《计算物理学A》开卷考试题(1-5讲)

【上交截止日期：2019年4月8日(周一)早上8:08】

(每题都要有详细解答思路、算法描述、结果，以及附上源程序及输入输出数据)

（一）【10分】编写两个程序，实现任意十进制数与其规范化的二进制双精度浮点数编码间的相互转换，并列举足够算例说明你程序的正确性。

（二）【10分】高斯求积具有很高的精确性，请分别构造如下三种非标准权函数的高斯求积公式的求积系数和节点：

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1); \tag{1}$$

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2); \tag{2}$$

$$\int_{-1}^1 (1+x^2) f(x)dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1). \tag{3}$$

（三）【10分】考虑A和B两类原子核随时间的放射衰变问题，t时刻，其布居数分别为$N_A(t)$和$N_B(t)$。假定A类核衰变为B类核，B类核可以继续衰变，满足以下微分方程组：

$$\frac{dN_A}{dt} = -\frac{N_A}{\tau_A}, \tag{4}$$

$$\frac{dN_B}{dt} = \frac{N_A}{\tau_A} - \frac{N_B}{\tau_B}, \tag{5}$$

其中，τ_A和τ_B为衰变时间常数。设时间起始点为$t_i = 0$时$N_A(t_i) = N_B(t_i) = 1$。（1）请给出上述方程的解析解；（2）使用合适算法数值求解上述耦合微分方程；（3）固定$\tau_A = 1$秒，分别讨论$\tau_B = 0.1$秒, 1秒, 10秒三种情况下的短期和长期衰变行为。选取$\tau_B = 10$秒这种情况，讨论你的数值算法的误差，展示取不同时间步长$\Delta t = 0.2, 0.1, 0.05$时与解析结果的比较。

（四）【10分】在飞机设计中，已知机翼下轮廓上数据如下表，加工时，需要x每改变0.1米时的y 值，利用自然边界条件，试用三次样条插值估计任意一点y的值，与原始数据点一起在同一张图上绘制出飞机的轮廓曲线。

x	0	3	5	7	9	11	12	13	14	15
y	0	1.2	1.7	2.0	2.1	2.0	1.8	1.2	1.0	1.6

（五）【15分】课堂上讲过，带宽为$2m+1$的对称正定带状矩阵$\mathbf{A}$，可以分解为$\mathbf{A} = \mathbf{LDL}^T$，其中$\mathbf{L}$为下半带宽为$m$的带状阵。请根据课堂上讨论的一般对称正定带状系数矩阵方程组$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$的直接解法编写程序，注意计算时空复杂度要做到最小。给定对称阵带状矩阵$\mathbf{A}$，$m = 2$，其非零

元素: $a_{11}=a_{nn}=5$；$a_{ii}=6\ (i=2,...,n-1)$；$a_{i,i-1}=4\ (i=2,...,n)$；$a_{i,i-2}=1\ (i=3,...,n)$。右端向量$\mathbf{b}=(60,120,...,120,60)^T$。请取$n=100$和10000两个算例，展示你的结果。

（六）【10分】设有稀疏矩阵$\mathbf{A}$，即对角元均为3，两个次对角元均为-1；**除此三对角线之外但处于位置**$(i,n+1-i)\ \ (i=1,2,...,n)$**上的元素，值恒为**$\frac{1}{2}$；其余元素为0。例如，形式如下：

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} 3 & -1 & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2} \\ -1 & 3 & -1 & \cdots & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -1 & 3 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \cdots & 3 & -1 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & \cdots & -1 & 3 \end{bmatrix}. \tag{6}$$

对$\mathbf{b}=(2.5,1.5,\cdots,1.5,1.0,1.0,1.5,\cdots,1.5,2.5)^T$，请用共轭梯度法求解线性方程组$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$，相邻两次的迭代误差要求小于$\varepsilon=10^{-6}$。分别取$n=100$和$n=10000$两个算例，展示你的结果。

（七）【35分】在大多数量子力学教材里，给出了解析求解氢原子定态波函数的全过程，其归一化的束缚态波函数为：

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)=\sqrt{\left(\frac{2}{n}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}\mathrm{e}^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)Y_l^m(\theta,\phi), \tag{7}$$

其中$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$为广义拉盖尔多项式，而$\rho=\frac{2r}{n}$。广义拉盖尔多项式$L_n^\alpha(x)$满足以下递推关系式：

$$L_n^\alpha(x) = L_n^{(\alpha+1)}(x)-L_{n-1}^{(\alpha+1)}(x), \tag{8}$$

$$xL_n^{(\alpha+1)}(x) = (x-\alpha)L_n^\alpha(x)+(n+\alpha)L_{n-1}^\alpha(x), \tag{9}$$

头几阶的具体表达式为：$L_0^\alpha(x)=1, L_1^\alpha(x)=-x+\alpha+1, L_2^\alpha(x)=\frac{1}{2}\left[x^2-2(\alpha+2)x+(\alpha+1)(\alpha+2)\right]$，$L_3^\alpha(x)=\frac{1}{6}\left[-x^3+3(\alpha+3)x^2-3(\alpha+2)(\alpha+3)x+(\alpha+1)(\alpha+2)(\alpha+3)\right]$.

在方程(7)中，$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi)$的角向部分$Y_l^m(\theta,\phi)$ 是大家所熟知的球谐函数：

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}, \tag{10}$$

关联勒让德函数$P_l^m(x)$满足偏微分方程：

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{dP}{dx}\right]+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right]P=0, \quad x=\cos\theta, \tag{11}$$

其中$l=0,1,2,\cdots$，而$m=-l,-l+1,\cdots,0,\cdots,l-1,l$。

请解决以下问题：

（1）【10分】寻求可靠算法，编写程序数值求解广义拉盖尔多项式$L_n^\alpha(x)$。对$n=3,10,30$，分别列表给出$\alpha=2,20,40$和$x=10^{-3},10^0,10^2$各种组合时的数值结果。

（2）【10分】请自行查阅相关数学资料，设计算法，编写出高效而准确子函数程序Ylm，对任意给定L, M, θ, ϕ，返回精确的Ylm(L, M, θ, ϕ)值。作为测试，固定$\phi = \pi/5$，而$\theta = \pi/1000, 3\pi/10, 501\pi/1000$，列表给出$L = 100, 500, 1000$，而$M$分别为$1, L/100, L/10, L-1$时，你的程序给出的数值结果。

（3）【5分】结合你的(1)、（2）程序，利用一定的作图软件，若以z为极轴，在x-y平面上展示电子的密度分布$\rho = |\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2$，其中$n = 2, l = 1, m = \pm 1, 0$。

（4）【10分】试数值计算当$n = 3, l = 1, m = 1$时的氢原子体系总能量$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$，要求误差不大于$10^{-6}$。【$E_{311}$准确值为：$-\frac{1}{2n^2} = -\frac{1}{18}$】。**此小问提示：**球坐标系中氢原子的哈密顿算符为$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$，而球坐标系中的拉普拉斯算符为：

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \tag{12}$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\mathcal{L}}^2}{r^2}. \tag{13}$$

以下公式对你可能有用：

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle = \iiint \Psi^* (H\Psi) r^2 dr \sin\theta d\theta d\phi \tag{14}$$

$$\hat{\mathcal{L}}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \tag{15}$$

$$Y_1^1(\theta, \phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{i\phi} \tag{16}$$

$$L_1^\alpha(x) = -x + \alpha + 1 \tag{17}$$

注意，角度部分的微积分可解析求出，在$(0, 60]$区间离散r，关于r的导数可利用有限差分近似。