计算物理 1-5 讲作业提示

参照题目1的做题格式

1 十进制整数与双精度浮点数的相互转换

1.1 问题描述

写两个程序, 实现任意十进制数于其规范化的二进制双精度浮点数编码间的相互转换.

1.2 解答思路

十进制转 double 编码(子程序名称)：

step 1：先确定符号位

step 2：分开计算整数部分和小数部分的二进制表示

step 3：然后确定指数, 根据整数部分有无, 分两种情况计算. 然后加上偏移量 1023

......

PS:

- 整数部分很大，转化为二进制后尾数已超出52位：此时不需要再计算小数部分；
- 整数部分为0. 此时需要通过确定第一个不为0 的小数位置才能确定指数；
- 十进制数太小，或直接为0：在上一步基础上添加上限，达到上限则视为0处理

double 编码转十进制(子程序名称)：

同上格式

1.3 算法描述

Algorithm 1 十进制转 double

(see dec2db.cpp)

```
...//input dec
db[64]={0};
if(dec<0) db[1]=1;
split dec into 2 parts: dec_int, dec_dec;
a[]=convert dec_int to binary array;
exponent=length of a[]-1;
if(dec_int==0)  //negative exponent
......
return db[ ];
```

Algorithm 2 double 编码转十进制

同上格式

1.4 计算结果与讨论（自行输出设计，简单直观即可）

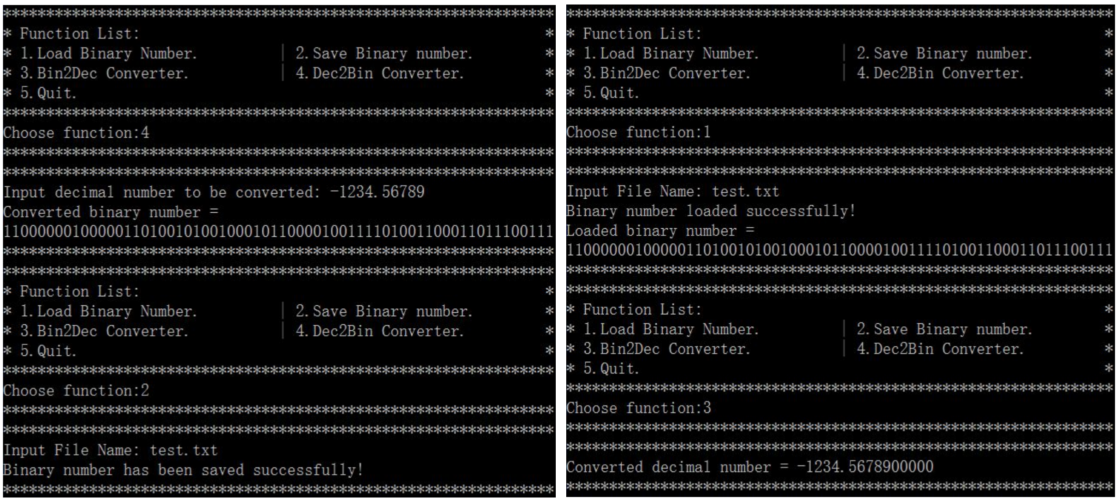


图 1: 十进制数与双精度浮点数转换

讨论：输出结果正确与否，以及其他需要说明的程序问题。

1.5 源代码

1.5.1 十进制转 double

```
#include<iostream>
#include<math.h>

using namespace std;

int main() {
double input;
```

……

展示详细的代码，需要合理的注释(输入输出，每一step的注释)

1.5.2 double 编码转十进制

2 带权的高斯插值求积

2.1 问题描述

构造以下三种非标准权函数的 Gauss 求积公式的求积系数与节点:

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) \tag{4}$$

$$\int_{-1}^1 (1+x^2) f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) \tag{5}$$

$$\int_0^1 \sqrt{x} f(x)\,\mathrm{d}x \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2) \tag{6}$$

2.2 解答思路

对于带权的高斯求积公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{7}$$

$x_k\,(k=0,1,2,\cdots,n)$ 为高斯点的充要条件是：

$\omega(x) = \prod\limits_{k=0}^{n}(x-x_k)$ 为区间 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 的正交多项式, 即

$$\int_a^b \rho(x)\omega(x)P(x)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{8}$$

其中 $P(x)$ 是任意最高项次数不超过 n 的多项式.

问题中已经给定了 $a, b, \rho(x), n$. 应用式8, 使 $P(x) = 0, x, x^2, \cdots, x^n$,$\omega(x) = x^{n+1} + \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$ 可以得到关于 a_i 的线性方程组. 由此我们可以解得 $\omega(x)$ 的多项式形式.

1 放射衰变问题

1.1 问题描述

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：

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

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。

3.2 解答思路（注意：只给其中一个的思路，其余需要自己思考）

$$\frac{\mathrm{d}N(t)}{\mathrm{t}} = -\frac{N(t)}{\tau}$$

利用有限差分不难得到

$$N((i+1)\Delta t) - N(i\Delta t) = -N(i\Delta t) \cdot \frac{\Delta t}{\tau}$$

从零时刻开始向前迭代即可.

4 三次样条插值

4.1 问题描述

对于飞机机翼加工，有以下数据 (单位:m)，利用三次样条插值和自然边界条件求其每隔 0.1m 的 y 值。

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

4.2 解答思路

结合三次样条插值和自然边界条件（边界处给出二阶导数的值且为0），我们可以得到三弯矩方程。方程的矩阵为对称正定三对角阵，利用追赶法即可解得各插值点的二阶导数，从而得到各段的三次函数。

$$\begin{bmatrix} 2 & \lambda_1 & & & \\ \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \mu_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ & & & \mu_{n-1} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-2} \\ M_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 - \mu_1 f_0'' \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1} - \lambda_{n-1} f_n'' \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} S(x) &= \frac{(x_{j+1}-x)^3}{6h_j}M_j + \frac{(x-x_j)^3}{6h_j}M_{j+1} + c_1 x + c_2 \\ c_1 &= \frac{y_{j+1}-y_j}{h_j} - \frac{1}{6}h_j(M_{j+1}-M_j) \\ c_2 &= \frac{y_j x_{j+1} - y_{j+1}x_j}{h_j} - \frac{1}{6}h_j(x_{j+1}M_j - x_j M_{j+1}) \end{aligned} \tag{9}$$

5 对称正定带状矩阵的方程组

5.1 问题描述

给定对称带状矩阵 A，带宽 2m+1,m=2，其非零元素为：$a_{11} = a_{nn} = 5; a_{ii} = 6(i = 2,3...n-1); a_{i,i-1} = 4(i = 2,3,...n); a_{i,i-2} = 1(n = 3,4,...n)$. 其右端向量为 $b = (60,120,...,120,60)^T$，

取 n=100 和 10000 两个算例.（将结果以图像形式展示出来：横轴为i, 纵轴为Xi）

5.2 解答思路

题中的所要求解的方程为：

$$\begin{bmatrix} 5 & 4 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 4 & 6 & 4 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 6 & 4 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 6 & 4 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 6 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 6 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ \vdots \\ x_{n-2} \\ x_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 60 \\ 120 \\ 120 \\ 120 \\ 120 \\ \vdots \\ 120 \\ 60 \end{bmatrix}$$

系数矩阵$\mathbf{A}$是一个对称正定带状矩阵(带宽为$2m+1$, $m=2$)，可以稳定地分解为$\mathbf{A} = \mathbf{LDL^T}$，其中$\mathbf{L}$为下半带宽为$m=2$的下三角带状阵。而$\mathbf{D}$为对角元素为$\mathbf{L}$对角元素倒数的对角阵。考虑到这两点，在存储矩阵$\mathbf{A}$时可以只用三个向量存储：

$$\mathbf{a} = [1,1,1,\cdots,1,1],\ length = n-2$$
$$\mathbf{b} = [4,4,4,\cdots,4,4],\ length = n-1$$
$$\mathbf{c} = [5,6,6,\cdots,6,5],\ length = n$$

同时，在进行$\mathbf{A} = \mathbf{LDL^T}$分解时采用原地工作的方式，将$\mathbf{L}$存储在$\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$三个向量中。

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} c_0 & & & & & \\ b_0 & c_1 & & & & \\ a_0 & b_1 & c_2 & & & \\ & a_1 & b_2 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{n-3} & b_{n-2} & c_{n-1} \end{bmatrix}$$

对角矩阵$\mathbf{D}$无需额外存储，需要调用时只需使用关系 $d_i = 1/c_i$, $i = 0,1,2,\cdots,n-1$ 即可。

将右端向量$\mathbf{d}$也进行分解：$\mathbf{d} = \mathbf{LD\tilde{d}}$，于是可得等价方程组：$\mathbf{L^Tx} = \mathbf{\tilde{d}}$，为上三角方程组，可用回代法直接求解。

这样，若方程组包含n个未知数，则共需申请$4n-3$个双精度浮点的空间，是最少的空间开销。

6 共轭梯度法解线性方程组

6.1 问题描述

求解 n 元的线性方程组 Ax=b, 取 n=100 和 10000, 要求相邻迭代误差小于 10^{-6}.

$$A=\begin{pmatrix} 3 & -1 & 0 & \dots & 0 & \frac{1}{2} \\ -1 & 3 & -1 & \dots & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -1 & 3 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \dots & 3 & -1 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & \dots & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$b=(2.5,1.5,\dots,1.5,1.0,1.0,1.5,\dots,2.5)^T$$

6.2 解答思路

不难由对角占优和对角元都大于 0 看出矩阵 A 是对称正定矩阵, 故可以用共轭梯度法直接解之.

判停标准为残差向量2范数小于给定值: $\epsilon=0.000001$

输入：$\mathbf{x},\mathbf{A},\mathbf{b}$；输出：$\mathbf{x}$.

$\mathbf{r}:=\mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x}$;

$\mathbf{p}:=\mathbf{r}$;

$k=0$; (记录迭代步数)

While 不满足判停标准 Do

$\alpha:=(\mathbf{r}^{\mathbf{T}}\mathbf{r})/(\mathbf{p}^{\mathbf{T}}\mathbf{A}\mathbf{p})$; (计算搜索步长)

$\mathbf{x}:=\mathbf{x}+\alpha\mathbf{p}$; (更新解)

$\tilde{\mathbf{r}}:=\mathbf{r}$ (保留上一个残差向量)

$\mathbf{r}:=\mathbf{r}-\alpha\mathbf{A}\mathbf{p}$; (计算新的残差向量)

$\beta:=(\mathbf{r}^{\mathbf{T}}\mathbf{r})/(\tilde{\mathbf{r}}^{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{r}})$;

$\mathbf{p}:=\mathbf{r}+\beta\mathbf{p}$; (计算新的搜索方向)

$k:=k+1$;

END

7 氢原子 （思路千万条，不要局限）

7.1 拉盖尔多项式

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, A0, A0和x A0^{-3}, A0^0, A0^{2}各种组合时的数值结果。

7.2 球谐函数（仅供参考，可能有更简单的思路）

球谐函数为

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

法一：其中 P_l^m 为连带勒让德函数,$x \in [-1, 1]$

$$P_l^m(x) = (-)^m\frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}(x^2-1)^l \tag{11}$$

连带勒让德函数满足递归关系

$$P_l^m(x) = \frac{2l-1}{l-m}xP_{l-1}^m - \frac{l+m-1}{l-m}P_{l-2}^m \tag{12}$$

实际计算中利用 double 类型时, 连带勒让德函数的值易发生上溢, 故我们定义约化的连带勒让德函数为

$$\widetilde{P}_l^m(x) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(x) \tag{13}$$

满足的递归关系变为

$$\widetilde{P}_l^m(x) = x\sqrt{\frac{4l^2-1}{l^2-m^2}}\widetilde{P}_{l-1}^m(x) - \sqrt{\frac{2l+1}{2l-3}\frac{(l-1)^2-m^2}{l^2-m^2}}\widetilde{P}_{l-2}^m(x) \tag{14}$$

球谐函数写为

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \widetilde{P}_l^m(\cos(x))\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi} \tag{15}$$

由式11不难推出

$$\widetilde{P}_m^m(x) = (-)^m\frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^m m!}(2m)!\sqrt{\frac{2m+1}{4\pi(2m)!}} = (-)^m(1-x^2)^{m/2}\sqrt{\frac{(2m+1)!!}{4\pi(2m)!!}} \tag{16}$$

又因为 $m > l$ 时 $\widetilde{P}_l^m(x) = 0$, 利用式14和16, 可以求出任意的 $\widetilde{P}_m^m(x)$.

为了防止上溢, 式16中的双阶乘展为 $\frac{3}{2}\cdot\frac{5}{4}\cdots\frac{2m+1}{2m}$ 的形式计算.

球谐函数中关于 ϕ 的部分, 利用欧拉公式展开即得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi} = \cos(m\phi) + \mathrm{i}\sin(m\phi) \tag{17}$$

由式11不难推出

$$\widetilde{P}_m^m(x) = (-)^m \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^m m!}(2m)!\sqrt{\frac{2m+1}{4\pi(2m)!}} = (-)^m(1-x^2)^{m/2}\sqrt{\frac{(2m+1)!!}{4\pi(2m)!!}} \tag{16}$$

又因为 $m > l$ 时 $\widetilde{P}_l^m(x) = 0$, 利用式14和16, 可以求出任意的 $\widetilde{P}_m^m(x)$.

为了防止上溢, 式16中的双阶乘展为 $\frac{3}{2}\cdot\frac{5}{4}\cdots\frac{2m+1}{2m}$ 的形式计算.

球谐函数中关于 ϕ 的部分, 利用欧拉公式展开即得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi} = \cos(m\phi) + \mathrm{i}\sin(m\phi) \tag{17}$$

需要注意的是, 当 $\theta = \pi/1000, L = 500, M = 499$ 和 $\theta = \pi/1000, L = 1000, M = 999$ 时, 由于 double 类型的限制, 将发生下溢, 需要将值分为几个部分再进行计算, 有

$$\widetilde{P}_{1000}^{999}(\frac{\pi}{1000}, \frac{\pi}{6}) = -(\sin(\frac{\pi}{1000}))^{999}\cos(\frac{\pi}{1000})\sqrt{\frac{4\cdot 1000^2-1}{1000^2-999^2}\cdot\frac{1999!!}{4\pi\cdot 1998!!}} \tag{18}$$

$$\widetilde{P}_{500}^{499}(\frac{\pi}{1000}, \frac{\pi}{6}) = -(\sin(\frac{\pi}{1000}))^{499}\cos(\frac{\pi}{1000})\sqrt{\frac{4\cdot 500^2-1}{500^2-499^2}\cdot\frac{999!!}{4\pi\cdot 998!!}} \tag{19}$$

下溢主要来自于 $\sin(\frac{\pi}{1000}$, 将该值分为尾数与指数分别计算即可, 最终结果见表中.

另外,mathematica 中计算时精度亦有限,$Y_{1000}^{999}(\frac{\pi}{1000}, \frac{\pi}{6})$ 的实数部分由于 $\cos(\frac{999\pi}{6}) = 0$, 理应为 0, 但 mathematica 输出的实数部分却为 $-1.11 * 10^{-2512}$. 同样由于本程序中 π 和三角函数精度有限, 对于三角函数重新作了处理, 加入对半整数和整数倍 Pi 的判断.

法二.　球谐函数

由于题中任务是求解球谐函数$\mathrm{Y_{lm}}(\theta,\varphi)$在特定 l,m,$\theta$,$\varphi$输入下的几个点值，而且 l，m 可能极大。可以发现球谐函数的关键计算是对连带勒让德多项式，以及其前面的归一系数的计算，即使计算好了连带勒让德多项式的系数再进行秦九韶算法，还需要至少 l 次乘法与加法才能得到结果，而求得多项式表达式所需要的大量系数乘法则显得很不值当（与此相反，如果需要）。因而采用函数值递推的办法，而非多项式系数递推。勒让德多项式递推关系及首项如下：

$$P_l^m(x) = ((2l-1)xP_{l-1}^m(x) - (l+m-1)P_{l-2}^m)/(l-m)$$

$$P_{l+1}^{l+1}(x) = -(2l+1)\sqrt{1-x^2}\;\;P_l^l(x)$$

$$P_l^l(x) = (-)^l(2l-1)!!\sqrt{1-x^2}^{\,l}$$

$$P_{l+1}^l(x) = x(2l+1)P_l^l(x)$$

由于球谐函数有前面的归一系数，计算高阶函数时更不容易超出表示边界，故选用球谐函数自身的递推关系，递推公式与首项如下·。计算中尽量提取公因数，减少计算次数。

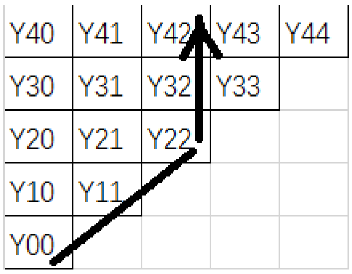
$$Y_l^m(x) = \left(\sqrt{2l-1}\,xY_{l-1}^m(x) - \sqrt{\frac{(l-m-1)(l+m-1)}{2l-3}}\,Y_{l-2}^m\right)\sqrt{\frac{2l+1}{l^2-m^2}}$$

$$Y_{l+1}^l(x) = x\sqrt{2l+3}\ \ Y_l^l(x)$$

$$Y_{l+1}^{l+1}(x) = -\sqrt{\left(1+\frac{1}{2l+2}\right)}\sqrt{1-x^2}Y_l^l(x)$$

$$\mathrm{Y}_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

从而计算$\mathrm{Y}_\mathrm{l}^\mathrm{m}$即寻找一条在阶梯网格中从$\mathrm{Y}_0^0-\mathrm{Y}_\mathrm{l}^\mathrm{m}$的路径，程序的方案是从00->mm->m+1m->lm. 比如Y_4^2的计算过程就如图所示。



特别的，由于计算中涉及一些较大的阶乘运算和大数除法，所以我们只能采用"long double数据类型（DevC++中可以使用）。

7.3 电子密度（画图不提示）

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$n = 2, l = 1, m = \pm 1, 0$。

7.4 问题描述

求氢原子 n=3,l=1,m=1 时的体系总能量 E, 要求误差不大于 10^{-6},(准确值为-1/18).

解答思路

球坐标氢原子的归一化束缚态波函数是

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{3}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \mathrm{e}^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{20}$$

其中 $\rho = 2r/n$,L_{n-l-1}^{2l+1} 为拉盖尔多项式,$Y_l^m(\theta,\varphi)$ 为球谐函数. 体系的哈密顿算符为

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{\mathcal{L}}^2}{r^2}\right) - \frac{1}{r} \tag{21}$$

代入本题的参数, 得

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = \frac{4}{81\sqrt{6}} \mathrm{e}^{-r/3} r(6-r) Y_1^1(\theta,\varphi) \tag{22}$$

进一步有（要求有推导过程）

$$E = \iiint \Psi^* \hat{H} \Psi \,\mathrm{d}V = \frac{8}{3^9}\int_0^{\infty} f\left(f(1-r) - rf' - \frac{r^2 f''}{2}\right) \mathrm{d}r \tag{23}$$

当 r 很大时积分函数已经很小, 所以我们取

$$E = \frac{8}{3^9}\int_0^{\text{[redacted]}} f\left(f(1-r) - rf' - \frac{r^2 f''}{2}\right) \mathrm{d}r \tag{24}$$

式中 $f(r) = \mathrm{e}^{-r/3} r(6-r)$, 取 $S(r) = f(f(1-r) - rf' - \frac{r^2 f''}{2})$, 对 S 用梯形公式进行变步长积分即可. 对于 f 的一、二阶导数, 用中心差分公式计算. 步长从 1 开始逐次取半直至 $|E + 1/18| < 10^{-6}$.