计算物理第二次开卷考试

姚铭星 1700011321

目录

1 马修方程

1.1 问题描述

在离子阱，椭圆鼓的运动，射频四极矩，浮体的稳定性等问题中等等物理场景中，马修方程 (Mathieu Equation) 都发挥着重要的作用。本题的目标是求出马修方程的本征值。正则形式的马修方程：

$$-\frac{d^2\Psi(\phi)}{d\phi^2}+2q\cos(2\phi)\Psi(\phi)=A\Psi(\phi) \tag{1}$$

在基于傅里叶基矢选取基函数为：

$$f_k(\phi)=\frac{1}{2M+1}\sum_{n=-M}^{n=M}\Phi_n^*\left(\phi_k\right)\Phi_n(\phi) \tag{2}$$

这时方程 (1) 在这组基矢下可以被重新写为：

$$\mathbf{H}\Psi=[\mathbf{T}+\mathbf{V}]\Psi=A\Psi \tag{3}$$

其中 A 为马修方程的本征值。

1.2 QR 分解算法

方程（3）中的矩阵 H 是稠密矩阵，因此本征值用 QR 分解的方法最为合适。算法是基于讲义的倒数第 2、3 页完成的。

Householder 变换：

```
def Householder(A):
        '''
        Householder变换，返回Hessengerg矩阵和变换矩阵(A,G)
        输入A:矩阵
        '''
        n = A.shape[0]
        P = np.identity(n)
        for i in range(n-2):
                # 构建反射矩阵
                x = A[i+1:,i] # 取矩阵列共(n-i-1)维
                e = np.array([1]+[0 for x in range(n-i-2)]) # 构造单位矢量
                v = np.sign(x[0])*norm(x)*e+x # 构造反射矢量
                v = v/norm(v) #归一化
                G = np.array([[2*x*y for x in v]for y in v])
                H = lin.block_diag(np.identity(i+1),np.identity(n-i-1)-G)# 构建反射矩阵
                A = H@A@H
```

```
            P = H@P
        return A,P
```

QR 分解:

```
def decompose(A):
        '''
        利用Givens变换分解, A为上海森堡矩阵
        返回(Q,R)
        '''
        n = A.shape[0]
        G = np.identity(n) # Givens 矩阵
        for i in range(n-1): # 共(n-1)个非对角元需要消去
                cos = A[i,i]/np.sqrt(A[i,i]**2+A[i+1,i]**2)
                sin = A[i+1,i]/np.sqrt(A[i,i]**2+A[i+1,i]**2)
                G1 = lin.block_diag(np.identity(i),np.array([[cos,sin],[-sin,cos]]),np.
                A = G1@A
                G = G@G1.T
        return G , A
```

QR 算法:

```
def QR(A):
        '''
        QR算法, 输入Hessengberg矩阵A
        返回特征值和特征向量
        '''
        n = A.shape[0]
        i = 0
        N = 10**5
        e = 10**(-8)
        # G = np.identity(n)
        k = n-1
        res = [] # 储存本征矢量
        while k > 0:
                if abs(A[k,k-1])<e: # 本征值必然是实数
                res.append(A[k,k]) # 本征值代入
                A = A[:k,:k] # 取子阵
                k = k-1
                s = A[k,k] # 位移因子
                A=A-s*np.identity(k+1)
                Q, R = decompose(A)
                A = R@Q + s*np.identity(k+1)
                i+=1
```

```
                if i > N:
                    raise("Too many Loops!")
            res.append(A[0,0])# 加入最后一个本征值
        return res
```

1.3 本征值图线

计算出的前 11 个本征值如图（绘图调用了 *matplotlib.pyplot* 方法）

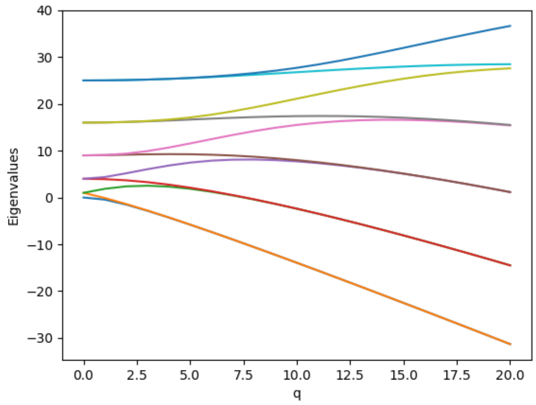


图 1: 前 11 个本征值随 q 的变化关系

1.4 偶宇称解

不难证明：

$$f_k(-\phi) = f_{2M+1-k}(\phi) \tag{4}$$

因此，有：

$$\begin{aligned}\Psi(-\phi) &= \sum_{k=1}^{2M+1} C_k f_k(-\phi) \\ &= \Psi(-\phi) = \sum_{k=1}^{2M+1} C_k f_{2M+1-k}(\phi)\end{aligned} \tag{5}$$

判断奇偶宇称的方式为判断 C_k 和 C_{2M+1-k} 的关系。注意到当 $q=0$ 时会出现简并现象，实际上，可以通过重新线性组合的方式，得到新的满足宇称对称性的解

$$\begin{cases} \frac{1}{2}(\Psi(\phi)+\Psi(-\phi)), & \text{Even} \\ \frac{1}{2}(\Psi(\phi)-\Psi(-\phi)) & \text{Odd} \end{cases} \tag{6}$$

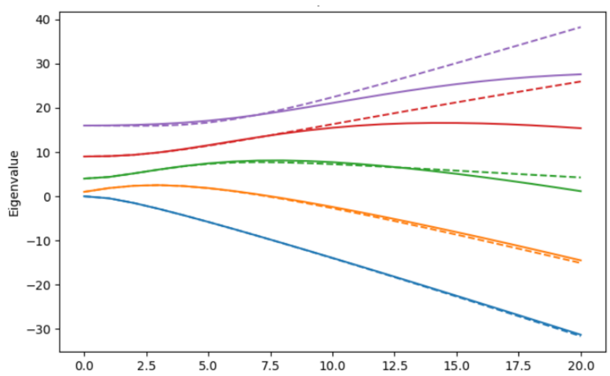


图 2: 虚线为 M=5，实线为 M=40

1.5 $M = 50,q = 10$ 的情况

直接按上问的方法求解出本征值：由于存在以下关系式可以直接画图

```
[-13.936979956659078, -2.3991424000365744, 7.717369849780097, 15.502784369733046, 21.10463370865778]
```

$$C_k = 2\pi\Psi\left(\phi_k\right) = 2\pi\Psi\left(\phi_k - 2\pi\right) \tag{7}$$

实际上由于利用正交矩阵求出的本征矢量误差较大，实际上可以使用反幂

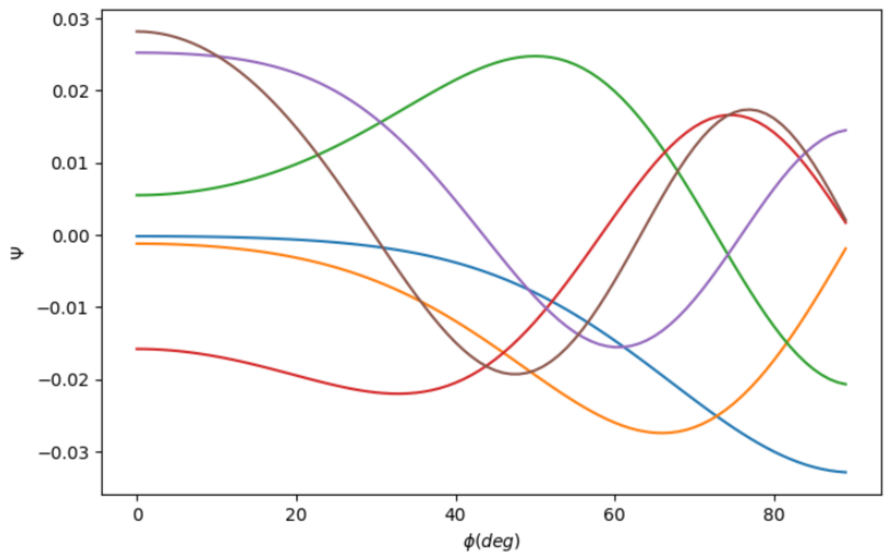


图 3: 前六个本征矢和

法来利用本征值迭代得到本征矢。

2 氢原子电离

2.1 鞍点法近似

题文的背景为求解氢原子的跃迁问题，即电子从束缚态跃迁到自由态的问题。问题的关键是求解跃迁矩阵元：

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{p}}^{0}\left(t_f, t_i\right)_{DI} &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left[\frac{2^{\frac{3}{2}} \left(2I_p\right)^{\frac{5}{4}}}{\pi \left(\mathbf{q}^2 + 2I_p\right)^2} \right] \right\} \cdot \mathbf{E}(t) e^{iS(t)} \\ &= 2^{\frac{7}{2}} \left(2I_p\right)^{\frac{5}{4}} \int_{t_i}^{t_f} dt \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}(t)}{\pi \left(\mathbf{q}^2 + 2I_p\right)^3} e^{iS(t)} \\ S(t) &= \int_0^t d\tau \left[\frac{1}{2} (\mathbf{p} + \mathbf{A}(\tau))^2 + I_p \right] \end{aligned} \tag{8}$$

求解给定动量 p 下的鞍点方程：

$$\frac{\partial S(t)}{\partial t} = 0, \qquad t = t_s = t_r + it_i \tag{9}$$

从而得到鞍点法近似下的积分近似值：

$$M_{\mathrm{p}}^{0}\left(t_f, t_i\right)_{SPM} = -\frac{\left(2I_p\right)^{\frac{5}{4}}}{\sqrt{2}} \sum_{\alpha} \frac{1}{S''\left(t_{s\alpha}\right)} e^{iS\left(t_{s\alpha}\right)} \tag{10}$$

其中求和为对所有物理解 $(Im(t_\alpha) > 0)$ 的鞍点 α 求和。

2.1.1 非线性方程求根

为了简单起见，下面记 $B = \frac{A_0}{2}$. 鞍点方程：

$$0 = \frac{1}{2} q\left(t_{s\alpha}\right)^2 + I_p = \frac{1}{2} \left(B \sin\tau \left(1 - \cos\frac{\tau}{2}\right) \Big|_{\tau = \omega t_{s\alpha}} + p_z \right)^2 + I_p \tag{11}$$

通过代换 $x = e^{i\tau/2}$ 可以将上方程变为两个一元六次方程：

$$x^6 - 2x^5 + x^4 + D_{\pm} x^3 - x^2 + 2x - 1 = 0, \quad D_{\pm} = \frac{4}{B} \left(\mp \sqrt{2I_p} - \mathrm{i} p_z \right) \tag{12}$$

由于方程 11是一个实数方程，两个方程的六个根互为共轭关系，因此我们只需要求解 D_+ 的六个解，如果得到了 $\operatorname{Im} t_{s\alpha} < 0$ 的根，只需要进行对实轴的镜像对称即可（取共轭）。解出 x 之后只需要进行 $\tau = \frac{2}{i} \ln(x)$,$t_\alpha = \tau/\omega$

当求解出所有的根之后，在进行鞍点法积分时还会用到 $S(t_\alpha)$ 和 $S''(t_\alpha)$，它们都可以解析地求出：

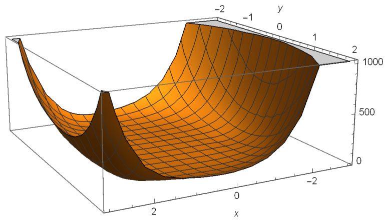
$$\partial_t^2 S(t) = \omega \partial_\tau g(\tau) = \omega q(\tau) \partial_\tau A(\tau) \tag{13}$$

$$\begin{aligned} q(\tau) &= B\sin\tau\left(1-\cos\frac{\tau}{2}\right)+p_z \\ \partial_\tau A(\tau) &= B\left(\cos\tau\left(1-\cos\frac{\tau}{2}\right)+\frac{1}{2}\sin\tau\sin\frac{\tau}{2}\right) \end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned} \omega S\left(\frac{\tau}{\omega}\right) = &\left(\frac{3}{8}B^2+\frac{1}{8}p_z^2+I_p\right)\tau-\frac{1}{3}Bp_z+Bp_z\left(\cos\frac{\tau}{2}-\cos\tau+\frac{1}{3}\cos\frac{3\tau}{2}\right) \\ &-B^2\left(\sin\frac{\tau}{2}-\frac{1}{16}\sin\tau-\frac{1}{6}\sin\frac{3\tau}{2}+\frac{3}{16}\sin(2\tau)-\frac{1}{10}\sin\frac{5\tau}{2}\right. \\ &\left.+\frac{1}{48}\sin(3\tau)\right) \end{aligned} \tag{15}$$

2.1.2 代码实现

多项式求复数根采用的为牛顿收缩法，从而求得多项式方程的所有复数根。为了更好地选取初始的猜测解的位置，首先先画个图看一看根的分布。可以看到，当 x 的实部和虚部超过 2 时，函数的模值将超过 100。由



Cauthy 定理，可以合理猜测根的范围大致在 2 以内，因此初始化的随机数生成根的范围为实部和虚部均小于 2 的实数。

```
def rand():
        return 4*np.random.random_sample()-2

def Newton_deflation(a,N=10**3,e=10**(-14)):
        '''
        牛顿法解方程
        输入a为多项式类<class 'numpy.poly1d'>
        N为最大迭代次数,e为迭代精度
        返回一个根和收缩多项式
        '''
        n = 0
        x = complex(rand(),rand())# 初始取值
        while n<N:# 控制迭代次数
                d = np.poly1d((1,-x))
                q , b = a/d # numpy.poly1d中已经重载运算符
```

```
            if abs(b[0])<e: # 当余项小于某一上界
                # print(b)
                return x, q
            x-=b[0]/q(x) # 牛顿法q(x)即为多项式的导数
    else:
        print(str(n)+" loops")
        return x, q
```

鞍点法求出的根为：

```
Re =  677.1009140604459 Im =  64.20228674142425
Re =  263.9833738578336 Im =  36.80784948552076
Re =  416.73193730586644 Im =  27.879798113027274
Re =  750.6437460397863 Im =  84.50511547794297
Re =  24.0598180994314 Im =  119.54353926968783
Re =  73.87985704437476 Im =  108.16876190566285
```

为了能体现出振荡的效果，在区间内取了 100 个数据点

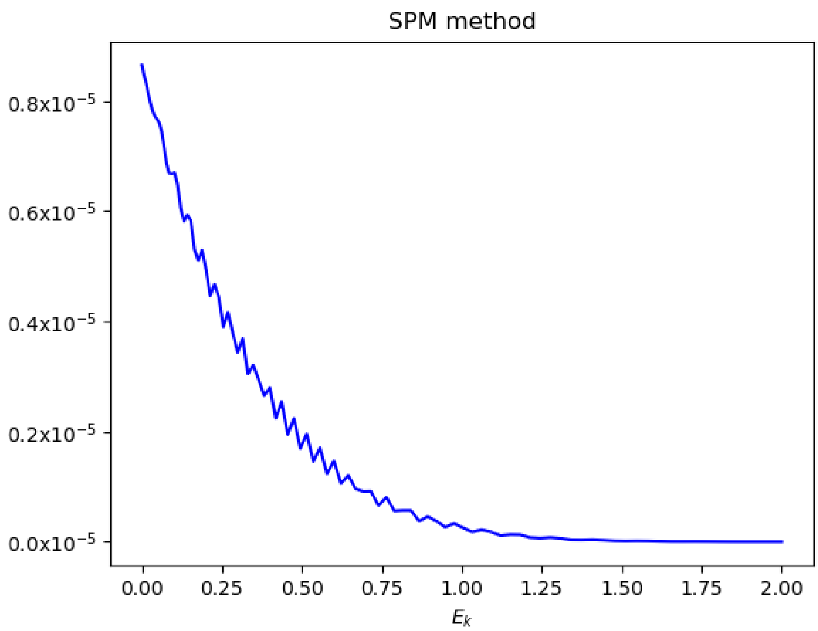


图 4: 鞍点法导出的色散关系

2.2 直接积分法

实际上直接积分也能求解出矩阵元

$$M_{\mathbf{p}}^{0}\left(t_{f}, t_{i}\right)=\frac{2^{7/2}\left(2 I_{p}\right)^{5/4}}{\pi} \int_{t_{i}}^{t_{f}} \mathrm{d}\tau \frac{-q(\tau) \partial_{\tau} A(\tau)}{\left(q(\tau)^{2}+2 I_{p}\right)^{3}} \mathrm{e}^{\mathrm{i} S(\tau/\omega)} \tag{16}$$

其中 $q(\tau), \partial_{\tau} A(\tau), S(t)$ 在之前已经求出。接下来可以直接用复化梯形求积公式计算

$$\begin{aligned} & T_{n}=\sum_{k=0}^{n-1} \frac{h}{2}\left[f\left(x_{k}\right)+f\left(x_{k+1}\right)\right] \\ & =\frac{h}{2}\left\{\left[f(a)+f\left(x_{1}\right)\right]+\left[f\left(x_{1}\right)+f\left(x_{2}\right)\right]+\cdots+\left[f\left(x_{n-1}\right)+f(b)\right]\right\} \\ & =\frac{h}{2}\left[f(a)+2 \sum_{k=1}^{n-1} f\left(x_{k}\right)+f(b)\right] \end{aligned} \tag{17}$$

$$T_{2n}=\frac{T_{n}}{2}+\frac{h}{2} \sum_{k=0}^{n-1} f\left(x_{k+\frac{1}{2}}\right) \tag{18}$$

其中积分间隔为 $h=\frac{b-a}{n}$

2.3 结果展示

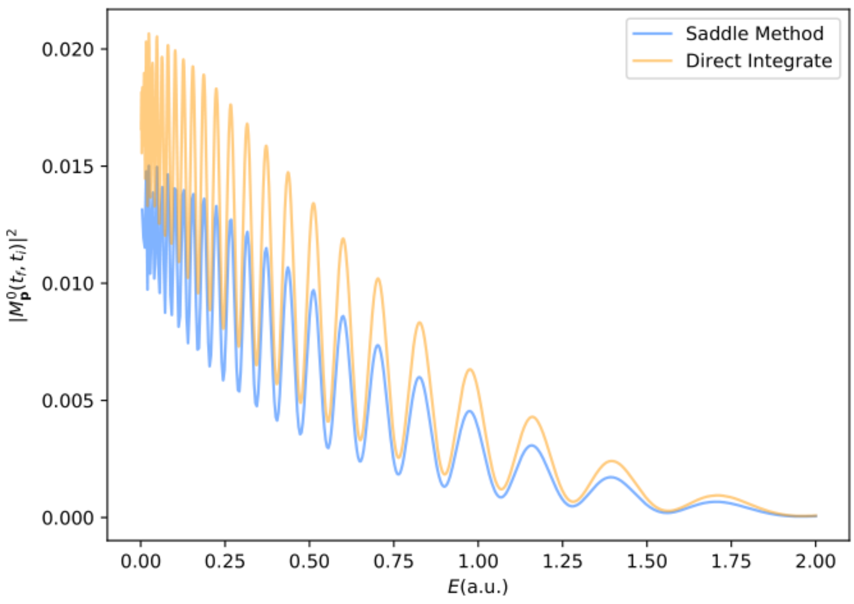


图 5: 直接积分和鞍点法的比较

注意，上面的绝对数值并不正确。

3 第三题：随机游走问题

由于此题小问较多，下面逐问回答

3.1 第一问

设 $s = 1 - p - q$ 为原地不动的概率：则有如下几种情况:

1. 到达 +3 的概率：p^3
2. 到达 +2 的概率：$\binom{3}{1} p^2 s$
3. 到达 +1 的概率：$\binom{3}{1} ps^2 + \binom{3}{1} p^2 q$
4. 原地不动的概率：s^3
5. 到达-1 的概率：$\binom{3}{1} qs^2 + \binom{3}{1} q^2 p$
6. 到达-2 的概率：$\binom{3}{1} q^2 s$
7. 到达-3 的概率：q^3

根据期望的定义

$$E[x] = \sum_x |x| \Pr[x] = 3((p+q)(1+2pq) - 4pq) \tag{19}$$

3.2 第二问

3.2.1 伪随机数产生器

伪随机采用线性同余产生器（LCG）方式产生

$$x_{n+1} = ax_n + c \pmod m \tag{20}$$

其中选取 $a = 1140678415$、$c = 12345$ 和 $m = 2^{31} - 1$, 选取默认的发生种子 x_0 为时间戳。

```python
from time import time

def pseudo_rand(n=1,x0 = int(time())):
        '''
```

```
        线性同余伪随机数产生
        '''
        m = 2**31-1
        a = 1140678415
        c = 12345
        res = []
        for _ in range(n):
                x0 = (a*x0+c)%m
                res.append(x0)
    res = [float(each)/m for each in res]
        return res
```

结果保存在*./res.txt* 中

3.3 第三问

3.3.1 代码实现

```
def Third_rand_walk(n=100):
        '''
        第三问
        '''
        a = pseudo_rand(n)
        # a = [np.random.random_sample() for _ in range(n)]
        sequ = [2*np.pi*each for each in a]
        x=y=0
        for each in sequ:
                x+=np.cos(each)
                y+=np.sin(each)
        return np.sqrt(x**2+y**2)
```

3.3.2 拟合数据

数据拟合采用正比拟合

$$\mathrm{E}[R] = a\sqrt{N} \tag{21}$$

利用最小二乘法的公式：

$$a = \frac{\sum_n x_n y_n}{\sum_n x_n^2} \tag{22}$$

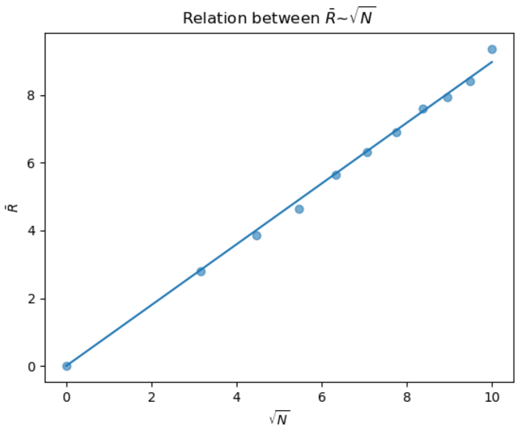
$$r = \frac{\sum_n x_n y_n}{\sqrt{\sum_n x_n^2 \sum_n y_n^2}} \tag{23}$$

3.3.3 结果展示

计算结果得到:

```
a = 0.8976766038832007
r = 0.9996727181674868
```

讲拟合出来的直线和散点图绘制在同一张图上得到：



3.4 第四问

设 $Z_n = X_n + iY_n$，有公式：

$$Z_n = \sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_k} \tag{24}$$

由于对于 θ 是均匀分布的，有：

$$\mathrm{E}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\right] = \int_0^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\theta}{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} = 0 \tag{25}$$

因此有：

$$\mathrm{E}\left[Z_n\right] = \sum_k 0 = 0 \tag{26}$$

这样可以导出

$$\mathrm{E}\left[X_n\right] = \mathrm{E}\left[Y_n\right] = 0 \tag{27}$$

方差计算：

$$\begin{aligned} Var(X_n) = E[X_n^2] &= \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} E[\cos\theta_k \cos\theta_l] \\ &= \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{2} = \frac{n}{2} \end{aligned} \tag{28}$$

同理可以计算得到

$$Var(Y_n) = \frac{n}{2} \tag{29}$$

3.5 第五问

X，Y 的相关性可以用协方差描述：

$$\begin{aligned} Cov(X_n, Y_n) &= E[X_n Y_n] - E[X_n]E[Y_n] \\ &= \sum_{k,\ell} \mathrm{E}\left[\cos\theta_k \sin\theta_\ell\right] \end{aligned} \tag{30}$$

分下面两种情况讨论

$$\begin{cases} k \neq \ell, & \int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\theta_k}{2\pi}\frac{\mathrm{d}\theta_\ell}{2\pi} \cos\theta_k \sin\theta_\ell = 0 \\ k = \ell, & \int_0^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\theta_k}{2\pi} \cos\theta_k \sin\theta_k = 0 \end{cases} \tag{31}$$

故随机变量 X_n 与 Y_n 可视为独立

3.6 第六问

当 $n \to \infty$ 时，根据中心极限定理，随机变量 $\sqrt{n}\,(S_n - \mu)$ 收敛到多维正态分布 $N(0, \Sigma)$ 对题文中情况，为二维分布

$$N(\mu, \Sigma) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^r|\Sigma|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T \Sigma^{-1}(x-\mu)\right) \tag{32}$$

将之前计算的结果代入

$$\mu = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{33}$$

得到

$$f(x_n, y_n) = \frac{1}{\sqrt{n\pi}} \exp\left(\frac{-x_n^2}{n}\right) \frac{1}{\sqrt{n\pi}} \exp\left(\frac{-y_n^2}{n}\right) \tag{34}$$

3.7 第七问

将上一问中的直角坐标变换到柱坐标中，并且将角向的自由度积分后可以得到：

$$\begin{aligned} f(\rho)d\rho &= \int_0^{2\pi} \rho \mathrm{d}\rho \mathrm{d}\varphi \frac{1}{n\pi} \exp\left(-\frac{\rho^2}{n}\right) \\ f(\rho) &= \frac{2\rho}{n} \exp\left(-\frac{\rho^2}{n}\right) \end{aligned} \tag{35}$$

3.8 第八问

$$E[R_n] = \int_0^\infty \rho f(\rho) d\rho = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\sqrt{n} \approx 0.886\sqrt{n} \tag{36}$$

相差仅为约 1.3%