

计算物理第五次作业

李柏轩 20300200004

October 18, 2022

1 题目 1: 数值求导

1.1 题目描述

Compute the derivative of $f(x) = \sin x$ at $x = \frac{\pi}{3}$ using the Richardson extrapolation algorithm. Start with $h = 1$ and find the number of rows in the Richardson table required to estimate the derivative with six significant decimal digits. Output the Richardson table.

1.2 程序描述

本程序使用 Richardson 外推法计算 $f(x) = \sin x$ 在 $x = \frac{\pi}{3}$ 处的导数值, 输出达到所需精度 (6 位小数) 所需的 Richardson 表。Richardson 外推法的计算过程如 Fig.1所示,

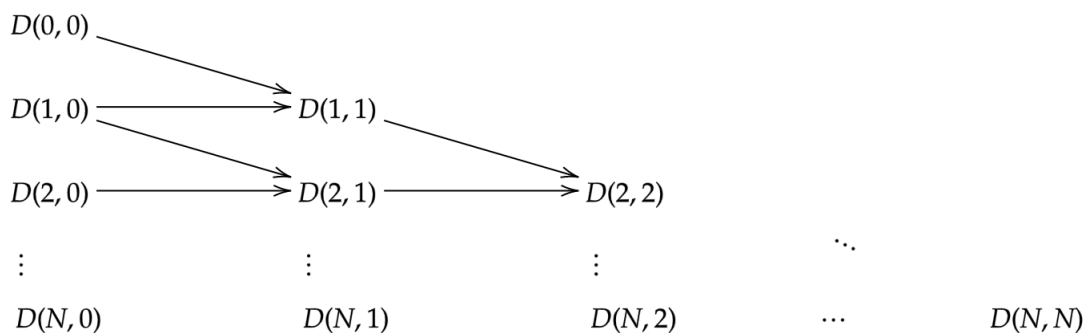


Figure 1: Richardson 外推法的计算过程

其中 $D(n, 0) = \frac{f(x + \frac{h}{2^n}) - f(x - \frac{h}{2^n})}{2 \cdot \frac{h}{2^n}}$, $D(n, m) = D(n, m-1) + \frac{1}{4^n - 1} [D(n, m-1) - D(n-1, m-1)]$, $D(N, N)$ 为数值导数的估计值, 误差正比于 $(\frac{h}{2^N})^{2N+2}$ 。

本程序源文件为 `Richardson.py`, 运行依赖 Python 第三方库 Numpy 和 Matplotlib。在终端进入当前目录, 使用命令 `python -u Richardson.py` 运行本程序。运行后在控制台输出达到 6 为小数精度所需的 N 值以及此时的 Richardson table (如 Fig.3和 Eq.1), 并输出随着 N 增加结果的收敛过程 (如 Fig.2)。

1.3 伪代码

Richardson 外推法的伪代码如 Alg.2所示。

Algorithm 1 Richardson Extrapolation

Input: The aimed point x , a initial h and N .

Output: The Richardson Table D

```

1: for  $n \leftarrow 0, 1, \dots, N$  do
2:    $D(n, 0) \leftarrow \frac{\sin(\frac{\pi}{3})+h - \sin(\frac{\pi}{3})-h}{2h}$ 
3:    $h \leftarrow \frac{h}{2}$ 
4: end for
5: for  $m \leftarrow 1, 2, \dots, N$  do
6:    $p \leftarrow 4^m$ 
7:   for  $n \leftarrow m, m+1, \dots, N$  do
8:      $D(n, m) \leftarrow D(n, m-1) + \frac{1}{p-1} [D(n, m-1) - D(n-1, m-1)]$ 
9:      $p \leftarrow 4p$ 
10:  end for
11: end for
12: for  $i \leftarrow 0, 1, \dots, N$  do
13:    $d(i) \leftarrow D(i, i)$ 
14:   if  $i \neq 0$  then
15:     if  $|d(i) - d(i-1)| < 10^{-6}$  then
16:       break
17:     end if
18:   end if
19: end for

```

1.4 输入输出示例

Fig.2为结果随着 N 的增加的收敛过程，可以看到程序很快就收敛到了真实值附近，随着 N 增加精度进一步提高。控制台输出如 Fig.3和 Eq.1所示，达到 6 位小数精度需要 $N = 9$ 。

0.42073549										
0.47942554	0.49898889									
0.49480792	0.49583341	0.49562305								
0.49869893	0.4987607	0.49880716	0.4988577							
0.49967454	0.49967837	0.49968197	0.4996854	0.49968864						
0.49991862	0.49991886	0.4999191	0.49991933	0.49991956	0.49991978					
0.49997966	0.49997967	0.49997968	0.4999797	0.49997971	0.49997973	0.49997974				
0.49999491	0.49999491	0.49999492	0.49999492	0.49999492	0.49999492	0.49999492	0.49999492			
0.49999873	0.49999873	0.49999873	0.49999873	0.49999873	0.49999873	0.49999873	0.49999873	0.49999873	0.49999873	
0.49999968	0.49999968	0.49999968	0.49999968	0.49999968	0.49999968	0.49999968	0.49999968	0.49999968	0.49999968	0.49999968

(1)

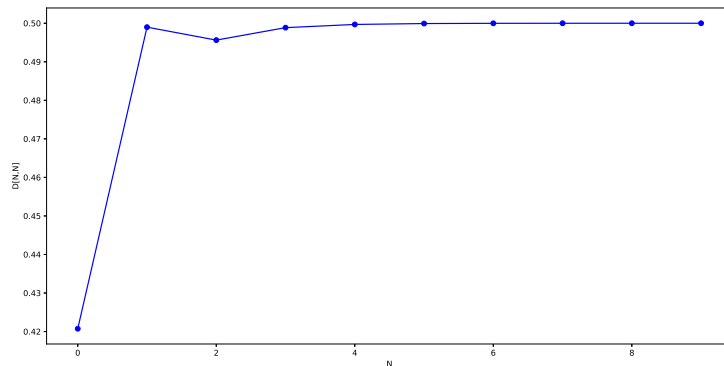


Figure 2: 随着 N 增加结果的收敛过程

```

N= 9
D= [[0.42073549 0.      0.      0.      0.      0.      0.
      0.      0.      0.      0.      0.      0.
      0.47942554 0.49898889 0.      0.      0.      0.      0.
      0.      0.      0.      0.      0.      0.
      0.49480792 0.49583341 0.49562305 0.      0.      0.
      0.      0.      0.      0.      0.      0.
      0.49869893 0.4987607 0.49880716 0.4988577 0.      0.
      0.      0.      0.      0.      0.      0.
      0.49967454 0.49967837 0.49968197 0.4996854 0.49968864 0.
      0.      0.      0.      0.      0.      0.
      0.49991862 0.49991886 0.4999191 0.49991933 0.49991956 0.49991978
      0.      0.      0.      0.      0.      0.
      0.49997966 0.49997967 0.49997968 0.4999797 0.49997971 0.49997973
      0.49997974 0.      0.      0.      0.      0.
      0.49999491 0.49999491 0.49999492 0.49999492 0.49999492 0.49999492
      0.49999492 0.49999492 0.      0.      0.      0.
      0.49999873 0.49999873 0.49999873 0.49999873 0.49999873 0.49999873
      0.49999873 0.49999873 0.49999873 0.      0.      0.
      0.49999968 0.49999968 0.49999968 0.49999968 0.49999968 0.49999968
      0.49999968 0.49999968 0.49999968 0.49999968]]

```

Figure 3: 控制台输出的 N 和 Richardson Table

2 题目 2: 数值积分

2.1 题目描述

Radial wave function of the 3s orbital is:

$$R_{3s} = \frac{Z^{\frac{3}{2}}}{9\sqrt{3}}(6 - 6\rho + \rho^2)e^{-\frac{\rho}{2}} \quad (2)$$

where $\rho = \frac{2Zr}{n}$, $Z = 14$, $n = 3$. Compute $\int_0^{40} |R_{3s}|^2 r^2 dr$ with Simpson's rule using two different radial grids:

1. Equal spacing grids: $r[i] = (i - 1)h$, $i = 1, \dots, N$ (try different N)
2. A nonuniform integration grid, more finely spaced at small r than at large r : $r[i] = r_0(e^{t[i]} - 1)$, $t[i] = (i - 1)h$, $i = 1, \dots, N$ (One typically choose $r_0 = 0.0005$ a.u., try different N).
3. Find out which one is more efficient, and discuss the reason.

2.2 程序描述

本程序采用 Simpson 规则计算数值积分，采用两种不同的取点方式，输出结果随着取点个数的增加的收敛曲线。Simpson 规则以三个点为一组，在每组中采用 Lagrange 插值法使用二次曲线进行近似，用

二次曲线的积分值代替局部的积分值，再将每组相加得到总的积分值。要求均匀取点，且取点总数需为奇数。程序中使用的核心公式为

$$\int_{x_1}^{x_n} f(x)dx = \frac{h}{3} \sum_{i=1,3,5}^{n-2} [f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})]. \quad (3)$$

第二种取样方式不是对 r 的均匀取样，而是对 t 的均匀取样，于是需要通过换元将 $\int_0^{40} |R_{3s}|^2 r^2 dr$ 转化为对 t 的积分，换元后表达式为

$$\int_0^{t_{max}} |R_{3s}|^2 r^2 \frac{dr}{dt} dt \quad (4)$$

其中 $r = r_0(e^t - 1)$ 。

本程序源文件为 Integration.py，运行依赖 Python 第三方库 Numpy 和 Matplotlib。在终端进入当前目录，使用命令 `python -u Integration.py` 运行本程序。运行后首先输出 $f(r) = |R_{3s}|^2 r^2$ 的图像如图 Fig.4 所示，关闭后输出 $g(t) = |R_{3s}|^2 r^2 \frac{dr}{dt}$ 的函数图像如图 Fig.5 所示，关闭后输出 Simpson 规则下两种取点方式随着取点个数增多结果的收敛情况如图 Fig.6 所示，并在控制台输出给定 N 时两种方法的结果。

2.3 伪代码

Simpson 规则数值积分的伪代码如 Alg.2 所示。

Algorithm 2 Simpson's rule for numerical integration

Input: The array of points $R(2n + 1$ points with a spacing of $h)$ and $f(R)$

Output: The numerical integration of $f(x)$ in the given interval.

```

1:  $I \leftarrow 0$ 
2: for  $i \leftarrow 0, 1, \dots, n - 1$  do
3:    $I \leftarrow I + f(r[2i + 1]) + 4f(r[2i + 2]) + f(r[2i + 3])$ 
4: end for
5: return  $\frac{hI}{3}$ 

```

2.4 输入输出示例

当 $N = 2001$ 时，对 r 均匀取点得到的结果为 0.9995563010070322，而对 t 均匀取点得到的结果为 0.9995002498750611，且由 Fig.6 可知，两者均收敛于真实值 1。其中对 t 均匀取点收敛速度明显快于对 r 均匀取点，即第二种取点方式效率更高，这是因为 $f(r) = |R_{3s}|^2 r^2$ 函数值明显非 0 的范围过窄，增加全局取点个数时有效区域内取点个数并未显著增加，而 $g(t) = |R_{3s}|^2 r^2 \frac{dr}{dt}$ 函数值明显非 0 的范围较宽，增加全局取点个数时能更多地增加有效区域内取点个数，于是收敛速度较高。

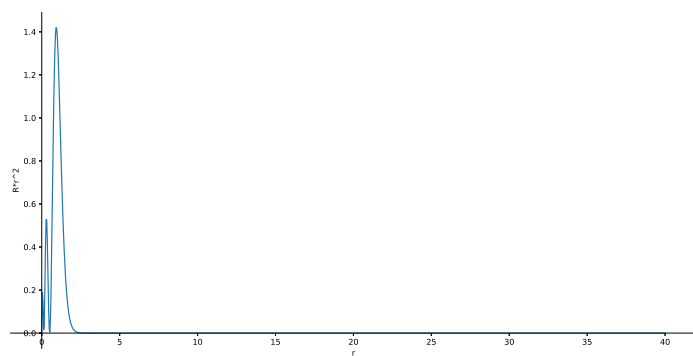


Figure 4: $f(r) = |R_{3s}|^2 r^2$ 的函数图像

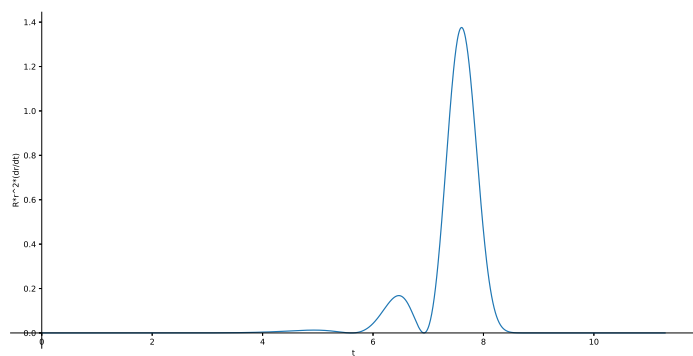


Figure 5: $g(t) = |R_{3s}|^2 r^2 \frac{dr}{dt}$ 的函数图像

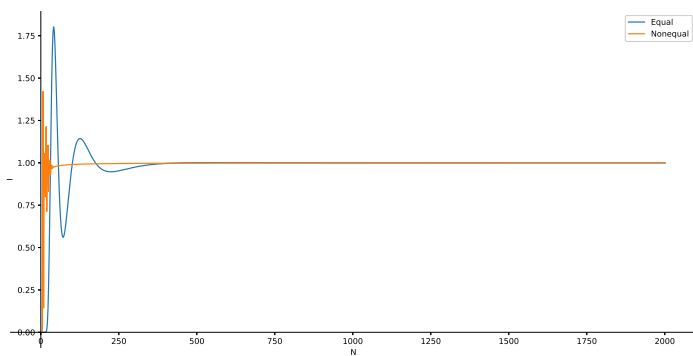


Figure 6: Simpson 规则下两种取点方式随着取点个数增多结果的收敛情况