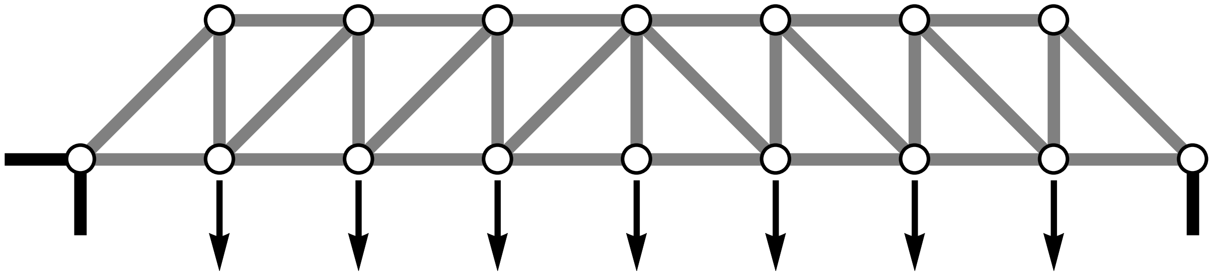
2021年《计算物理A》第一次大作业，第1题

截止日期：4月23日



1　桁架结构桥

建筑中普遍使用桁架 (Truss) 构成的结构作为支撑构件。桁架由直杆和节点构成，在分析中均视作理想的无自重刚体。用指标 $i = 1, 2, \ldots, n$ 标记各个节点，与节点 i 有直杆相连的全部节点指标集合为 I_i，θ_{ij} 为由 i 指向 j 的矢量与水平方向的夹角，直杆的总数记为 m。设节点 i 上有水平向下的负载 P_i。另有 r 个约束，限制某个节点 i_k 在某个方向 θ_k 上无法运动，相应的约束反力记作 N_k。

显然，在这样的体系中，直杆仅受沿杆方向的拉力或压力，记作 F_{ij}。其大于零代表受拉，小于零代表受压。对每个节点列受力平衡方程，有

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{r} \delta_{i,i_k} N_k \cos\theta_k + \sum_{j\in I_i} F_{ij} \cos\theta_{ij} = 0, \\ \sum_{k=1}^{r} \delta_{i,i_k} N_k \sin\theta_k + \sum_{j\in I_i} F_{ij} \sin\theta_{ij} = P_i. \end{aligned} \tag{1}$$

共计 $2n$ 个线性方程，并带有 $m + r$ 个未知变量。方程有唯一解的必要条件是 $2n = m + r$。无解的情形对应于桁架无法维持静态平衡，例如一个四边形桁架。而无穷多解的情形对应于超静定问题。

图中给出了一种经典的桁架结构桥：普拉特桁架桥。圆圈代表节点，灰色线代表直杆，黑色线代表约束，矢量箭头代表此处受到一个单位的负载力。桥体中全部横置或竖置的直杆长度均为单位 1。

1. 给出这个结构中的节点数、直杆数以及约束数，验证其满足存在唯一解的必要条件。

2. 编写程序，求解各直杆受力。用不同颜色标记不同大小的作用力画在相应的直杆上，给出图示。哪根直杆受压最严重？哪根直杆受拉最严重？

3. 对称地增加周期单元的数目，可以得到更长的桥梁。给出直杆所受最大力（以绝对值计）随桥梁长度的变化。分别选用一种线性方程组的直接解法和迭代解法，比较它们的计算耗时。

4. 考虑有一辆负载为 $G = 2$ 的小汽车驶过图中所示长度为 8 的桥梁。当汽车位于一根直杆上，距左右端点距离分别为 x 和 $1 - x$ 时，可以等效为左右端点分别施加了 $(1 - x)G$ 和 xG 的负载。请给出桥梁中直杆所受最大拉力随小汽车位置的变化。（提示：你未必需要对于小汽车的每一个位置都求解一遍方程组）。

2021年《计算物理A》 第一次大作业，第2题

截止日期：4月23日

1 求解经典 dimer 模型的配分函数

dimer 模型是凝聚态物理中研究双原子分子的一种重要模型。我们可以简单了解下经典的 dimer 模型 [1,2]。

如图1所示，是一个 3 行 2 列的晶格，考虑最近邻的格点之间形成 pair（图中的红色粗线），我们称之为一个 dimer. 晶格中的所有 dimer 构成一个 dimer 位形。一个允许的 dimer 位形必须要满足以下条件：**每个格点属于且仅属于一个 dimer**。例如，图1左边三个为 3 种允许的位形，而最右边为一种不允许的位形。

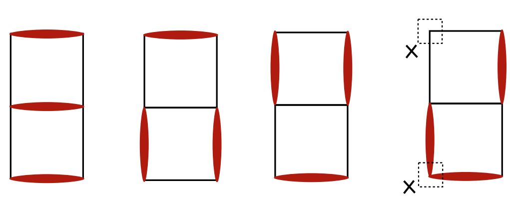


图 1: 3×2 晶格的 dimer 位形：左边三个是允许的位形，分别对应 x^3, xy^2, y^2x. 最右边是不被允许的位形，因为左上方的格点没有形成 dimer，且左下角的格点同属于 2 个 dimer

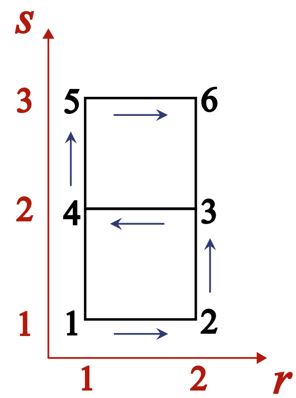


图 2: 'zigzag' 编号：图中 r, s 分别为列数和行数，左下角的格点对应 $r = 1, s = 1$

经典 dimer 模型的配分函数可以写成如下形式

$$Z_{mn}(x,y) = \sum_{\Gamma} x^{N_x} y^{N_y} \tag{1}$$

其中，脚标 m,n 为晶格的总行数和总列数；N_x, N_y 分别为为横向和纵向的 dimer 个数，x, y 分别为横向和纵向 dimer 的贡献；求和是对所有允许位形的求和。一个简单的例子是

$$Z_{32}(x,y) = 2xy^2 + x^3 \tag{2}$$

当我们取 $x = y = 1$，配分函数 $Z_{mn}(1,1)$ 的物理意义是 $m \times n$ 的晶格上所允许的全部位形的个数。如上面的例子中 $Z_{32}(1,1) = 3$，即 3×2 的晶格中所有允许的位形只有 3 个。

下面来看如何数值求解任意大小的 dimer 模型的配分函数。如图2所示，是一个 3 行 2 列的晶格，我们对格点进行'zigzag' 序的编号：对于 r 列 s 行的格点，其编号为

$$\begin{aligned} k(r,s) &= r + (s-1)n && (s \text{ odd }) \\ &= n - r + 1 + (s-1)n && (s \text{ even }) \end{aligned} \tag{3}$$

这个例子中，k 的取值共有 6 个，以此构造一个 6×6 的反对称矩阵 D, 其

矩阵元 $D_{kk'}$ 只在最近邻的格点有值，其余为零，非零矩阵元定义为

$$\begin{aligned} D_{kk'} &= D(r,s;r+1,s) = x \\ D_{kk'} &= D(r,s;r,s+1) = y \end{aligned} \tag{4}$$

完整地写出 D 矩阵为

$$D = \begin{pmatrix} 0 & x & 0 & y & 0 & 0 \\ -x & 0 & y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -y & 0 & x & 0 & y \\ -y & 0 & -x & 0 & y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -y & 0 & x \\ 0 & 0 & -y & 0 & -x & 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

我们直接给出以下结论

$$Z_{mn}(x,y) = [Det(D)]^{1/2} \tag{6}$$

对于任意的正方晶格只需用上述方法构造 D 矩阵，然后求行列式再开根号即可得到配分函数。

试求：

1. 写出 3×4 的正方晶格对应的 D 矩阵；
2. 对于任意的 x, y，编程计算上题中的 D 矩阵的行列式，得到相应的配分函数；
3. 配分函数的平方具有解析结果；

   $$Z_{mn}^2 = (-)^{m\left[\frac{1}{2}n\right]} 2^{mn} \prod_{q=1}^{m}\prod_{r=1}^{n}\left(x\cos\frac{\pi r}{n+1} + iy\cos\frac{\pi q}{m+1}\right) \tag{7}$$

   取不同的 x, y 验证数值结果与解析结果的一致性；
4. 计算 3×3 正方晶格的配分函数，验证其结果为零。事实上，对于 m 和 n 都是奇数的情况，dimer 模型配分函数都为零，思考为什么？【提示：当 $x=y=1$ 时，配分函数即为所有允许的位形的个数】

参考文献

[1] Michael E. Fisher. Statistical mechanics of dimers on a plane lattice. *Phys. Rev.*, 124:1664–1672, Dec 1961.

[2] Michael E. Fisher and John Stephenson. Statistical mechanics of dimers on a plane lattice. ii. dimer correlations and monomers. *Phys. Rev.*, 132:1411–1431, Nov 1963.

2021年《计算物理A》第一次大作业，第3题

截止日期：4月23日

3 抛起的手机

某位同学将他的手机抛了起来，希望它在空中能绕转动惯量居中的那个轴旋转。手机的陀螺仪记录了角速度矢量随时间的变化，见附件 Gyroscope.csv 。

手机可近似视作一个刚体。若略去空气阻力，在空中时其角动量 L 和转动动能 E 是守恒量，即

$$I_x^2\omega_x^2 + I_y^2\omega_y^2 + I_z^2\omega_z^2 = L^2 \tag{1}$$

$$\frac{1}{2}I_x\omega_x^2 + \frac{1}{2}I_y\omega_y^2 + \frac{1}{2}I_z\omega_z^2 = E, \tag{2}$$

其中 I_α 为手机绕其 α 轴的转动惯量（$\alpha = x, y, z$）。引入参数 $A_\alpha = I_\alpha/2E$，我们可以写出

$$\varepsilon \equiv \sum_i \left| \sum_\alpha A_\alpha \omega_{\alpha i}^2 - 1 \right|^2 = 0. \tag{3}$$

其中指标 i 用来标记不同时刻测得的物理量。由于测量误差等其他因素的影响，残差 ε 事实上无法完全达到零。我们可以通过求 ε 的极小值来确定参数 A_α 的值。

1. 试证明，ε 取得其极小值的条件等价于向量 $(A_x, A_y, A_z)^T$ 遵循某个线性代数方程组，并给出该方程组中诸项的表达式。事实上，这个过程即为一般性的最小二乘法。

2. 角动量仅在手机位于空中自由转动时才是守恒量。选取这一阶段角速度数据，并求解上一问中给出的线性代数方程组得到 A_x, A_y, A_z 的值。给出你选取的时间段手机确实是在作自由转动的证据。

3. 类似的，我们也可以利用 (1) 式来进行最小二乘拟合。请仿照之前的步骤来得到诸 I_α^2/L^2 的值。比较两种方案各自得到的各轴转动惯量之比。

4. 刚体的欧拉角 (θ, φ, ψ) 与其绕惯量主轴转动的角速度 $\boldsymbol{\omega}$ 之间有如下关系

$$\begin{aligned}\omega_x &= \dot{\varphi}\sin\theta\sin\psi + \dot{\theta}\cos\psi,\\ \omega_y &= \dot{\varphi}\sin\theta\cos\psi - \dot{\theta}\sin\psi,\\ \omega_z &= \dot{\varphi}\cos\theta + \dot{\psi}.\end{aligned}$$

   取手机被抛起时刻 $\theta = \varphi = \psi = 0$，试通过数值积分给出其三个欧拉角随时间的变化关系，并绘图表示。这位同学是否成功让他的手机绕转动惯量居中的那个轴稳定旋转了？