计算物理大作业

——解题报告

刘浚哲 1500011370 物理学院

日期： 2019 年 1 月 15 日

目　录

第 1 题

给定电荷密度的分布函数, 求解泊松方程, 得到电势分布.

§ 1.1 题目描述

已知三维空间中轴对称的电荷分布函数为

$$f(r,\theta)=\frac{0.8}{1+e^{(r-r0)/0.6}}\left[\mathrm{c}\cdot\mathrm{fm}^{-3}\right] \tag{1.1}$$

$$r_0=10.0\left(1+1.0Y_2^0+0.5Y_3^0\right)\mathrm{fm} \tag{1.2}$$

$$\mathrm{Y}_2^0(\theta,u)=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\left(3\cos^2\theta-1\right) \tag{1.3}$$

$$\mathrm{Y}_3^0(\theta,u)=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{7}{\pi}}\cdot\left(5\cos^3\theta-3\cos\theta\right) \tag{1.4}$$

§ 1.2 题目分析

球坐标系中的泊松方程展开式为:

$$\nabla^2u=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial u}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2u}{\partial\phi^2}=-f(\rho,\theta,\phi) \tag{1.5}$$

由于电荷分布函数呈轴对称, 因此对应的解应该也与 ϕ 无关. 因此问题降维至二维情形, 我们只需要考虑对 r 与 θ 划分格点. 泊松方程可以简化为:

$$\nabla^2u=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial u}{\partial\theta}\right)=-f(r,\theta) \tag{1.6}$$

§ 1.3 求解方法

我们解决 PDE 的大致思路是: 利用差分方法对偏微分方程进行展开表示, 配合格点法, 将偏微分方程变化为 $N * M$ 个线性方程组, 线性方程组的解 $u_{i,j}\, i = 1, 2, \ldots, N, j = 1, 2, \ldots, M$ 为原偏微分方程的每一点上的数值解. 为解一个线性方程组, 我们常用的方式是 Jacobi 迭代, 或 Gauss-Seidel 迭代法.

§ 1.3.1 格点法

将 r 与 θ 分别划分为 $N+1$ 和 $M+1$ 个格点. 令 r 的取值范围为 $1 \sim R \cdot N/(N+1)$,θ 的取值范围为 $\pi/(M+1) \sim \pi \cdot M/(M+1)$. 格点的大小分别为 $\Delta r = \frac{R}{M+1}$ 及 $\Delta\theta = \frac{\pi}{N+1}$. 径向 r 和角向 θ 分别可以离散化为:

$$r_i = i\Delta r \qquad i = 1, 2, \cdots, N, N+1 \tag{1.7}$$

$$\theta_j = j\Delta\theta \qquad j = 1, 2, \cdots, M, M+1 \tag{1.8}$$

$$u(r_i, \theta_j) = u_{i,j} \tag{1.9}$$

$$f(r_i, \theta_j) = f_{i,j} \tag{1.10}$$

§ 1.3.2 有限差分法

有限差分法建立在格点法离散后的格点基础之上, 它利用格点周围的若干个格点对一阶偏微分和二阶偏微分进行表示. 一阶偏导数和二阶偏导数的表示分别为:

$$\frac{\partial u}{\partial r} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta r} \tag{1.11}$$

$$\frac{\partial u}{\partial \theta} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta\theta} \tag{1.12}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta r)^2} \tag{1.13}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{(\Delta\theta)^2} \tag{1.14}$$

因此, 将偏微分导数换成这些格点差分表示, 泊松方程可写成如下形式:

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}}{(\Delta r)^2} + \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{\Delta r} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}}{r^2(\Delta\theta)^2} + \cot\theta \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2r^2\Delta\theta} = -f_{i,j} \tag{1.15}$$

而又有 $r = i\Delta r$,$\theta = j\Delta\theta$:

$$\begin{aligned} i^2(u_{i+1,j} - 2u_{ij} + u_{i-1,j}) + i(u_{i+1,j} - u_{i-1,j}) + \frac{1}{(\Delta\theta)^2}(u_{i,j+1} - 2u_{ij} + u_{i,j-1}) \\ + \frac{\cot(j\Delta\theta)}{2\Delta\theta}(u_{i,j+1} - u_{i,j-1}) = -i^2(\Delta r)^2 f_{i,j} \end{aligned} \tag{1.16}$$

合并同类项并整理, 得到:

$$
\begin{aligned}
(1+\frac{1}{i^2})u_{i+1,j} + (1-\frac{1}{i^2})u_{i-1,j} + (-2-\frac{2}{i}^2(\Delta\theta)^2)u_{i,j} \\
+ (\frac{1}{i^2(\Delta\theta)^2} + \frac{\cot(j\Delta\theta)}{2i^2\Delta\theta})u_{i,j+1} + (\frac{1}{i^2(\Delta\theta)^2} - \frac{\cot(j\Delta\theta)}{2i^2\Delta\theta})u_{i,j-1} = -(\Delta r)^2 f_{i,j}
\end{aligned}
\tag{1.17}
$$

§1.3.3 矩阵表示与边界条件

这是一个未知量有 $N\times M$ 个的线性方程组, 系数矩阵 $\mathbf{A}$ 的阶数为:$(NM)\times(NM)$. 我们将未知量排成一列, 并将同一个 θ(同一个 j) 上的 N 个未知量简记为 u_j, 有:

$$
v = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \\ u_M \end{bmatrix}, \quad u_j = \begin{bmatrix} u_{1,j} \\ \vdots \\ u_{i,j} \\ \vdots \\ u_{M,j} \end{bmatrix}
$$

我们利用矩阵来表示这个线性方程组, 系数矩阵为 A, 是一个 $MN\times MN$ 的方阵, v 和 b 分别是求解的向量和非齐次项, 他们都是长度为 NM 的列向量:

$$
Av = b \tag{1.18}
$$

等式右边的非齐次项 b 可以表示为

$$
b = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_j \\ \vdots \\ b_M \end{bmatrix}, \quad b_j = \begin{bmatrix} -(\Delta r)^2 f_{1,j} \\ \vdots \\ -(\Delta r)^2 f_{i,j} \\ \vdots \\ -(\Delta r)^2 f_{N,j} \end{bmatrix}
$$

这里其实蕴含了我们所取的边界条件. 首先考虑 r 的边界条件. 在 $r\to 0$ 时,$i=1$, 可以得到:

$$
2u_{2,j} + (-2-\frac{2}{(\Delta\theta)^2})u_{1,j} + (\frac{1}{(\Delta\theta)^2} + \frac{\cot\theta}{2\Delta\theta})u_{1,j+1} + (\frac{1}{(\Delta\theta)^2} - \frac{\cot(j\Delta\theta)}{2\Delta\theta})u_{1,j-1} = -(\Delta r)^2 f_{1,j}
\tag{1.19}
$$

可以发现由于 $u_{0,j}$ 前面的系数计算得为 0, 从而方程中不存在这一项. 因此我们不需要 $i=0$ 处的边界条件.

在 r 很大的时候, 我们取 $u_{N,j}=0$, 即 $r\to\inf$ 时电势等于 0. 由此可以得到 $i=N$ 处的方程为:

$$
\begin{aligned}
N(N-1)u_{N-1,j} + (-2N^2 - \frac{2}{(\Delta\theta)^2})u_{N,j} + (\frac{1}{(\Delta\theta)^2} + \frac{\cot(j\Delta\theta)}{2\Delta\theta})u_{N,j+1} \\
+(\frac{1}{(\Delta\theta)^2} - \frac{\cot(j\Delta\theta)}{2\Delta\theta})u_{N,j-1} = -i^2(\Delta r)^2 f_{N,j}
\end{aligned}
\tag{1.20}
$$

系数矩阵 A 可以表示为:

$$A = \begin{bmatrix} T-D-W_1 & D+W_1 & & & & & \\ D-W_2 & T-2D & D+W_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & D-W_j & T-2D & D+W_j & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & D-W_{M-1} & T-2D & D+W_{M-1} \\ & & & & & D-W_M & T-D+W_M \end{bmatrix}$$

矩阵 A 的构建也利用到了我们的边界条件, 我们规定了 θ 的边界条件为 Neumann 边界条件: $(\frac{\partial u}{\partial \theta})_0 = 0$,$(\frac{\partial u}{\partial \theta})_\pi = 0$ 换言之, 按照有限差分法, 应该是: $u_{i,0} = u_{i,1}$, 和 $u_{i,M} = u_{i,M+1}$, 这蕴含着电势在两个边界都是分别连续的. 因此, 当 $j = 1$ 时的有限差分方程为:

$$\begin{aligned} i(i+1)u_{i+1,1} + i(i-1)u_{i-1,1} + (-2i^2 - \frac{1}{(\Delta\theta)^2} - \frac{\cot(\Delta\theta)}{2\Delta\theta})u_{i,1} \\ +(\frac{1}{(\Delta\theta)^2} + \frac{\cot(\Delta\theta)}{2\Delta\theta})u_{i,2} + = -i^2(\Delta r)^2 f_{i,1} \end{aligned} \tag{1.21}$$

当 $j = M$ 时, 接近于 π 的边界为:

$$\begin{aligned} i(i+1)u_{i+1,N} + i(i-1)u_{i-1,N} + (-2i^2 - \frac{1}{(\Delta\theta)^2} + \frac{\cot(N\Delta\theta)}{2\Delta\theta})u_{i,N} \\ +(\frac{1}{(\Delta\theta)^2} - \frac{\cot(N\Delta\theta)}{2\Delta\theta})u_{i,N-1} = -i^2(\Delta r)^2 f_{i,j} \end{aligned} \tag{1.22}$$

故矩阵 A 的第一行分块矩阵为 $T - D - W_1$ 和 $D + W_1$, 而最后一行分块矩阵为 $T - D - W_M$ 和 $D - W_M$.

分块矩阵 T、W、D 的大小均为 $N \times N$, 而有 M 个这些矩阵, 所以 A 的总大小也是 $NM \times NM$. T 为一个三对角矩阵,W 和 D 均为对角矩阵, 具体形式为:

$$T = \begin{bmatrix} -2 & 1+\lambda_1 & & & & & \\ 1-\lambda_2 & -2 & 1+\lambda_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & 1-\lambda_i & -2 & 1+\lambda_i & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1-\lambda_{N-1} & -2 & 1+\lambda_{N-1} \\ & & & & & 1-\lambda_N & -2 \end{bmatrix}$$

其中: $\lambda_i = 1/i, i = 1, 2, \ldots, N$.

$$W_j = \operatorname{diag}\left(\frac{\cot(j\theta)}{2i^2 \cdot \Delta\theta}\right) = \begin{bmatrix} \frac{\cot(j\theta)}{2\Delta\theta} & & & & \\ & \frac{\cot(j\theta)}{8\Delta\theta} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \frac{\cot(j\theta)}{2(N-1)^2\Delta\theta} & \\ & & & & \frac{\cot(j\theta)}{2N^2\Delta\theta} \end{bmatrix}$$

$$D = \operatorname{diag}\left(\frac{1}{i^2(\Delta\theta)^2}\right) = \begin{bmatrix} \frac{1}{(\Delta\theta)^2} & & & & \\ & \frac{1}{4(\Delta\theta)^2} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \frac{1}{(N-1)^2(\Delta\theta)^2} & \\ & & & & \frac{1}{N^2(\Delta\theta)^2} \end{bmatrix}$$

§1.3.4 Gauss-Seidel 迭代方法

我们解线性方程组的一般方法是: 利用 Gauss-Seidel 迭代方法对系数矩阵 A 进行迭代计算. 对于一个含有 n 个未知量及 n 个等式的如下线性方程组:

$$\begin{aligned} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + \ldots + a_{1n} \cdot x_n &= b_1 \\ a_{21} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + \ldots + a_{2n} \cdot x_n &= b_2 \\ \vdots &= \\ a_{n1} \cdot x_1 + a_{n2} \cdot x_2 + \ldots + a_{nn} \cdot x_n &= b_n \end{aligned} \tag{1.23}$$

为了求这个方程组的解 $\vec{x}$, 我们使用迭代法. k 用来计量迭代步数. 给定该方程组解的一个近似值 $\vec{x}^k \in \mathbb{R}^n$. 在求 k+1 步近似值时, 我们利用第 m 个方程求解第 m 个未知量. 在求解过程中, 所有已解出的 $k+1$ 步元素都被直接使用, 这一点与雅可比法不同. 对于每个元素可以使用如下公式:

$$x_m^{k+1} = \frac{1}{a_{mm}}\left(b_m - \sum_{j=1}^{m-1} a_{mj} \cdot x_j^{k+1} - \sum_{j=m+1}^{n} a_{mj} \cdot x_j^k\right), \quad 1 \le m \le n \tag{1.24}$$

重复上述的求解过程, 可以得到一个线性方程组解的近似值数列: $\vec{x}^0, \vec{x}^1, \vec{x}^2, \ldots$. 在该方法收敛的前提下, 此数列收敛于 $\vec{x}$.

为了保证该方法可以进行, 主对角线元素 a_{mm} 需非零. 可知我们的系数矩阵 A 符合以上条件, 因此可以利用该迭代方法来进行求解.

§1.4 结果分析

我们选择线度 $R = 20$, 格点数 $N = 100, M = 70$. 那么格点数为 $N \times M = 7000$, 系数矩阵 A 的阶数为 7000×7000. 设置最大迭代次数为 15000 次, 当精度达到 $TOL = 1 \times 10^{-2}$ 时, 提前退出迭代.

运行算法, 得到在第 7747 次迭代后, 精度达到 0.00998, 各点电势按照前面所述的顺序按照一列

排列, 记录在 solution.txt 当中. 我们利用 matlab 进行绘图, 得到结果如下:

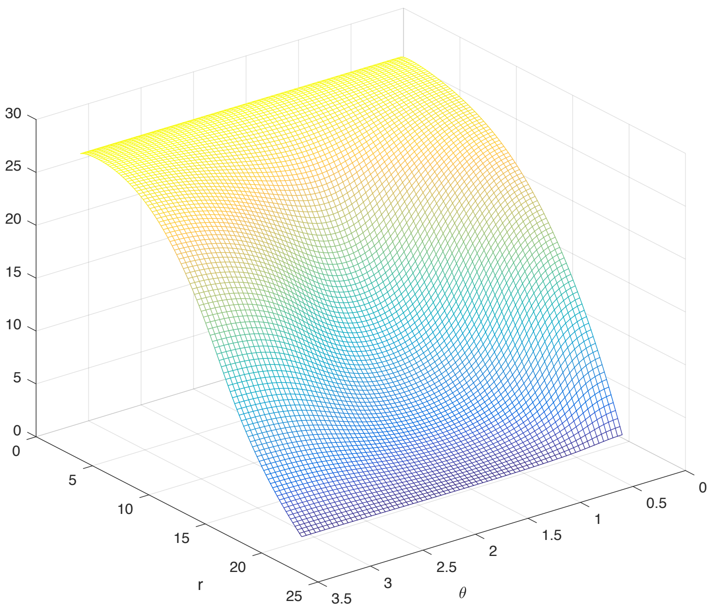

图 1.4-1　$r-\theta$ 电势分布图 1

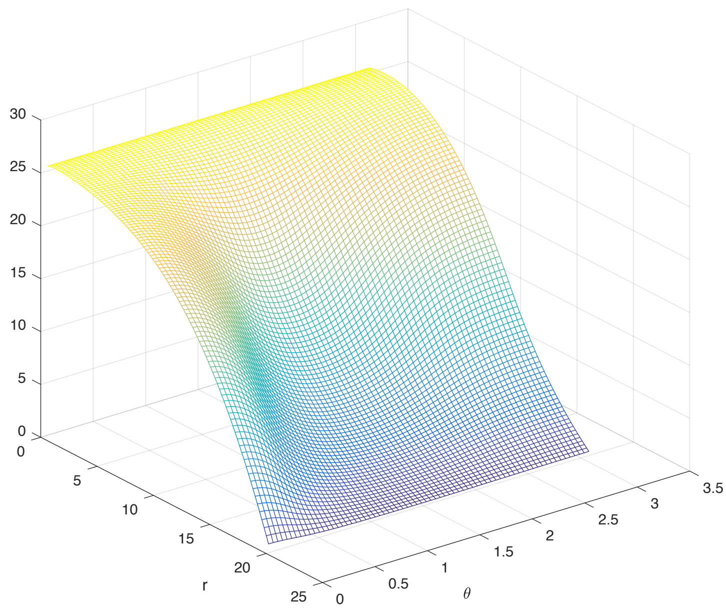

图 1.4-2　$r-\theta$ 电势分布图 2

可以看到我们的电势分布呈瀑布状, 而中间有一个明显的"凹陷"部分. 经两幅图对比可知, 凹陷处比较靠近 θ 较小的部分. 而电势变化的总体趋势是随着 r 的增加逐渐减小, 随 θ 增大的过程中, 电势先减小后增大.

第 2 题

薛定谔方程, 求解矩阵的本征值与本征函数

§ 2.1 题目描述

求解下式薛定谔方程, 给出波函数的模方和能级分布:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\rho,z)\right]\varphi(\rho,z,\phi) = E\varphi(\rho,z,\phi) \tag{2.1}$$

其中势场:

$$V(\rho,z) = V_0[f(\rho,z+\zeta) + f(\rho,z-\zeta)] \tag{2.2}$$

$$f(\rho,z) = \frac{1}{1+e^{-R_0/a}\cosh\left(\sqrt{\rho^2+z^2}/a\right)} \tag{2.3}$$

其中各物理量为:

$$\zeta = 7.5fm, V_0 = -50MeV, R_0 = 2fm, a = 1fm, \lambda_0 = 5.0 \tag{2.4}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} = 20.721246\mathrm{fm}^2, \hbar c = 197.32696\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{fm}, \mathrm{mc}^2 = 939.56535\mathrm{MeV} \tag{2.5}$$

§ 2.2 题目分析

我们由物理知识知道, 薛定谔方程的一般形式为:

$$\hat{\mathrm{H}}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \tag{2.6}$$

其中 $\hat{\mathrm{H}}$ 是一个厄米矩阵 (共轭转置等于自身), 它的矩阵本征值就是它的能量 E, 对应的本征函数也就是波函数 $|\Psi\rangle$. 而由于本征值有很多个, 所以存在能级. 这道题也就成了求解一个矩阵本征值的问题.

由于忽略了自旋耦合项, 因此看起来这个体系是旋转对称的, 因此波函数可以将角度部分分离出去, 得到一个 $e^{\mathrm{i}m\phi}$ 的乘子项, 但它会在求波函数模方的时候 $|\Psi^*\Psi|$ 约掉, 因此我们可以先不管这个项, 直接将它考虑成一个二维情形.

在柱坐标下将方程进行展开, 得到:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right]+V(r,z)u=Eu(r,z) \tag{2.7}$$

构造格点 $r_i=i\cdot\Delta r, i=1,2,\ldots,N, z_j=j\cdots\Delta z, j=1,2,\ldots,M$. 将偏微分导数换成格点差分表示, 经整理后, 上式可写成如下形式:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2(\Delta r)^2}\left(\frac{1}{i}-\frac{\hbar^2}{m}\right)u_{i+1,j}+\left[V(i,j)+\frac{\hbar^2}{m(\Delta r)^2}-\frac{2}{(\Delta z)^2}\right]u_{i.j}-\frac{1}{2(\Delta r)^2}\left(\frac{1}{i}+\frac{\hbar^2}{m}\right)u_{i-1,j}\\+\frac{1}{(\Delta z)^2}u_{i,j+1}+\frac{1}{(\Delta z)^2}u_{i,j-1}=Eu_{i,j}\end{aligned} \tag{2.8}$$

我们还是按照第一题一样将 $u_{i,j}$ 排成一列, 可以得到矩阵形式为:

$$A=\begin{bmatrix}T & D & & & & & \\ D & T & D & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & D & T & D & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & D & T & D \\ & & & & & D & T\end{bmatrix}$$

其中 T 是一个三对角矩阵, 具体形式如下:

$$T=\begin{bmatrix}V(1,j)+\frac{\hbar^2}{m(\Delta r)^2}-\frac{2}{(\Delta z)^2} & -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta r)^2}+\frac{1}{2(\Delta r)^2} & & \\ \ddots & \ddots & \ddots & \\ & -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta r)^2}-\frac{1}{2i(\Delta r)^2} & -V(i,j)+\frac{\hbar^2}{m(\Delta r)^2}-\frac{2}{(\Delta z)^2} & -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta r)^2}+\frac{1}{2i(\Delta r)^2} \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta r)^2}-\frac{1}{2N(\Delta r)^2} & -V(N,j)+\frac{\hbar^2}{m(\Delta r)^2}-\frac{2}{(\Delta z)^2}\end{bmatrix}$$

其中对角线上的元素是 $V(i,j)+\frac{\hbar^2}{m(\Delta r)^2}-\frac{2}{(\Delta z)^2}$, 左右两边两条对角线元素分别为:$-\frac{\hbar^2}{2m(\Delta r)^2}\pm\frac{1}{2i(\Delta r)^2}$. 而 D 是一个对角矩阵:

$$D=\mathrm{diag}\left(\frac{1}{(\Delta z)^2}\right)=\begin{bmatrix}\frac{1}{(\Delta z)^2} & & & & \\ & \frac{1}{(\Delta z)^2} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \frac{1}{(\Delta z)^2} & \\ & & & & \frac{1}{(\Delta z)^2}\end{bmatrix}$$

§ 2.3 求解方法

求解矩阵本征值与本征函数的算法有幂法, Jacobi 迭代法与 QR 方法等. 其中幂法只能求助矩阵最大的本征值, 不适用于本题. 而 QR 分解方法虽然适用于所有矩阵, 但其算法要求大量的矩阵乘法操作, C++ 里矩阵乘法的朴素暴力方法的时间常数是 $O(n^3)$, 优化之后的 Strassen 矩阵乘法算法也只有 $O(n^{2.81})$, 而试想取 60×60 的格点, 就有 3600×3600 大小的系数矩阵, 从而矩阵乘法的量级将会是 $O(3600^3)$ 级别, 不可设想. 因此在不调用库函数的情况下, 只有 python 能够完成如此大量的矩阵乘法算法. 所以在这里我们选用的是 Jacobi 方法.

§ 2.3.1 Jacobi 算法

Jacobi 算法处理的是 n 阶实对称矩阵. 设 A 是 n 阶实对称矩阵, 那么必存在正交矩阵 P 使得:

$$P^T AP = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix} = D \tag{2.9}$$

其中 D 的对角线元素是 A 的 n 个特征值, 正交阵 P 的第 i 列是 A 的对应于特征值 λ_i 的特征向量. 所以对于一个任意的 n 阶实对称矩阵 A, 只要能求得一个正交阵 P, 使上式成立, 则可得到 A 的全部特征值和特征向量.

Jacobi 方法实际上是一个迭代方法, 它通过不断寻求旋转矩阵, 来使矩阵 A 中的非对角线元素接近于 0, 当矩阵 A 变得对角占优了之后, 我们可以认为算法已经到达某一精度, 提前结束.

回到本题, 我们可以注意到其实系数矩阵 A 并不是一个对称矩阵, 因为我们在柱坐标当中展开的时候, 对角线上的分块矩阵 T 的两条辅对角线并不是相等的. 但是由于它们俩一个加一个减一个小量, 差距相对于对角线元素大小来说可以忽略, 并且也只有这两条线是不对称的, 其余元素均对称, 所以我们可以近似把它看作是一个对称矩阵来进行处理.

§ 2.4 结果分析

我们选取了 60×60 格点数, 那么系数矩阵 A 将会是 3600×3600 的一个方阵. Jacobi 算法不断迭代正交矩阵 P, 并分析 A 中绝对值最大的非对角线元素的大小, 若小于某个精度, 就提前退出算法. 我们设置最大的迭代次数为 500000 次 (五十万次), 最后输出的系数矩阵 A 的对角线元素为它的本征值, 也就是能量 E_i, 正交矩阵 P 的每一列为对应的本征函数, 也就是所求的波函数 φ_i.

经过五十万次迭代之后, 最终绝对值最大的非对角元的值为 0.24, 算法得到了 3600 个本征值 (对应能级), 记录在 Energy.txt 文件中, 经排序之后, 得到能量范围为: $-44 \le E \le 122$. 若进一步扩大格点个数和范围, 将提高本征值个数, 这里 3600 个其实只是其中一部分. 我们构建了波函数平方的数据表, 它一列代表着一个概率分布, 表示 $|u_{i,j}^2| = p(i,j)$, 也即粒子出现在 (i,j) 的概率. 经验证, 每一列求和为 1, 证实了波函数的归一性. 我们随机挑了一个波函数 (模方) 进行绘图, 得到的概率分布如下:

我们从图中可以看到: 该波函数对应能量本征值为 98.7346, 属于较高的能级. 其概率分布主要集中在 $z = 0$ 和 r 比较大的区域, 其他区域则概率较低. 对 probability 矩阵里其他列也可以画出相应的概率分布图, 再从 energy 向量中取出对应的能量, 即可获得对应的能量本征值与本征函数.

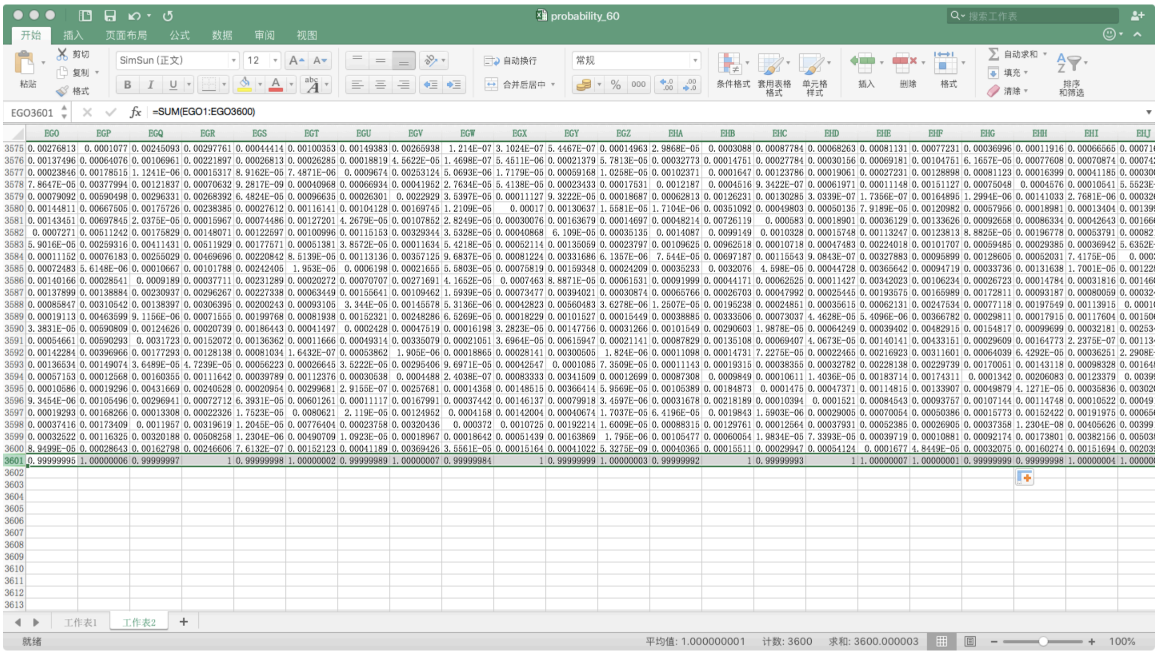

图 **2.4-1** 波函数模方, 选中的一行表示每一列的求和, 可以看到接近等于 1

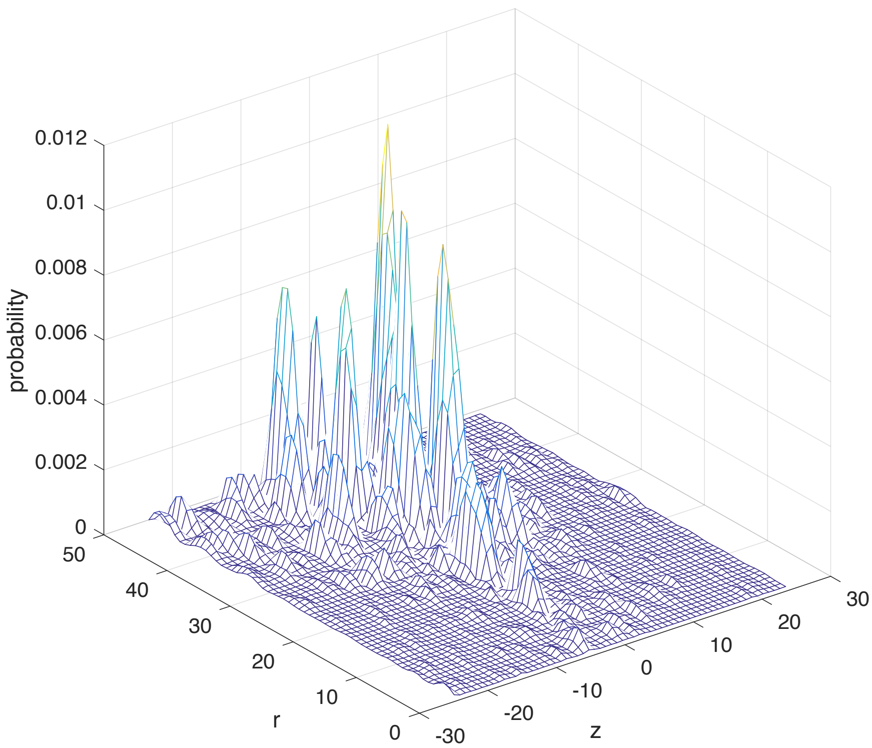

图 **2.4-2** 波函数模方 (概率分布) 图, 对应能量为 98.7346

第 3 题

五维函数求极值

§ 3.1 题目描述

求解下面五维函数的最小值:

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = (x_1 - 0.718)^2 + \left(\frac{x_2 + 0.718}{2}\right)^2 + (x_3 - 0.2)^2 + \left(\frac{x_4 + 2}{0.1}\right)^2 + x_5^2 + (x_2 - x_3 - 1.5)^2 \tag{3.1}$$

其中每个参数的范围是:

$$x_1 \in [-1, 1], x_2 \in [-1, 1], x_3 \in [-5, -1], x_4 \in [0, 2], x_5 \in [-2, 2] \tag{3.2}$$

§ 3.2 题目分析

这是一个典型的函数求极值的问题, 我已开始写了一个最陡下降法来计算该五维函数的最小值, 但是发现求出来的极值并不在题目给定的参数范围之内, 所以只好重新找方法. 注意到我们其实可以把每个参数的范围限定看做是线性约束, 也就是一阶不等式来处理:

$$x_1 \geq -1, \qquad x_1 \leq 1 \tag{3.3}$$

$$x_2 \geq -1, \qquad x_2 \leq 1 \tag{3.4}$$

$$x_3 \geq -5, \qquad x_3 \leq -1 \tag{3.5}$$

$$x_4 \geq 0, \qquad x_4 \leq 2 \tag{3.6}$$

$$x_5 \geq -2, \qquad x_5 \leq 2 \tag{3.7}$$

也就是原最优化问题加上了 10 个线性约束. 常用于求解约束最优化问题的是 Frank-Wolfe 算法.

§ 3.2.1 Frank-Wolfe 算法

Frank-Wolfe 算法常用于解决约束最优化问题. 假设区域 D 是参数空间中取值的可行域, 函数 $f\colon \mathcal{D} \to \mathbb{R}$ 是 D 上的可微凸函数.Frank-Wolfe 可以解决以下最优化问题:

$$\min f(\mathbf{x}) \qquad \mathbf{x} \in \mathcal{D}. \tag{3.8}$$

我们可以用泰勒展开对目标函数进行近似, 将它线性化. 将 $f(x)$ 在 x_0 处展开，有:

$$\min f(x) \approx f\left(x_0\right) + \nabla f\left(x_0\right)^T \left(x - x_0\right) \tag{3.9}$$

$$\mathbf{x} \in \mathcal{D}. \tag{3.10}$$

去掉常量后, 问题可以写为:

$$\min f(x) \approx \nabla f\left(x_0\right)^T x \tag{3.11}$$

$$\mathbf{x} \in \mathcal{D}. \tag{3.12}$$

设此问题的最优解为 y_i, 则直观上 $d_i = y_i - x_i$ 应当为原问题的可行下降方向, 沿着此方向做一维搜索则可进行一次迭代. 为了防止一维搜索的结果超出可行域, 我们限制步长 $0 \leq \lambda \leq 1$. 注意到线性规划的可行域为凸集, 由于 x_i 和 y_i 均为可行点, 它们确定的连线均在可行域中. 限制步长 $0 \leq \lambda \leq 1$ 保证了一维搜索的结果在可行域中.

具体算法步骤如下:

1. 选择初值。初始点 $\mathbf{x_0} \in \mathcal{D}$，给定允许误差 $\epsilon > 0$，令 $i = 0$.
2. 求解近似线性规划: $\begin{array}{ll} \min & \nabla f\left(x_i\right)^T x \\ & \mathbf{x} \in \mathcal{D} \end{array}$

   得最优解 y_i
3. 构造可行下降方向: 令 $d_i = y_i - x_i$. 若 $\left\|\nabla f\left(x_i\right)^T d_i \leq \epsilon\right\|$, 停止计算, 输出 x_i. 否则, 继续第 4 步.
4. 进行一维搜索:

   $$\min_{0 \leq \lambda_i \leq 1} f\left(x_i + \lambda d_i\right) \tag{3.13}$$

   得步长 λ_i. 令

   $$x_{i+1} = x_i + \lambda_i d_i \tag{3.14}$$

   $$i \leftarrow i + 1 \tag{3.15}$$

   若未到达精度要求, 则返回第 2 步继续迭代.

§ 3.3 结果分析

函数 $f(x)$ 由 6 个平方和构成, 故这是一个可微的凸函数, 可以利用 Frank-Wolfe 算法求解, 可行域 $\mathcal{D}$ 即 10 个线性约束划出的区域, 我们需要在这个区域里求解每一步迭代的最优解 y_i 与最优

步长 λ_i.

实际上, 我们可以直接看出来 x_1, x_4, x_5 的最优解分别是 $0.718, 0, 0$, 这是由于它们没有与其他变量的交叉项, 问题实际上可以简化为一个二维函数的最优化问题. 但为了验证 Frank-Wolfe 算法的正确性, 我们还是将它保留为一个五维函数最优化问题来处理. 我们设定 TOL=1×10^{-3}, 最大迭代次数为 10000 次, 迭代初始值为:$x_0 = (0.7, 0.4, -2.0, 1.0, 1.0)^T$. 运行算法, 在经 787 次迭代之后, 得到结果:

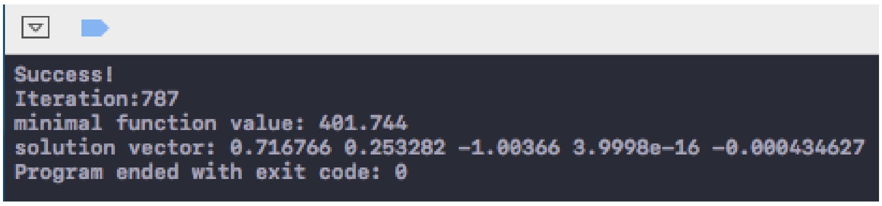

图 3.3-1 算法运行结果, 函数最小值为 401.744

可得函数最小值为 401.744, 每个参数在最小值的取值分别为:

$$x_1 = 0.716766, \quad x_2 = 0.253282, \quad x_3 = -1.00366, \quad x_4 = 3.9998 \times 10^{-16}, \quad x_5 = -0.000434627 \tag{3.16}$$

我们用 MATLAB 来进行验证, 将目标函数与线性约束输入进程序之后, 得到最小化结果为:

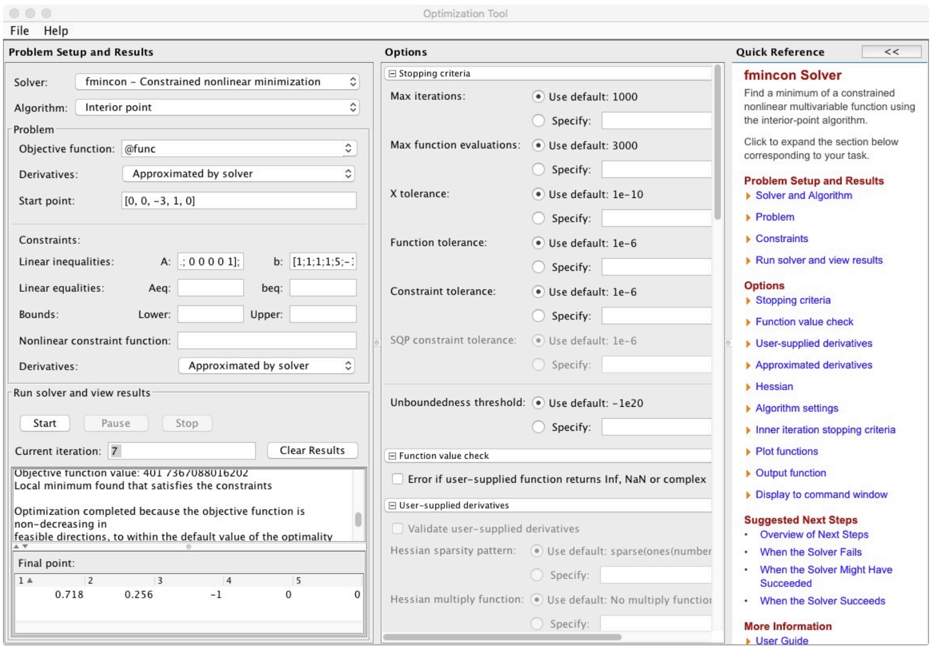

图 3.3-2 MATLAB 运行结果

可见 MATLAB 对最小值的求解结果为 401.7367088016202, 与我们给出的算法相差在 0.01 之内, 而它给出的参数对应值为:

$$x_1 = 0.718, \quad x_2 = 0.256, \quad x_3 = -1, \quad x_4 = 0, \quad x_5 = 0 \tag{3.17}$$

只有 x_1, x_2 与标准相差在 0.02~0.03 之间, 其余均在 0.01 的标准之下, 可以认为我们已经得到了非常精确的最小值的解.