计算物理基础第三次作业

柴声都 19307110142

2021 年 10 月 15 日

一　第一题

1　问题描述

证明高斯消元法的时间复杂度是 O(N^3)

2　证明

高斯消元法的思路是利用矩阵行的线性叠加来达到消元的目的，对于一个 N 阶矩阵，第一次消元需要 $N(N-1)$ 次操作，可以递推得到 N-i 阶矩阵消元需要 $(N-i)(N-i-1)$ 次操作，所以总共需要 $\sum_{i=1}^{N-1}(N-i+1)(N-i) \approx N^3$, 所以时间复杂度是 O($N^3$)

二　第二题

1　问题描述

计算非平衡惠通斯电桥的等效电阻，各个参数标注如图：

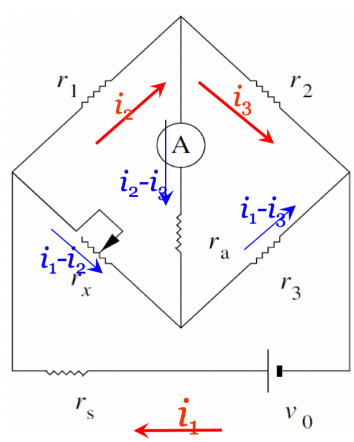

图 一　示意图

2 求解思路

利用基尔霍夫方程组列出方程，共有三个未知数 i_1,i_2,i_3，我们可以得到化简后的方程为：

$$\begin{cases} -r_x i_1 + (r_1 + r_a - r_x) i_2 - r_a i_3 = 0 \\ -r_3 i_1 - r_a i_2 + (r_2 + r_3 + r_a) i_3 = 0 \\ (r_s + r_x + r_3) i_1 - r_x i_2 - r_3 i_3 = v_0 \end{cases} \tag{1}$$

利用高斯消元法我们可以求解这个方程。

3 伪代码

Algorithm 1 GAUSSIAN ELIMINATION

Input: Matrix A,b

Output: Solution x

$n = Dimension\ of\ A, M = [A, b], initial\ x$
for i in range(n) do
    for k in range(1,n) do
        if |M[k,i]|>|M[i,i]| then
            $Swap\ M[k]\ and\ M[i]$
        end if
    end for
    for j in range (i+1,n) do
        $M[j] -= M[j,i] * M[i]/M[i,i]$
    end for
    $x[n-1] = M[n-1,n]/M[n-1,n-1]$
    for i in range(n-1,-1,-1) do
        $z = 0$
        for j in range(i+1,n) do
            $z += M[i,j] * x[j]$
        end for
        $x[i] = (M[i,n] - z)/M[i,i]$
        return x

Algorithm 2 SOLVING EQUIVALENT RESISTANCE

Input: $r_1, r_2, r_3, r_a, r_x, r_s, v_0$

Output: equivalent resistance r_e

A=$[[-r_x, r_1 + r_a - r_x, -r_a], [-r_3, -r_a, r_2 + r_3 + r_a], [r_s + r_x + r_3, -r_x, -r_3]]$,b=$[0,0,v_0]$

x=Gaussian Elimination(A,b)

$v_e = v_0/x[0]$

return v_e =0

4 运行结果

初值和结果如图，得到 $v_e = 4.3$ 同时我们将 python 运算结果和 Mathematica 直接求解进行对比，发现电流求解结果相同，说明程序顺利运行。

```
/Users/pro/opt/anaconda3/bin/python /Users/pro/opt/COMPUPHY/homework3/3_2.py
请输入r1: 1
请输入r2: 2
请输入r3: 3
请输入rs: 4
请输入ra: 2
请输入rx: 1
请输入v0: 5
[1.1627907  1.51162791 0.93023256]
4.3
```

图 二　Python 运行结果

```
In[13]:= M = {{-1, 2, -2}, {-3, -2, 7}, {8, -1, -3}}
Out[13]= {{-1, 2, -2}, {-3, -2, 7}, {8, -1, -3}}

In[14]:= b = {0, 0, 5}
Out[14]= {0, 0, 5}

In[15]:= N[Dot[Inverse[M], b]]
         |… |点积 |逆
Out[15]= {1.16279, 1.51163, 0.930233}
```

图 三　Mathematica 运行结果

三 第三题

1 问题描述

利用高斯基 $\phi_i = (v_i/\pi)^{1/2} e^{-(v_i(x-s_i)^2)}$ 展开求解薛定谔方程，找到体系的基态，这里有两种势能 1.$V(x) = x^2$ 2.$V(x) = x^4 - x^2$, 在问题中我们设 $m = h/2\pi = 1$, 即 $H = -1/2d^2/dx^2 + x^2$。

2 求解思路

根据定态薛定谔方程:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{2}$$

$|\psi\rangle$ 可以在高斯基上展开:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle \tag{3}$$

代入薛定谔方程并左乘 $\langle\phi_m|$ 可以得到:

$$\sum_n c_n \langle\phi_m| H |\phi_n\rangle = E \sum_n c_n \langle\phi_m||\phi_n\rangle \tag{4}$$

定义 $S_{mn} = \langle\phi_m||\phi_n\rangle$,$H_{mn} = \langle\phi_m| H |\phi_n\rangle$，则问题化为一个矩阵的本征值问题:

$$S^{-1}HC = EC \tag{5}$$

利用 Mathematica 我们可以计算出 H_{mn},S_{mn}:

$$S_{ij} = (\frac{v_0}{2\pi})^{1/2} e^{-\frac{1}{2}v_0(s_i-s_j)^2} \tag{6}$$

$$H_{ij} = e^{-\frac{1}{2}v_0(s_i-s_j)^2} \frac{1 + 2v_0^2 - 2v_0^3(s_i - s_j)^2 + v_0(s_i + s_j)^2}{4(2\pi v_0)^{\frac{1}{2}})}, V(x) = x^2 \tag{7}$$

$$H_{ij} = e^{-\frac{1}{2}v_0(s_i-s_j)^2} \frac{3 + 2v_0(3(s_i + s_j)^2 - 2) + (s_i + s_j)^2 v_0^2((s_i + s_j)^2 - 4) + 8v_0^3 - 8(s_i - s_j)^2 v_0^4}{16(2\pi v_0^3)^{\frac{1}{2}}} \quad V(x) = x^4 - x^2 \tag{8}$$

3 伪代码

Algorithm 3 Solving Schrodinger Eq. with Gaussian bases

Input: number of bases n

Output: the state Energy E

1: *intial* s_i *in range*$(-n/2, n/2+1)$

2: *get* H *and* S *with its function*

3: *inverse* S

4: $E = the\ eigenvalue\ of\ S^{-1}H$

5: return E

---

4 运行结果

我们发现 $V(x) = x^2$ 的基态能量为 0.7076，与理论计算结果 $\frac{\sqrt{2}}{2}$ 相吻合,$V(x) = x^4 - x^2$ 的基态能量为 0.3573。其他激发态能量如图，并且我们将所有波函数叠加起来可以得到完整的波函数。

```
/Users/pro/opt/anaconda3/bin/python /Users/pro/opt/COMPUPHY/homework3/3_3.py
[0.7076322956456315, 2.2027822609782586, 3.6180359022428266, 6.054991099658326, 7.375962513828692, 12.261995646194242, 13.351358154164227, 22.216739157298147, 23.033029739762824]
[0.3572923177975189, 2.304391877068235, 5.48018793793985, 25.74883714538822, 35.95657438895135, 131.68221047828928, 151.9583831421347, 477.2517047488485, 508.29283589268977]
```

图 四 能量

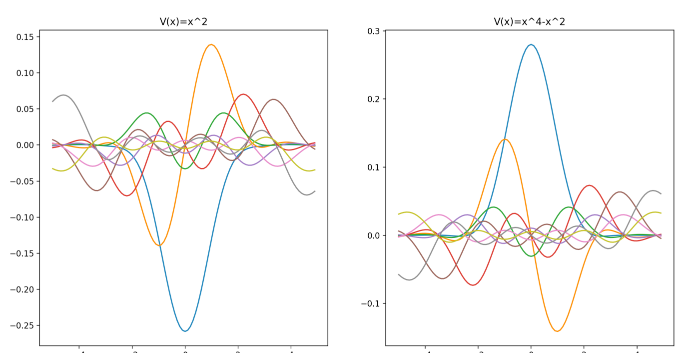

图 五 波函数