计算物理作业 2

李明钰 22307110156

2024 年 9 月 20 日

1 题目 1：画函数图像 $x^3 - 5x + 3 = 0$

首先，我们画出大致的函数图像如图1所示，容易观察到，其有两个正根，分别处于 (0,1) 和 (1,2) 上。

1.1 第一问：用二分法将两个正根精确到小数点后四位

1.1.1 程序描述

题目要求使用二分法求根，选择最初的区间长度为 1，$2^{14} = 16384$，只需迭代 14 次即可达到要求。利用算法1，设置函数为 $f(x) = x^3 - 5x + 3 = 0$，区间分别为 (0,1) 和 (1，2) 并设置 $n = 14$ 即可达到所需效果。

1.1.2 伪代码

Algorithm 1 Bisection method

Require: a, b :float n:int f:function

Ensure: root

$x_{l,0} = a \quad x_{r,0} = b x_0 = \frac{x_{l,0}+x_{r,0}}{2}$

for $k \leftarrow 0$ **to** n **do**

  if $f(x) \times f(x_{l,k}) < 0$ **then**

    $x_{l,(k+1)} = x_{l,k} \quad x_{r,(k+1)} = x_k$

  else

    $x_{l,(k+1)} = x_k \quad x_{r,(k+1)} = x_{r,k}$

  end if$x_{(k+1)} = \frac{x_{l,(k+1)+x_{r,(k+1)}}+}{2}$

end for

return x_n

1.1.3 输出实例

如图2所示。

1.2 第二问：在第一问基础上用牛顿法将小数点精确到 14 位

先计算出其导数，记为 $g(x) = \frac{df}{dx} = 3x^2 - 5$

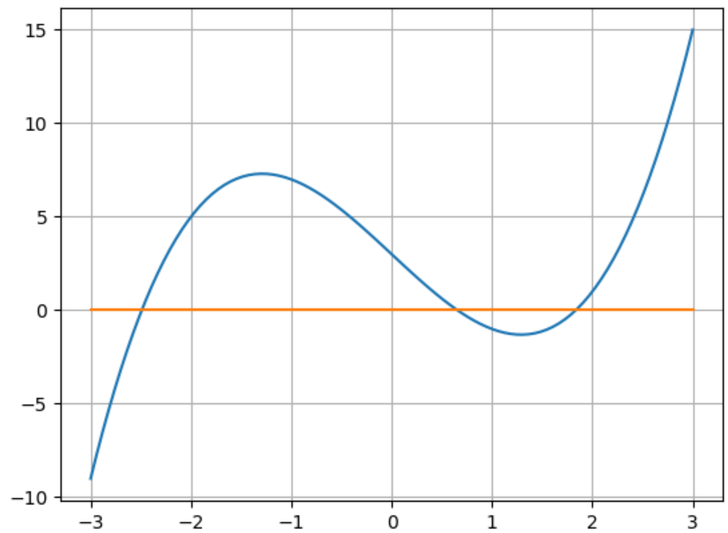


图 1: 第一问函数图像的大致形状

```
...   (0.65667724609375, 1.83428955078125)
```

图 2: 第一问输出实例

1.2.1 程序描述

由第一问所求出的零点的大致位置，可以得到，在零点位置处的导数约为-3.7 和 5.1，通过估算和实际尝试，用牛顿法 (算法2) 迭代约 20 次 (n 取 20) 的情况下，解将收敛且精度达到 14 位小数。

1.2.2 伪代码

Algorithm 2 Newton-Raphson Method

Require: x_0:float n:int f:function
Ensure: $root$
  $g = f'$
  for $k \leftarrow 1$ **to** n **do**
    $x_{(k+1)} = x - \frac{f(x_k)}{g(x_k)}$
  end for
  return x_n

1.2.3 输出实例

如图3所示

```
3  x1,x2,f(x1),f(x2)
✓ 0.0s
(0.6566204310471104, 1.834243184313922, 0.0, 8.881784197001252e-16)
```

图 3: 第二问输出实例

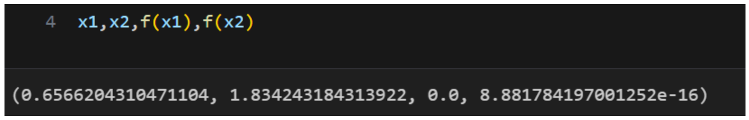


图 4: 第三问输出实例

1.3 第三问：用混合方法计算根至小数点后 14 位

1.4 程序描述

从收敛性角度来看，二分法是线性收敛而牛顿法是二次收敛，因此牛顿法更好，但是牛顿法有一个致命缺点，当迭代过程中出现某一 x_k 使得 $\frac{df}{dx}|_{x_k}=0$ 时，将无法继续迭代，因此，采用与二分法相结合的方式，在牛顿法无法迭代时，采用二分法进行迭代，即算法在本题目中，不再人为限定迭代次数，而是设置为持续迭代至 $|f(x_k)|<\epsilon$ 时认为其已经收敛，因为主要还是靠牛顿法进行迭代，由第二问所算出的在根附近 f 的导数值，认为设 $\epsilon=10^{-15}$ 即可达到所要求的精度。

1.4.1 伪代码

Algorithm 3 Newton Bisection Hybrid

Require: $(a,b):float \quad \epsilon:float \quad f:function$

Ensure: root

$x_0=\frac{a+b}{2} \quad x_l=a \quad x_r=b \quad g(x)=\frac{df}{dx}$

while $|f(x)|>\epsilon$ **do**

  if $g(x_r)=0$ **then**

    if $f(x_l)\cdot f(x_0)<0$ **then**

      $x_l\leftarrow x_l \quad x_r\leftarrow x_0 \quad x_0\leftarrow\frac{x_l+x_r}{2}$

    else

      $x_l\leftarrow x_0 \quad x_r\leftarrow x_r \quad x_0\leftarrow\frac{x_l+x_r}{2}$

    end if

  else

    $x_0\leftarrow x_0-\frac{f(x_0)}{g(x_0)}$

  end if

end while

return x_0

1.4.2 输出实例

如图4所示。

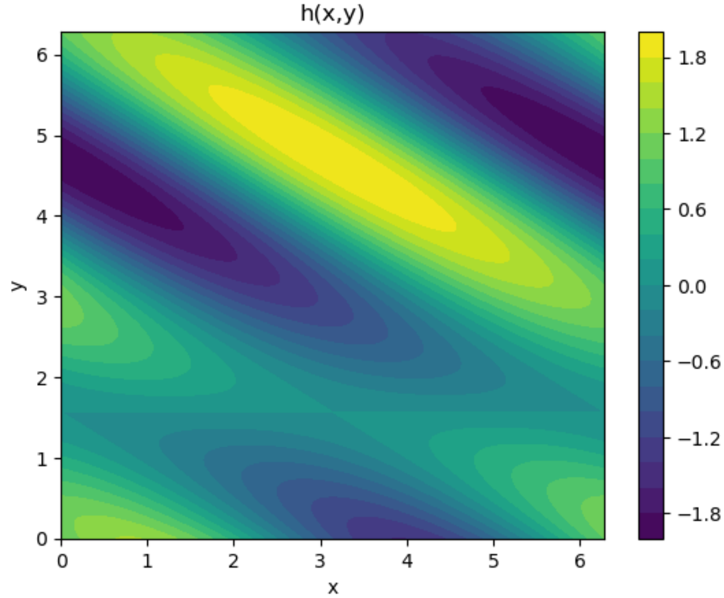


图 5: 第二题目函数图像

2 题目 2：Search for the minimum of the function $h(x,y) = \sin(x+y) + \cos(x+2y)$ in the whole space

2.1 程序描述

g(x,y) 在 x 轴和 y 轴上均具有周期 2π，因此只需要计算 $(x,y) \in (0,2\pi]^2$ 范围内的最小值即可，其就为全局最小值。可以直接解析算出，其落在该范围内的全局最小值点在 $(0,1.5\pi)$ 处得到。

先通过将该区域分为 1000 个小方格，分别计算其函数值画出函数大致图像（如图5所示）并找到最小值大概位置。

然后将该点记为梯度下降的起始点 (x_0,y_0) 借助最速梯度下降算法 (算法4) 将结果精确到小数点后 4 位数

2.2 伪代码

Algorithm 4 Steepest-descent method

Require: $h(x,y) : function((float, float) \to float) \quad (x_0,y_0), a, epsilon : float$

Ensure: $(x_{min}, y_{min}), h_{min}$

$x = x_0 y = y_0$

while $||\nabla h||^2 < \epsilon$ **do**

$x \leftarrow x - a \cdot \frac{\nabla h}{||\nabla h||} \qquad y \leftarrow y - a \cdot \frac{\nabla h}{||\nabla h||}$

end while

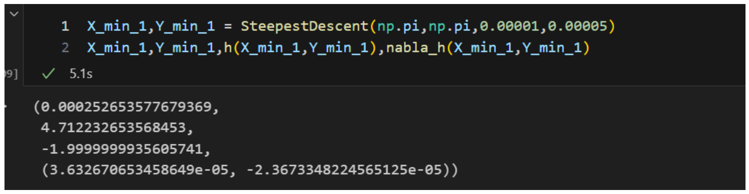
return $x_{min} = x \quad y_{min} = y \quad h_{min} = h(x,y)$

2.3 输出实例

首先，直接进行遍历求最小值，得到结果如图6所示，与解析解 $1.5\pi \approx 4.71238898$ 对比精度只有小数点后 2 位，借助最速下降算法 (算法4) 进一步求解后得到结果如图7，精度提升至小数点后 4 位。

```
h_min,X_min,Y_min
0.0s
(-1.9999938191460434, 0.0, 4.710816611689199)
```

图 6: 第二题直接遍历输出结果



```
X_min_1,Y_min_1 = SteepestDescent(np.pi,np.pi,0.00001,0.00005)
X_min_1,Y_min_1,h(X_min_1,Y_min_1),nabla_h(X_min_1,Y_min_1)
5.1s
(0.000252653577679369,
 4.712232653568453,
 -1.999999935605741,
 (3.632670653458649e-05, -2.3673348224565125e-05))
```

图 7: 第二题输出实例

3 第四题：解电子在特定有限深方势阱的束缚态波函数

对电子的定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \tag{1}$$

其中 $V(x)$ 满足：

$$V(x)=\begin{cases} V_0 & x\leq -a \\ 0 & -a<x<a \\ V_0 & x\geq a \end{cases} \tag{2}$$

则其解可以被写为

$$\begin{aligned} &\psi_{\mathrm{I}}=Ce^{\beta x}\beta=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar \\ &\psi_{\mathrm{II}}=A\sin\alpha x+B\cos\alpha x \quad \alpha=\sqrt{2mE}/\hbar \\ &\psi_{\mathrm{III}}=Fe^{-\beta x} \end{aligned} \tag{3}$$

借助边界条件和群论，可以得到其解可以被分为两种

- 偶态：$A=0 \quad B\cos\alpha a=Ce^{-\beta a} \quad C=F$
- 奇态：$B=0 \quad -A\cos\alpha a=Ce^{-\beta a} \quad C=-F$

因此对偶态和奇态，只需要分别解满足方程

$$\begin{aligned} f_{even}(\mathrm{E})&=\alpha\sin\alpha a-\beta\cos\alpha a=0 \\ f_{odd}(\mathrm{E})&=\alpha\sin\alpha a+\beta\cos\alpha a=0 \end{aligned} \tag{4}$$

分别画出其大致函数图像如图8所示，能量最低的三个本征态中有两个是偶数态（0.2 到 0.3 之间）和（1.5 到 1.6 之间），一个为奇数态（0.8 到 0.9 之间），考虑最后一个根距离边界 $1.6\times10^{-18}J$ 很近，外加函数导数情况难以判断，用差分法求导数后借助混合法（算法3）求其根，再带回公式3得到相应波函数。

3.1 输出示例

求得三个最低的本征能量以焦耳 J 为单位和以电子伏特 eV 分别如图9所示，得到归一化前的波函数 ψ 图像如图10，对应概率密度图像 $|\Psi|^2$ 如图11所示。

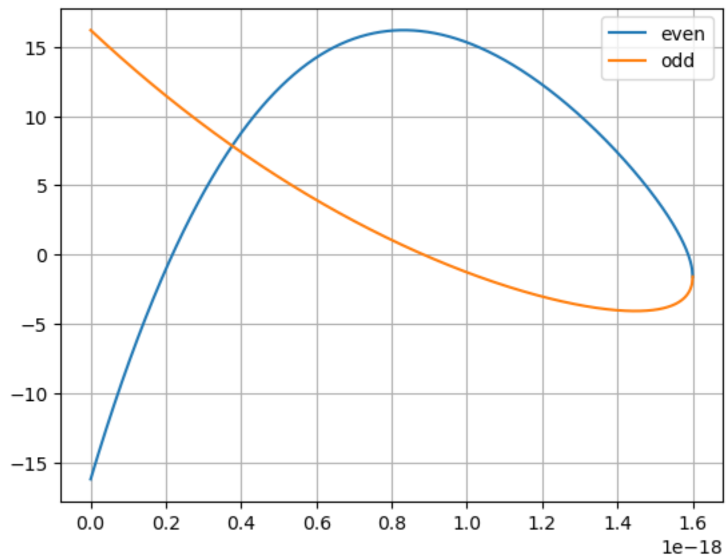


图 8: 第三题待解方程大致图像

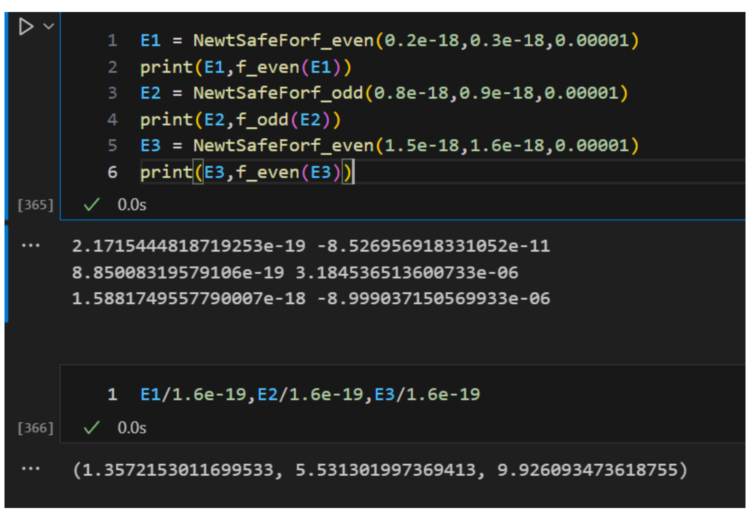


图 9: 三个最低本征能量

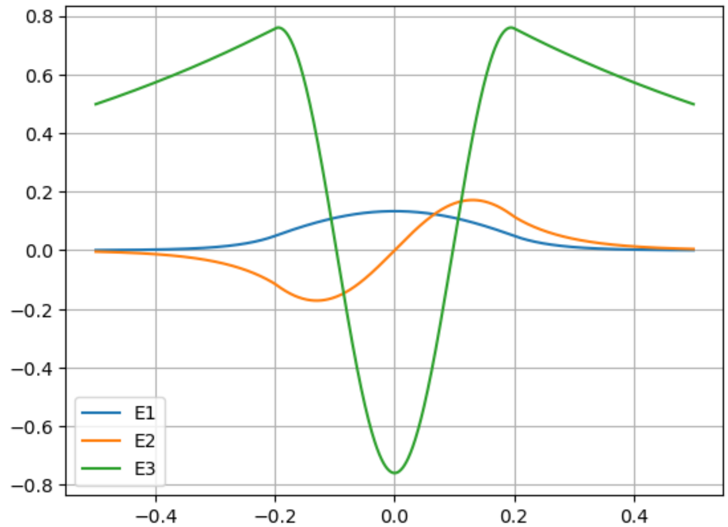


图 10: 波函数（未归一化）图像

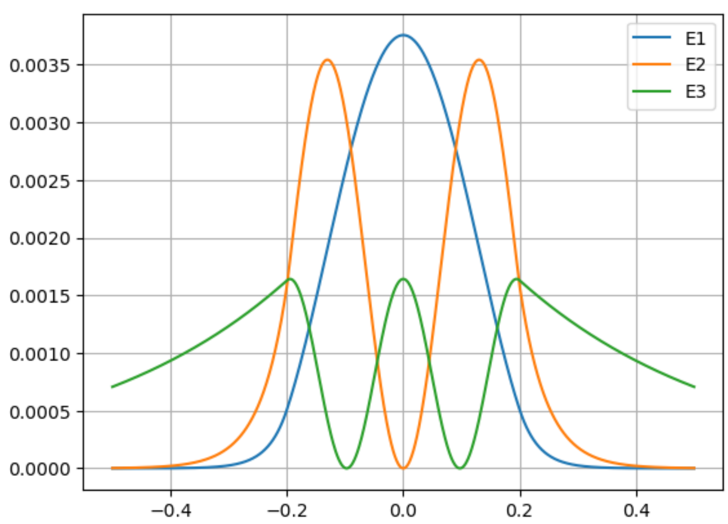


图 11: 概率密度函数图像