动学科的发展, 这对我国计算物理的长期发展至关重要。

### 3. 结语

因此在人工智能全球化的大背景下, 随着数据科学和机器学习的融合, 计算物理领域将越来越多地把数据科学和机器学习的方法应用于问题求解。通过数据驱动的方法和机器学习算法, 计算物理可以更好地处理复杂的物理现象, 并从大量的数据中提取有用的信息。如何在高校计算物理教学中融合人工智能, 首先, 我们可以在不同的院系开展计算物理类似的专业课, 这种跨学科的融合能够推动计算物理在不同学科之间的交流与合作。其次, 可以通过开设培训班的形式, 培养学生对前沿算法的了解。最后, 指导学生使用开源软件与开放数据, 开源软件和开放数据的使用正在成为计算物理研究中的一种趋势。众多的开源软件和数据集为研究者提供了丰富的工具和资源, 促进了计算物理的发展与交流。使得计算物理与物理学、材料科学、化学和生物学等学科进行交叉与合作, 并且计算物理与计算机科学、数据科学、人工智能等领域的合作越来越紧密, 共同解决复杂的科学和工程问题, 推动技术创新和应用拓展。

### 基金项目

中央高校基本科研业务费专项资金资助(ZY2421)。

### 参考文献

- [1] Thijssen, J. (2007) *Computational Physics*. Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9781139171397>
- [2] Landau, R.H., Páez, M.J. and Bordeianu, C.C. (2015) *Computational Physics: Problem Solving with Python*. John Wiley & Sons.
- [3] 国务院. 国务院关于印发新一代人工智能发展规划的通知[EB/OL]. [https://www.gov.cn/zhengce/content/2017-07/20/content\\_5211996.htm](https://www.gov.cn/zhengce/content/2017-07/20/content_5211996.htm), 2024-05-15.
- [4] 中华人民共和国教育部. 教育部关于印发《高等学校人工智能创新行动计划》的通知[EB/OL]. [http://www.moe.gov.cn/srcsite/A16/s7062/201804/t20180410\\_332722.html](http://www.moe.gov.cn/srcsite/A16/s7062/201804/t20180410_332722.html), 2024-05-15.
- [5] 余胜泉, 卢宇, 陈晨. 人工智能 + 教育蓝皮书[M]. 北京: 北京师范大学出版社, 2020.
- [6] 刘勇, 徐佳慧, 董跃武, 苏福根. 高等教育中如何应用 ChatGPT 类生成式人工智能——联合国教科文组织《高等教育中的 ChatGPT 和人工智能: 快速入门指南》解析[J]. 中国教育信息化, 2024, 30(2): 71-80.
- [7] 郑永和, 周丹华, 张永和, 等. 计算教育学视域下的 ChatGPT: 内涵、主题、反思与挑战[J]. 华东师范大学学报(教育科学版), 2023, 41(7): 91-102.
- [8] 刘向永, 鲁晓燕. 合理开展 ChatGPT 教学应用的思考与实践[J]. 教育视界, 2023(17): 11-14.
- [9] 崔宇红, 白帆, 张蕊蕊. ChatGPT 在高等教育领域的应用、风险及应对[J]. 重庆理工大学学报(社会科学), 2023, 37(5): 16-25.
- [10] 吴青, 刘毓文. ChatGPT 时代的高等教育应对: 禁止还是变革[J]. 高校教育管理, 2023, 17(3): 32-41.
- [11] Lamb, R.L., Vallett, D.B., Akmal, T., et al. (2014) A Computational Modeling of Student Cognitive Processes in Science Education. *Computers & Education*, **79**, 116-125. <https://doi.org/10.1016/j.compedu.2014.07.014>
- [12] Krajcik, J.S. (2021) Commentary—Applying Machine Learning in Science Assessment: Opportunity and Challenges. *Journal of Science Education and Technology*, **30**, 313-318. <https://doi.org/10.1007/s10956-021-09902-7>
- [13] Maestrales, S., Zhai X., Toutou, I., et al. (2021) Using Machine Learning to Score Multi-Dimensional Assessments of Chemistry and Physics. *Journal of Science Education and Technology*, **30**, 239-254. <https://doi.org/10.1007/s10956-020-09895-9>
- [14] Jiang, X.W., Li, Z.X., Wang, L., et al. (2024) The Connotation and Key Research Areas of the New Application Code “Computational Physics” of the National Natural Science Foundation of China. *Scientia Sinica Physica, Mechanica & Astronomica*, **54**, Article ID: 247102. <https://doi.org/10.1360/SSPMA-2024-0012>
- [15] Xiang, T. (2017) *Tensor Network States in Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press.
- [16] Wang, Y., Lv, J., Zhu, L. and Ma, Y. (2010) CALYPSO: A Method for Crystal Structure Prediction. *Computer Physics*

- 
- Communications*, **181**, 2106-2117.
- [17] Zhao, J. and Han, K. (2014) Excited-State Molecular Dynamics: Methods, Theory and Applications. *Chemical Society Reviews*, **43**, 4985-5001.
- [18] Landau, D.P. and Binder, K. (1980) A New Monte Carlo Method for Studying Phase Transitions. *Physical Review B*, **20**, 2467-2476.
- [19] Landau, D.P. and Binder, K. (1981) Scaling Theory and Monte Carlo Simulation of Statistical Mechanics Systems. *Physical Review B*, **24**, 1391-1402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.24.1391>
- [20] Stroud, D. and Mochán, W.L. (2004) Quantum Information Processing with Superconducting Qubits. *Reports on Progress in Physics*, **67**, Article No. 1.
- [21] Stroud, D. (2001) *The Physics of Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press.
- [22] Stroud, D. and Mochán, W.L. (1999) Quantum Information Processing with Josephson Charge Qubits. *Physical Review Letters*, **82**, 2572-2575.
- [23] Voth, G.A. (2008) *Coarse-Graining of Condensed Phase and Biomolecular Systems*. CRC Press. <https://doi.org/10.1201/9781420059564>
- [24] Omnes, R. (1999) *Understanding Quantum Mechanics*. Princeton University Press.
- [25] Omnes, R. (1992) Consistent Interpretations of Quantum Mechanics. *Reviews of Modern Physics*, **64**, 339-382. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.64.339>