计算物理第三次作业

李柏轩 20300200004

October 8, 2022

1 题目 1：证明 Gauss 消元法的时间复杂度

1.1 题目描述

Prove that the time complexity of the Gaussian elimination algorithm is $O(N^3)$.

1.2 证明

正向过程（将第 i 列中第 i 行以下都变为 0）共有 $N-1$ 轮，第 i 轮进行 $i-1$ 次初等行变换，每次行变换涉及 N 次乘法与 N 次加法，共有 $\frac{N(N-1)}{2}\cdot 2N$ 次运算；综上，总的时间复杂度为 $O(N^3)$

2 题目 2：将矩阵化为最简阶梯型（RREF）

2.1 题目描述

Write a general code to transform a $n\times m$ matrix into the REDUCED ROW ECHELON FORM, and use the code to obtain the RREF of the following matrix.

$$\begin{pmatrix} 2 & 8 & 4 & 2 \\ 2 & 5 & 1 & 5 \\ 4 & 10 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

2.2 程序描述

题目要求将给出的矩阵化为最简阶梯型（RREF）。最简阶梯型的要求为：

1. 非零行在零行之上；
2. 在每个非零行中，第一个非零数为 1（称为 the leading one）；
3. 非零行的 leading one 在其下每个非零行的 leading one 的左侧；
4. 若某列包含 leading one，则该列其它数字为 0。

根据以上要求，编写 Pivote() 和 ElemTrans() 两个函数来获得最简阶梯型。其中 Pivote() 函数遍历当前行以下各行，找到对应的领头列上数字最大的行，将该行与当前行交换后，令当前行的领头列为 1；ElemTrans() 函数则通过初等变换，把当前行的 leading one 所在的列上其它行的数字均变成 0。当当前行从第一行遍历到第 min(总行数，总列数) 行后，即得到输入矩阵的最简阶梯型。

本程序源文件为 RREF.py，运行依赖 Python 第三方库 Numpy 和 Matplotlib。在终端进入当前目录，使用命令 python -u RREF.py 运行本程序。运行后输出题目描述中矩阵的最简阶梯型。

2.3 伪代码

Pivoting 过程的伪代码如 Alg.1所示。初等变换得到最简阶梯型的伪代码如 Alg.2所示。主程序的伪代码如 Alg. 4所示。

Algorithm 1 Pivote(A,col_index): The pivoting algorithm

Input: A given initial matrix A and the aimed column index col_index.

Output: The pivoted matrix described in the above section.

largest_num,largest_index $\leftarrow$ abs(A[col_index,col_index]),col_index
row_num,col_num$\leftarrow$size(A)
for i in range(col_index,row_num) **do**
  if abs(the leading entry of the current row)>largest_num **then**
    update largest_num and largest_index with the current row
  end if
end for
if largest_num==0 **then**
  return 0, A
else if largest_num==col_index **then**
  A[col_index,:]$\leftarrow \frac{A\text{[col\_index,:]}}{A\text{[col\_index,col\_index]}}$
  return 1, A
else
  swap(A[col_index,:],A[largest_index,:])
  A[col_index,:]$\leftarrow \frac{A\text{[col\_index,:]}}{A\text{[col\_index,col\_index]}}$
  return 1, A
end if

2.4 输入输出示例

程序运行结果如 Fig. 1，经验证正确。

Algorithm 2 Elemtrans(A,col_index): Perform elementary transform to clear the column of the leading one of the aimed row

Input: A given initial matrix A and the aimed column index col_index.

Output: A matrix with the column of the leading one of the aimed row cleared

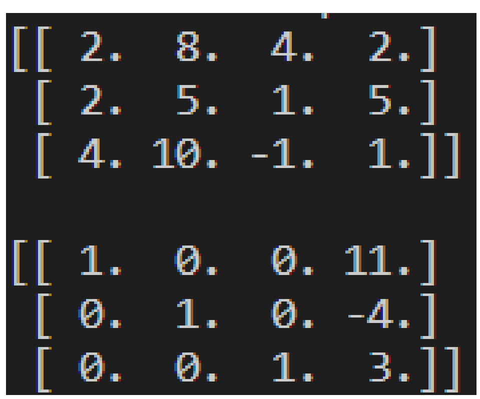
row_num←size(A,row)
for i in range(0,row_num) **do**
    if i==col_index **then**
        continue
    else
        A[i,:]←A[i,:]-A[col_index, :] $\cdot$ A[i, col_index]
    end if
end for
return A

Algorithm 3 The main program of attaining RREF

Input: A given initial matrix A

Output: The RREF of A

row_num,col_num←size(A)
for i in range(0,min(col_num,row_num)) **do**
    (status,A)=Pivote(A,i)
    if status==0 **then**
        continue
    else
        A=ElemTrans(A,i)
    end if
end for


```
[[ 2.  8.  4.  2.]
 [ 2.  5.  1.  5.]
 [ 4. 10. -1.  1.]]

[[ 1.  0.  0. 11.]
 [ 0.  1.  0. -4.]
 [ 0.  0.  1.  3.]]
```

Figure 1: RREF 输出结果

3 题目 3：求解 Schrodinger 方程

3.1 题目描述

Solve the 1D Schrodinger equation with the potential

1. $V(x) = x^2$;

2. $V(x) = x^4 – x^2$

with the variational approach using a Gaussian basis $\phi_i(x) = (\frac{\nu_i}{\pi})^{\frac{1}{2}} e^{-\nu_i(x-s_i)^2}$ (either fixed widths or fixed centers). Consider the three lowest energy eigenstates. This function has two variational parameters: ν_i, the width of the Gaussian, and s_i, the center of the Gaussian.

3.2 程序描述

本程序选定一组高斯函数为基（这组高斯函数有着相同的 ν_i、不同的 s_i），则波函数为 $\psi(x) = \sum_{i=1}^{N} c_i\phi_i(x)$。写出能量的期望值 $E = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$。采用变分法，使能量的期望值最小，即 $\frac{\partial E}{\partial c_i} = 0$，等价于 $Hc = ESc$，其中 S 和当 $V(x) = x^2$ 时 H 的矩阵元为

$$
\begin{aligned}
S_{pk} =& \sqrt{\frac{\nu_p\nu_k}{\pi(\nu_p+\nu_k)}} \cdot e^{-\frac{(s_p-s_k)^2\nu_k\nu_p}{\nu_p+\nu_k}} \\
H_{pk}^{(1)} =& e^{-\frac{(s_p-s_k)^2\nu_k\nu_p}{\nu_p+\nu_k}} \frac{\sqrt{\nu_k\nu_p}}{2m\sqrt{\pi}(\nu_k+\nu_p)^{\frac{5}{2}}} \left[m\nu_p * \left(1+2s_p^2\nu_p\right) + \nu_k((m+4ms_ks_p\nu_p+2\hbar\nu_p^2)\right] + \\
& e^{-\frac{(s_p-s_k)^2\nu_k\nu_p}{\nu_p+\nu_k}} \frac{\sqrt{\nu_k\nu_p}}{2m\sqrt{\pi}(\nu_k+\nu_p)^{\frac{5}{2}}} \left[2\nu_k^2\left(ms_k^2+\hbar\nu_p-2\hbar(s_k-s_p)^2\nu_p^2\right)\right]
\end{aligned}
$$

当 $V(x) = x^4 - x^2$ 时 H 的矩阵元 $H_{pk}^{(2)}$ 如 Fig. 2所示。这并不是一个广义本征值方程，因为 E 是关

```
In[70]:=
Clear["Global`*"]
清除

f = FullSimplify[Sqrt[νp/π] * Exp[-νp (x - sp)^2] * (-ħ/(2*m) D[D[Sqrt[νk/π] * Exp[-νk (x - sk)^2], x], x] + ((x^4 - x^2) * Sqrt[νk/π] * Exp[-νk (x - sk)^2]))];
    完全简化                         指数形式                       偏导                  指数形式                                              指数形式

Hpk = FullSimplify[Integrate[f, {x, -Infinity, Infinity}, Assumptions → {νp > 0, νk > 0}]]
      完全简化       积分              无穷大     无穷大       假设
```

Out[72]=

$$
\frac{1}{4 m \sqrt{\pi} (\nu_k+\nu_p)^{9/2}} e^{-\frac{(s_k-s_p)^2 \nu_k \nu_p}{\nu_k+\nu_p}} \sqrt{\nu_k \nu_p} \left(4 \nu_k^4 \left(m s_k^2 \left(-1+s_k^2\right)+\hbar \nu_p-2 \hbar (s_k-s_p)^2 \nu_p^2\right)+2 \nu_k^3 \left(m \left(-1+6 s_k^2\right)+4 m s_k \left(-s_k+\left(-1+2 s_k^2\right) s_p\right) \nu_p+6 \hbar \nu_p^2-8 \hbar (s_k-s_p)^2 \nu_p^3\right)+\right.
$$
$$
\nu_k^2 \left(3 m+2 \nu_p \left(-3 m+6 m s_k (s_k+2 s_p)+2 m \left(-4 s_k s_p-s_p^2+s_k^2 \left(-1+6 s_p^2\right)\right) \nu_p+6 \hbar \nu_p^2-4 \hbar (s_k-s_p)^2 \nu_p^3\right)\right)+
$$
$$
\left. m \nu_p^2 \left(3+2 \nu_p \left(-1+2 s_p^2 \left(3+\left(-1+s_p^2\right) \nu_p\right)\right)\right)+2 \nu_k \nu_p \left(3 m+\nu_p \left(-3 m+2 m s_p^2 (3-2 \nu_p)+2 \hbar \nu_p^2+4 m s_k s_p \left(3+\left(-1+2 s_p^2\right) \nu_p\right)\right)\right)\right)
$$

Figure 2: 当 $V(x) = x^4 - x^2$ 时 H 的矩阵元 $H_{pk}^{(2)}$

于 c 的函数而非常数。但由于我们要求解的确实是哈密顿量的本征态，所以我们可以先将 E 当做常数处理，求解本征态后代回 $E(c)$ 验证，方程确实是自洽的。于是求解 Schrodinger 方程的问题就转化为一个广义本征值问题。本征值即为不同本征态的能量，本征矢即为波函数在选定的基下的展开系数。

本程序源文件为 Schrodinger.py，运行依赖 Python 第三方库 Numpy、Scipy 和 Matplotlib。在终端进入当前目录，使用命令 python -u Schrodinger.py 运行本程序。运行后先在控制台输出 $V(x)=x^2$ 的前三个本征值并输出 Fig. 3所示图像，关闭图像后输出 Fig. 4所示图像，关闭图像后在控制台输出 $V(x)=x^4-x^2$ 的前三个本征值并输出 Fig. 5所示图像，关闭图像后输出 Fig. 6所示图像。

3.3 伪代码

Algorithm 4 The main program of solving the Schrodinger Equation

Input: N given series of Gaussian basis and a given potential $V(x)$.

Output: The energy E of the eigenstates and the wave functions $\psi_i(x)$

for p in range(0,N-1) **do**
  for k in range(p,N-1) **do**
    $H[p,k], S[p,k] \leftarrow$the above expression of the element of matrix H, S
    $H[p,k], S[p,k] \leftarrow H[k,p], S[k,p]$
  end for
end for
$E, C \leftarrow \text{eigh}(H, S)$

3.4 输入输出示例

本程序输出 $V(x)=x^2$ 和 $V(x)=x^4-x^2$ 时的本征能量分布以及能量最低的三个本征态的波函数如 Fig. 3,4,5,6所示。本程序中取 $\hbar=1, m=2$，则当 $V(x)=x^2$ 时有 $\omega=1$，即能量分布为 $E=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega=n+\frac{1}{2}, n=0,1,\ldots$，由 Fig. 3可得本程序得到的前 80 个本征态均与上式符合较好，从而验证了本程序的正确性。

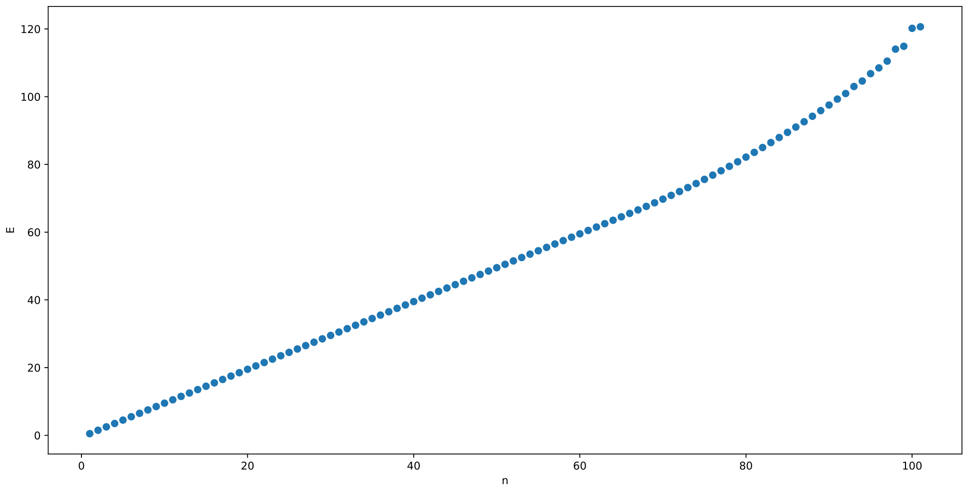


Figure 3: $V(x) = x^2$ 势能下本征值（能量 E）的分布

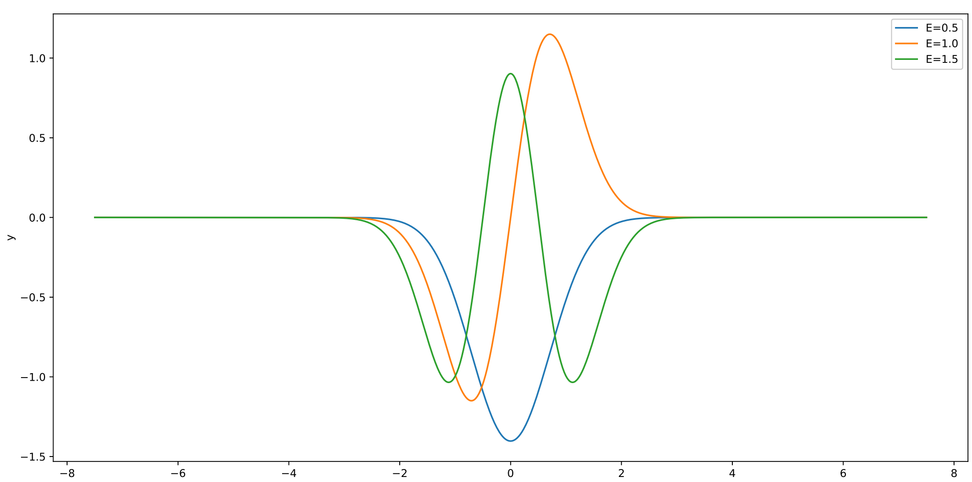


Figure 4: $V(x) = x^2$ 势能下能量最低的三个本征态的波函数

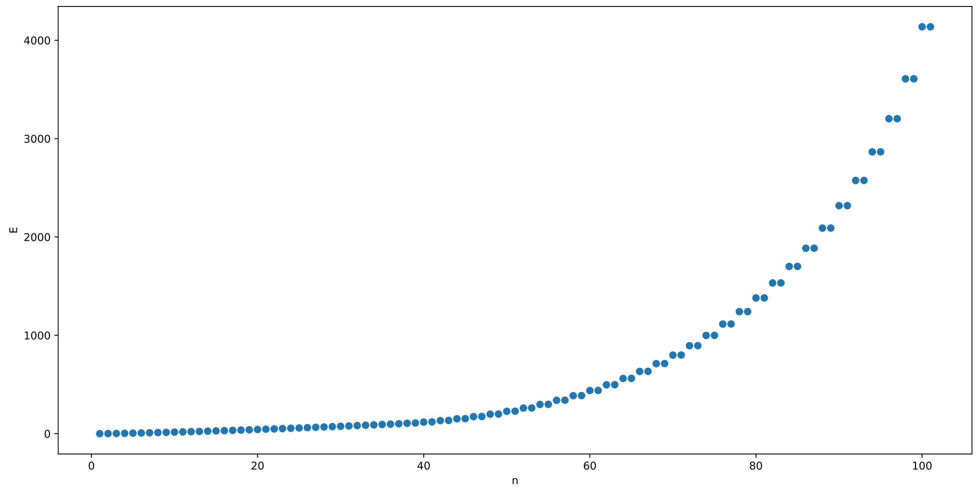


Figure 5: $V(x) = x^4 - x^2$ 势能下本征值（能量 E）的分布

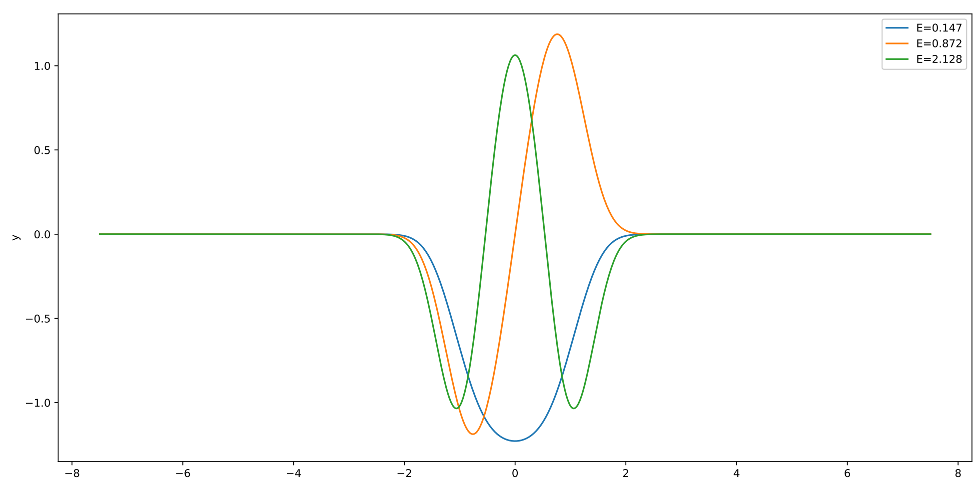


Figure 6: $V(x) = x^4 - x^2$ 势能下能量最低的三个本征态的波函数