

计算物理 B 期末考试

2022-2023 秋季学期 张志勇

一、线性同余法产生伪随机数, $a = 5, c = 1, m = 16, x_0 = 1$, 写出公式并计算前两个随机数

二、MC 抽样

$$f(x) = 3x^2, 0 \leq x \leq 1$$

- (1) 直接抽样法, 写出抽样步骤或流程图(5)
- (2) 第一类舍选法, 写出抽样步骤或流程图(5)
- (3) 比较两种方法的优势和不足(5)

三、为什么 Metropolis 方法可以应用于无法归一化的分布密度函数(5) 用 Metropolis 方法抽样自由度为 4 的 χ^2 分布

$$f(x) = \frac{1}{2^{\frac{n}{2}} \Gamma(\frac{n}{2})} x^{\frac{n}{2}-1} e^{-x}$$

抽样步骤或流程图(5)

四、有限差分法解 Laplace(10) $x = [0,2,4,6,8], y = [0,2,4]$, 5×3 格点, $u(0, y) = u(x, 0) =$

$$u(x, 4) = 0, u(8, y) = \sin \frac{\pi y}{4}, \Delta u = 0, \text{求中间三个格点的值}$$

五、比较有限元素法和有限差分法, 优势和不足(5)

六、分子动力学

- (1) 周期性边界条件的目的? 最小像力原理的定义? (5)
- (2) 二维 10×10 正方形区域划分为 100 个元胞, 每个元胞中心放置一个粒子, $r < r_c = 3$, 求右下角粒子有相互作用的粒子数(5)
- (3) LJ 势公式, 参数物理意义, 在何处取到负数极值(5)
- (4) 微正则系综定义以及 verlet 速度算法步骤(5)

七、MMA 计算自由落体 $F = -mg - bv$, 给出微分方程和 mma 代码

八、机器学习

- (1) 判断(5)
 - 聚类是监督学习
 - 批量梯度下降适用于特征数 n 较大的情况
 - 袋装算法需要较大数据量
 - 减小正则化系数可以防止过拟合
 - 决策树的关键是如何分割
- (2) BP 流程(5)
- (3) PCA 的主要思想, 在图中画出两个 PCA 方向(5)

九、单程序多数据和多程序多数据分别是什么(5)

十、请谈一谈在这门课教授的**计算方法**中，哪些是你未来可以应用到学习和科研中的？(5)

By xqq 感谢群友补充