

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, θ) 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。