

Задача 1.1

Методом Монте-Карло найти среднее значение потенциальной энергии для уровня энергии с $n = 4$ в атоме водорода. Волновая функция равна

$$\psi(x, y, z) = \exp(-r/4)y(y^2 - 3x^2)$$

(здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

Для вычисления среднего воспользуйтесь формулой

$$I = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})/r_{3*i}}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})}$$

(здесь $r_{3*i} = \sqrt{x_{3*i+1}^2 + x_{3*i+2}^2 + x_{3*i+3}^2}$). Количество точек N должно быть равно $N_1 = 10^4$, $N_2 = 10^5$, ..., $N_6 = 10^9$.

Для генерации x_i использовать последовательность unsigned int:

$$m_{i+1} = m_i * 1664525 + 1013904223 \quad (m_0 = 1)$$

$$x_i = -50.0 + 100.0 * m_i / 4294967296.0$$

Выходной файл должен иметь вид:

$$\begin{array}{cccc} N_1 & I_1 & \delta I_1 & \delta I_1 \sqrt{N_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ N_6 & I_6 & \delta I_6 & \delta I_6 \sqrt{N_6} \end{array}$$

Здесь δI — ошибка, т.е. разность между вычисленным и точным значением.

Задача 1.2

Методом Монте-Карло найти среднее значение потенциальной энергии для уровня энергии с $n = 4$ в атоме водорода. Волновая функция равна

$$\psi(x, y, z) = \exp(-r/4)x(x^2 - 3y^2)$$

(здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

Для вычисления среднего воспользуйтесь формулой

$$I = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})/r_{3*i}}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})}$$

(здесь $r_{3*i} = \sqrt{x_{3*i+1}^2 + x_{3*i+2}^2 + x_{3*i+3}^2}$). Количество точек N должно быть равно $N_1 = 10^4$, $N_2 = 10^5$, ..., $N_6 = 10^9$.

Для генерации x_i использовать последовательность unsigned int:

$$m_{i+1} = m_i * 1664525 + 1013904223 \quad (m_0 = 2)$$

$$x_i = -50.0 + 100.0 * m_i / 4294967296.0$$

Выходной файл должен иметь вид:

$$\begin{array}{cccc} N_1 & I_1 & \delta I_1 & \delta I_1 \sqrt{N_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ N_6 & I_6 & \delta I_6 & \delta I_6 \sqrt{N_6} \end{array}$$

Здесь δI — ошибка, т.е. разность между вычисленным и точным значением.

Задача 1.3

Методом Монте-Карло найти среднее значение потенциальной энергии для уровня энергии с $n = 4$ в атоме водорода. Волновая функция равна

$$\psi(x, y, z) = \exp(-r/4)z(x^2 - y^2)$$

(здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

Для вычисления среднего воспользуйтесь формулой

$$I = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})/r_{3*i}}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})}$$

(здесь $r_{3*i} = \sqrt{x_{3*i+1}^2 + x_{3*i+2}^2 + x_{3*i+3}^2}$). Количество точек N должно быть равно $N_1 = 10^4$, $N_2 = 10^5$, ..., $N_6 = 10^9$.

Для генерации x_i использовать последовательность unsigned int:

$$m_{i+1} = m_i * 1664525 + 1013904223 \quad (m_0 = 3)$$

$$x_i = -50.0 + 100.0 * m_i / 4294967296.0$$

Выходной файл должен иметь вид:

$$\begin{array}{cccc} N_1 & I_1 & \delta I_1 & \delta I_1 \sqrt{N_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ N_6 & I_6 & \delta I_6 & \delta I_6 \sqrt{N_6} \end{array}$$

Здесь δI — ошибка, т.е. разность между вычисленным и точным значением.

Задача 1.4

Методом Монте-Карло найти среднее значение потенциальной энергии для уровня энергии с $n = 4$ в атоме водорода. Волновая функция равна

$$\psi(x, y, z) = \exp(-r/4)xyz$$

(здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

Для вычисления среднего воспользуйтесь формулой

$$I = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})/r_{3*i}}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})}$$

(здесь $r_{3*i} = \sqrt{x_{3*i+1}^2 + x_{3*i+2}^2 + x_{3*i+3}^2}$). Количество точек N должно быть равно $N_1 = 10^4$, $N_2 = 10^5$, ..., $N_6 = 10^9$.

Для генерации x_i использовать последовательность unsigned int:

$$m_{i+1} = m_i * 1664525 + 1013904223 \quad (m_0 = 4)$$

$$x_i = -50.0 + 100.0 * m_i/4294967296.0$$

Выходной файл должен иметь вид:

$$\begin{array}{cccc} N_1 & I_1 & \delta I_1 & \delta I_1 \sqrt{N_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ N_6 & I_6 & \delta I_6 & \delta I_6 \sqrt{N_6} \end{array}$$

Здесь δI — ошибка, т.е. разность между вычисленным и точным значением.

Задача 1.5

Методом Монте-Карло найти среднее значение потенциальной энергии для уровня энергии с $n = 4$ в атоме водорода. Волновая функция равна

$$\psi(x, y, z) = \exp(-r/4)x(x^2 + y^2 - 4z^2)$$

(здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

Для вычисления среднего воспользуйтесь формулой

$$I = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})/r_{3*i}}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})}$$

(здесь $r_{3*i} = \sqrt{x_{3*i+1}^2 + x_{3*i+2}^2 + x_{3*i+3}^2}$). Количество точек N должно быть равно $N_1 = 10^4$, $N_2 = 10^5$, ..., $N_6 = 10^9$.

Для генерации x_i использовать последовательность unsigned int:

$$m_{i+1} = m_i * 1664525 + 1013904223 \quad (m_0 = 5)$$

$$x_i = -50.0 + 100.0 * m_i / 4294967296.0$$

Выходной файл должен иметь вид:

$$\begin{array}{cccc} N_1 & I_1 & \delta I_1 & \delta I_1 \sqrt{N_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ N_6 & I_6 & \delta I_6 & \delta I_6 \sqrt{N_6} \end{array}$$

Здесь δI — ошибка, т.е. разность между вычисленным и точным значением.

Задача 1.6

Методом Монте-Карло найти среднее значение потенциальной энергии для уровня энергии с $n = 4$ в атоме водорода. Волновая функция равна

$$\psi(x, y, z) = \exp(-r/4)y(x^2 + y^2 - 4z^2)$$

(здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

Для вычисления среднего воспользуйтесь формулой

$$I = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})/r_{3*i}}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})}$$

(здесь $r_{3*i} = \sqrt{x_{3*i+1}^2 + x_{3*i+2}^2 + x_{3*i+3}^2}$). Количество точек N должно быть равно $N_1 = 10^4$, $N_2 = 10^5$, ..., $N_6 = 10^9$.

Для генерации x_i использовать последовательность unsigned int:

$$m_{i+1} = m_i * 1664525 + 1013904223 \quad (m_0 = 6)$$

$$x_i = -50.0 + 100.0 * m_i / 4294967296.0$$

Выходной файл должен иметь вид:

$$\begin{array}{cccc} N_1 & I_1 & \delta I_1 & \delta I_1 \sqrt{N_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ N_6 & I_6 & \delta I_6 & \delta I_6 \sqrt{N_6} \end{array}$$

Здесь δI — ошибка, т.е. разность между вычисленным и точным значением.

Задача 1.7

Методом Монте-Карло найти среднее значение потенциальной энергии для уровня энергии с $n = 4$ в атоме водорода. Волновая функция равна

$$\psi(x, y, z) = \exp(-r/4)z(-3x^2 - 3y^2 + 2z^2)$$

(здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

Для вычисления среднего воспользуйтесь формулой

$$I = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})/r_{3*i}}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})}$$

(здесь $r_{3*i} = \sqrt{x_{3*i+1}^2 + x_{3*i+2}^2 + x_{3*i+3}^2}$). Количество точек N должно быть равно $N_1 = 10^4$, $N_2 = 10^5$, ..., $N_6 = 10^9$.

Для генерации x_i использовать последовательность unsigned int:

$$m_{i+1} = m_i * 1664525 + 1013904223 \quad (m_0 = 7)$$

$$x_i = -50.0 + 100.0 * m_i / 4294967296.0$$

Выходной файл должен иметь вид:

$$\begin{array}{cccc} N_1 & I_1 & \delta I_1 & \delta I_1 \sqrt{N_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ N_6 & I_6 & \delta I_6 & \delta I_6 \sqrt{N_6} \end{array}$$

Здесь δI — ошибка, т.е. разность между вычисленным и точным значением.

Задача 1.8

Методом Монте-Карло найти среднее значение потенциальной энергии для уровня энергии с $n = 4$ в атоме водорода. Волновая функция равна

$$\psi(x, y, z) = \exp(-r/4)(r - 12)(x^2 - y^2)$$

(здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

Для вычисления среднего воспользуйтесь формулой

$$I = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})/r_{3*i}}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})}$$

(здесь $r_{3*i} = \sqrt{x_{3*i+1}^2 + x_{3*i+2}^2 + x_{3*i+3}^2}$). Количество точек N должно быть равно $N_1 = 10^4$, $N_2 = 10^5$, ..., $N_6 = 10^9$.

Для генерации x_i использовать последовательность unsigned int:

$$m_{i+1} = m_i * 1664525 + 1013904223 \quad (m_0 = 8)$$

$$x_i = -50.0 + 100.0 * m_i / 4294967296.0$$

Выходной файл должен иметь вид:

$$\begin{array}{cccc} N_1 & I_1 & \delta I_1 & \delta I_1 \sqrt{N_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ N_6 & I_6 & \delta I_6 & \delta I_6 \sqrt{N_6} \end{array}$$

Здесь δI — ошибка, т.е. разность между вычисленным и точным значением.

Задача 1.9

Методом Монте-Карло найти среднее значение потенциальной энергии для уровня энергии с $n = 4$ в атоме водорода. Волновая функция равна

$$\psi(x, y, z) = \exp(-r/4)(r - 12)xy$$

(здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

Для вычисления среднего воспользуйтесь формулой

$$I = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})/r_{3*i}}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})}$$

(здесь $r_{3*i} = \sqrt{x_{3*i+1}^2 + x_{3*i+2}^2 + x_{3*i+3}^2}$). Количество точек N должно быть равно $N_1 = 10^4$, $N_2 = 10^5$, ..., $N_6 = 10^9$.

Для генерации x_i использовать последовательность unsigned int:

$$m_{i+1} = m_i * 1664525 + 1013904223 \quad (m_0 = 9)$$

$$x_i = -50.0 + 100.0 * m_i / 4294967296.0$$

Выходной файл должен иметь вид:

$$\begin{array}{cccc} N_1 & I_1 & \delta I_1 & \delta I_1 \sqrt{N_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ N_6 & I_6 & \delta I_6 & \delta I_6 \sqrt{N_6} \end{array}$$

Здесь δI — ошибка, т.е. разность между вычисленным и точным значением.

Задача 1.10

Методом Монте-Карло найти среднее значение потенциальной энергии для уровня энергии с $n = 4$ в атоме водорода. Волновая функция равна

$$\psi(x, y, z) = \exp(-r/4)(r - 12)xz$$

(здесь $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).

Для вычисления среднего воспользуйтесь формулой

$$I = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})/r_{3*i}}{\sum_{i=0}^{N-1} \psi^2(x_{3*i+1}, x_{3*i+2}, x_{3*i+3})}$$

(здесь $r_{3*i} = \sqrt{x_{3*i+1}^2 + x_{3*i+2}^2 + x_{3*i+3}^2}$). Количество точек N должно быть равно $N_1 = 10^4$, $N_2 = 10^5$, ..., $N_6 = 10^9$.

Для генерации x_i использовать последовательность unsigned int:

$$m_{i+1} = m_i * 1664525 + 1013904223 \quad (m_0 = 10)$$

$$x_i = -50.0 + 100.0 * m_i / 4294967296.0$$

Выходной файл должен иметь вид:

$$\begin{array}{cccc} N_1 & I_1 & \delta I_1 & \delta I_1 \sqrt{N_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ N_6 & I_6 & \delta I_6 & \delta I_6 \sqrt{N_6} \end{array}$$

Здесь δI — ошибка, т.е. разность между вычисленным и точным значением.