

# 2025 秋计算物理 B 期末考试

注意事项：

1. 本次考试为半开卷考试.

## 一、蒙特卡洛抽样

1. 考虑宽度为  $L = 1$  的一维无限深方势阱 ( $0 \leq x \leq 1$ ) . 系统处于混合态，其中有 0.8 的概率位于基态  $\psi_1(x)$ ，有 0.2 的概率位于第一激发态  $\psi_2(x)$ .

(1)写出该混合态的位置概率密度函数  $P(x)$ .

(2)阐述如何利用舍选法 (Rejection Method) 对该系统的位置  $x$  进行抽样 (需给出具体的比较函数和步骤) .

(3)说明如何基于生成的随机样本点，获得观测量  $F(x) = x^2$  的期望值.

## 二、随机游走与线性方程组

2. 设  $M$  为 100 阶三对角方阵，其主对角元为  $1-a$ ，次对角元均为  $-b$ . 已知参数满足  $a+2b=1$  ( $a, b > 0$ ).

请设计一个基于随机游走 (Random Walk) 的算法，求解线性方程组  $MX = Y$ . 请明确定义随机游走的转移概率、边界处理以及解的统计估算方法.

## 三、有限差分法

3. 在极坐标系  $(r, \theta)$  下，考虑定义在圆环区域上的 Laplace 方程：

$$\nabla^2 u = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} = 0$$

请给出该方程的有限差分离散格式 (中心差分)，并说明边界条件的处理方式.

#### 四、线性代数迭代法

4. 考虑一个三阶线性方程组  $Ax = b$  (注: 此处回忆版未给出具体数值, 考试时请代入试卷给定的具体矩阵  $A$  和向量  $b$ ) .  
要求使用 **Gauss-Seidel** 迭代法, 给定初值  $x^{(0)}$ , 请手动计算前两步迭代结果  $x^{(1)}$  和  $x^{(2)}$ .

#### 五、网格剖分

5. 给定平面上的点集, 包含单位圆边界上的 8 个点:

$$P_n = \left( \cos \frac{n\pi}{4}, \sin \frac{n\pi}{4} \right), \quad n = 0, 1, \dots, 7$$

以及圆内部的 2 个点:  $Q_1 = (0.1, 0)$ ,  $Q_2 = (-0.1, 0)$ .

- (1) 请画出或描述一种合适的 **Delaunay** 三角剖分方案.  
(2) 阐述在计算机程序中应如何设计数据结构来有效地存储此剖分 (包括节点信息、单元连接关系等) .

#### 六、一维有限元

6. 考虑定义在区间  $[0, 1]$  上的边值问题:

$$y'' + \pi^2 y = 0$$

边界条件为:  $y(0) = 1/2$ ,  $y(1) + 0.2y'(1) = -0.67$ .

- (1) 给出该微分方程对应的泛函  $J[y]$ , 并证明该泛函取极值的条件即为原微分方程成立 (需包含自然边界条件的推导) .  
(2) 选取节点  $x_i \in \{0, 0.2, 0.5, 1\}$  进行离散, 请列出求解该问题的有限元线性方程组 (刚度矩阵和载荷向量的形式, 不必算出最终数值解) .

## 七、分子动力学与自旋模型

7. 考虑类似于 Ising 模型的自旋系统，哈密顿量  $H$  仅包含相邻自旋的相互作用。自旋的时间演化遵从如下方程 (Landau-Lifshitz-Gilbert 方程形式)：

$$\frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = \alpha(\mathbf{S}_i \times \mathbf{B}_i) + \beta \left( \mathbf{S}_i \times \frac{d\mathbf{S}_i}{dt} \right)$$

其中有效场  $\mathbf{B}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{S}_i}$ .

请结合分子动力学 (Molecular Dynamics) 的思想，设计一套数值算法求解一维链状系统中的平衡态构型。

## 八、最小像力约定与邻近搜索

8. 在二维正方形区域  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$  中采用周期性边界条件。设有五个粒子，坐标分别为：

$$1: (0.1, 0.1) \quad 2: (0.2, 0.3) \quad 3: (0.3, 0.9) \quad 4: (0.4, 0.4) \quad 5: (0.8, 0.8)$$

设定相互作用的截断距离为  $r_c = 0.4$ 。根据最小像力约定 (Minimum Image Convention)：

- (1) 判断哪些粒子 (或其像) 会对粒子 1 产生作用力。
- (2) 给出这些对粒子 1 施加力的源粒子 (或其像) 在计算力时使用的实际坐标。