

2015 年南京大学计算物理期末考试卷（由 Unsinn 默写）

1. 现有时间-速度表：

$t(\text{s})$	0	10	15	20	23	30
$v(\text{m/s})$	0	230	263	518	603	902

(1). 用抛物线（三点插值）求 $t = 16$ 时候的速度。

(2). 使用最小二乘法拟合曲线，拟合函数为 $f(x) = ax^2 + bx + c$ ，求 a, b, c .

2. 写出打靶法求方程

$$\begin{cases} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = -k^2\varphi; \\ \varphi(0) = \varphi(1) = 0, \end{cases}$$

的最小本征值的（C 或 Fortran）程序。

3. 在抛物线势能的势阱中的粒子初始波函数为

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \exp(-ax^2),$$

满足方程

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + bx^2 \Psi(x, t).$$

写出求解随时间演化的波函数的（C 或 Fortran）程序。

4. 写出一种 Monte-Carlo 方法求 π 的（C 或 Fortran）程序。

5. 在分子动力学模拟中

(1). 写出一种积分运动方程的算法及其优缺点；

(2). 在等温单原子气体的模拟中，写出初始化粒子速度的（C 或 Fortran）程序。