Homework 3

杨中义 物理学系 20307110314

2023.9.16

1. Problem 1 Time Complexity Of Gaussian elimination

1.1. Problem Description

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

1.2. Proof

针对一个$n*n$的矩阵，高斯消去法的步骤如下：

1)如果主元是0，换行将主元换成非0，需要一步操作

2)将第一行所有元素乘系数$C_{1i}=\dfrac{a_{i1}}{a_{11}}, i=2,3,$ ...... n，再用第i行减去，相应操作过的第一行，操作数为$n(n-1)$

3)对于第二行，所有元素乘$C_{2i}=\dfrac{a_{i2}}{a_{22}}, i=3,$ ...... n，再用第i行减去，相应操作过的第二行，操作数为$(n-1)(n-2)$

4)以此类推，对于第j行……操作数为$(n-j+1)(n-j)$，此时第j列a_{jj}以下的所有元素变为0

总共对n行进行如此操作，总操作数N为：

$$N=\sum_{k=1}^{n}(n-k+1)(n-k)=\frac{n\left(n+\frac{1}{2}\right)(n+1)}{3}-\frac{n(n+1)}{2}\Rightarrow N\text{~}O\left(n^3\right) \tag{1}$$

n很大时，忽略第一步的影响，高斯消去法的时间复杂度为$O\left(n^3\right)$。

2. Problem 2 Gaussian elimination with partial-pivoting

2.1. Problem Description

用Gaussian elimination algorithm和partial-pivoting scheme求解方程组.（注意:每次消元时主元

的选取是各列中系数最大的，需要完成程序）

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 + 5x_3 & = & 5 \\ 3x_1 + 4x_2 + 8x_3 & = & 6 \\ x_1 + 3x_2 + 3x_3 & = & 5 \end{cases}$$

2.2. Code Description

题目要求在partial-pivoting下执行高斯消去法，因此程序主要由三个部分组成：

1)遍历每一行i，考察从$j \in [i, 3]$内的主元a_{ji}的大小关系，将最大的a_{ji}所属的行换到第i行。

2)逐行执行高斯消去法，使得对于当前行i, a_{ii}以下的元素全部变为0。

3)执行回溯求解，通过递推法求出方程的所有解。

以下流程图可以作为代码逻辑的一个参考。

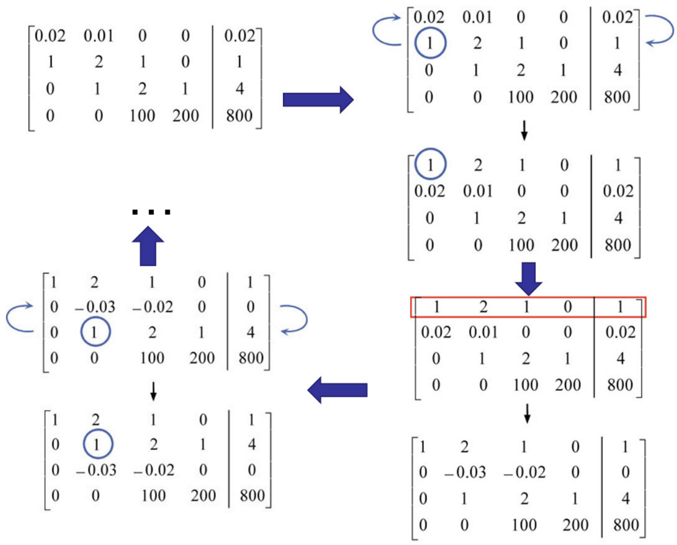

Figure 1: partial-pivoting

程序所用到的源文件为gaussian_elimination\gaussian_elimination_partial_pivoting.py

2.3. Pseudo Code

Algorithm: Gaussian elimination with partial-pivoting

Input: A 3 $\times$ 4 Extended Matrix:E
Output: The solution to the linear equation

for $i \leftarrow 1$ to 3 do:
  $max = E_{ii}$
  for $j \leftarrow i+1$ to 3 do: $\Rightarrow$ partial pivoting(changing rows)
    if $|E_{ji}| > max \ \rightarrow swap\ row\ i, j$
  for $k \leftarrow i+1$ to 3 do: $\Rightarrow$ Gaussian Elimination
    $E \rightarrow E - (E_{ki} \,/\, E_{ii})*row\ i$
$x_3 \leftarrow E_{34} \,/\, E_{33}$
$x_i \leftarrow \dfrac{E_{i3} - \sum_{j=i+1}^{3} E_{ij}*x_j}{E_{ii}}$ $\Rightarrow$ backward substitution

2.4. Testing Case:

程序的输出如下所示：

```
PS C:\Users\Yzy> python -u "c:\Users\Yzy\Desktop\co
gaussian_elimination_partial_pivoting.py"
The solution to the given function is:
x0= 2.0000
x1= 2.0000
x2= -1.0000
PS C:\Users\Yzy>
```

Figure 2: solution to the equation

3. Problem 3 Shrodinger equation

3.1. Problem Description

Solve the 1D Schrodinger equation with the potential (i) $V(x) = x^2$; (ii) $V(x) = x^4 - x^2$with the variational approach using a Gaussian basis (either fixed widths or fixed centers). Consider the three lowest energy eigenstates.

3.2. Code Description

题目要求以高斯波包$\Psi(x) = \sqrt{\dfrac{v}{\pi}}\, e^{-v(x-s)^2}$为一组基通过矩阵形式的变分法求解薛定谔方程，得到本征值和本征态，在程序中只求出能量最低的三个本征解。

高斯波包作为基有两个可调参数，波包中心位置s和波包展宽v, 我们选择一组展开的基时，只变化一个参数进行变化，固定另一个参数。对与一组基$\Psi(x)$，哈密顿量矩阵为

$H_{ij}=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_i^*(x)\widehat{H}\Psi_j(x)dx$,则在所选的表象下薛定谔方程为$HC=EC$, 其中E为本征能级，C为展开系数，用于求出变分波函数。

对于高斯波包作为基张成的空间，基之间并不相互正交，求解特征值、特征向量需要引入修正矩阵$S:S_{ij}=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_i^*(x)\Psi_j(x)dx$, 将矩阵修正为$H'=S^{-\frac{1}{2}}HS^{-\frac{1}{2}}$, 计算出的$H'$的本征值$E$、本征向量$C'$，再通过变换$C=S^{-\frac{1}{2}}C'$得到最后的波函数对应的本征向量。

本程序主要分为三个部分。1.计算H矩阵 。2.计算S矩阵。 3.计算修正后的H'的本征值和本征向量求出最后的能级和波函数。矩阵元的计算涉及到繁琐的高斯积分，在Mathematica 完成得到解析解后直接应用到Python主程序中。

对势能为$V(x)=x^2$情况：

(a)固定v,取定一组$s_i,\Psi_i(x)=\sqrt{\frac{v}{\pi}}\,e^{-v(x-s)^2}$，解析计算得到

$$S_{ij}=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_i^*(x)\Psi_j(x)dx=\frac{\sqrt{v}e^{-\frac{1}{2}v(s_j-s_i)^2}}{\sqrt{2\pi}} \tag{2}$$

$$H_{ij}=-\frac{e^{-\frac{1}{2}v(s_j-s_i)^2}\left(2h^2v^2\left(1-v(s_i-s_j)^2\right)+mv(s_i+s_j)+m\right)}{4\sqrt{2\pi}m\sqrt{v}} \tag{3}$$

(b)固定s,取定一组v_i,$\Psi_i(x)=\sqrt{\frac{v_i}{\pi}}\,e^{-v_i(x-s)^2}$, 解析计算得到:

$$S_{ij}=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_i^*(x)\Psi_j(x)dx=\frac{\sqrt{v_iv_j}}{\sqrt{\pi(v_i+vj)}} \tag{4}$$

$$H_{ij}=\frac{\sqrt{v_iv_j}\left(2h^2v_iv_j+2ms^2(v_i+v_j)+m\right)}{2\sqrt{\pi}m(v_i+v_j)^{3/2}} \tag{5}$$

对势能为$V(x)=x^4-x^2$情况：

(a)固定v,取定一组$s_i,\Psi_i(x)=\sqrt{\frac{v}{\pi}}\,e^{-v(x-s)^2}$，解析计算得到:

$$H_{ij} = \frac{\left(8h^2v^3\left(1-v(s_i-s_j)^2\right)+m\left(v\left((s_i+s_j)^2\left(v(s_i+s_j)^2-4\right)+6\right)-4\right)+3\right))}{16\sqrt{2\pi}mv^{3/2}e^{-\frac{1}{2}v(s_i-s_j)^2}} \tag{6}$$

S_{ij}同(2)

(b)固定s,取定一组v_i,$\Psi_i(x) = \sqrt{\frac{v_i}{\pi}}\ e^{-v_i(x-s)^2}$,解析计算得到:

$$H_{ij} = \frac{\sqrt{v_iv_j}4h^2v_iv_j(v_i+v_j)+m\left(4\left(s^2-1\right)s^2v_i^2+2v_i\left(2s^2\left(2\left(s^2-1\right)v_j+3\right)-1\right)\right)}{4\sqrt{\pi}m(v_i+v_j)^{5/2}} + \frac{m\left(4s^2v_j\left(\left(s^2-1\right)v_j+3\right)-2v_j+3\right)}{4\sqrt{\pi}m(v_i+v_j)^{5/2}} \tag{7}$$

本程序的源代码位于文件夹shrodinger_equation中，其中

potential_v1_para_s.py 将s作为参数求解(i)

potential_v1_para_v.py 将v作为参数求解(i)

potential_v2_para_s.py 将s作为参数求解(ii)

potential_v2_para_v.py 将v作为参数求解(ii)

使用的第三方库有 numpy,scipy,matplotlib

3.3. Pseudo Code

由于对不同的势、不同的变分参数使用的代码逻辑相同，这里只给出一个伪代码。

Algorithm: Solve Shrodiner Equation

Input: /

Output: 3 lowest energy eigenstates and corresponding eigenfunctions

1: calculate the matrix H and S

2: $H' \leftarrow S^{-1/2}HS^{-1/2}$

3: Solve $H'C' = EC'$ $\Rightarrow$ calcualte the eigenvalues and corresponding eigenvectors

4: indexes $\leftarrow$ the 3 indexes of the 3 lowest eigenenergy of E

5: $C \leftarrow S^{-1/2}C'$

6: eigenstates $\leftarrow$ $E[indexes]$ $\Rightarrow$ the 3 lowest energy eigenstates

7:$\Psi(x) \leftarrow \sum_{i=0}^{n-1} c_i^*\Psi_i(x)$ when C is the corresponding with $E[indexes]$ $\Rightarrow$ wave functions

3.4. Testing Case

(i) $V(x) = x^2$

(a)以s为变分参数

```
The three lowest eigenenergy with potention V(x) = x^2 are:
1.0000
3.0000
5.0000
PS C:\Users\Yzy\Desktop\computation physics\computataion physics homework\homework3\shrodinger_equation>
```

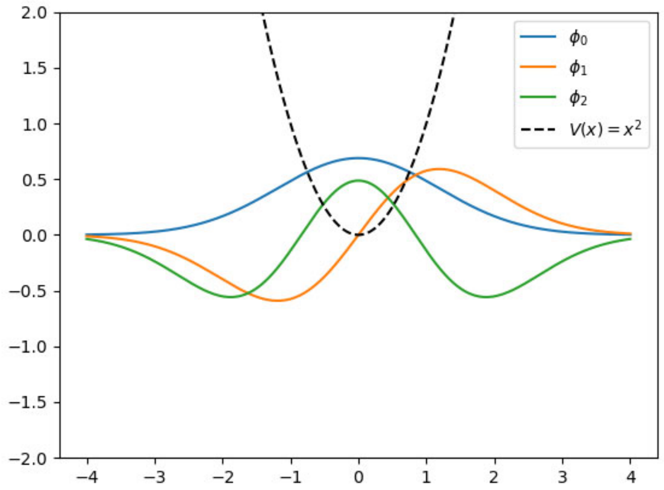

Figure 3: 3 lowest energy eigenstates and corresponding wave functions

(b)以v为变分参数

```
The three lowest eigenenergy with potention V(x) = x^2 are:
0.7077
3.6250
7.4342
PS C:\Users\Yzy\Desktop\computation physics\computataion physics homework\homework3\shrodinger_equation>
```

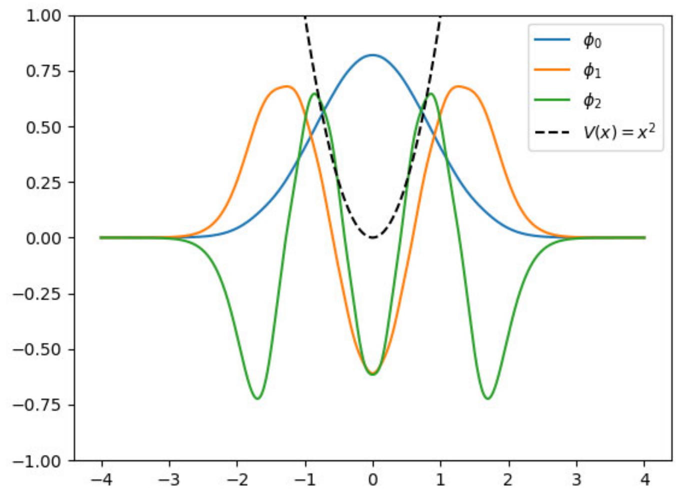

Figure 4: 3 lowest energy eigenstates and corresponding wave functions

(ii)$V(x) = x^4 - x^2$

(a)以s为变分参数

```
The three lowest eigenenergy with potention V(x) = x^4_x^2 are:
0.6577
2.8345
6.1639
PS C:\Users\Yzy\Desktop\computation physics\computataion physics homework\homework3\shrodinger_equation>
```

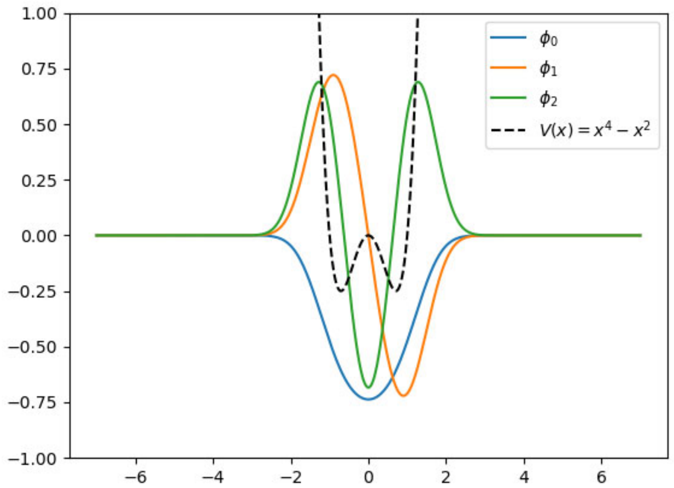

Figure 5: 3 lowest energy eigenstates and corresponding wave functions

(b)以v为变分参数

```
The three lowest eigenenergy with potention V(x) = x^2-x^4 are:
0.3383
3.6666
8.7466
PS C:\Users\Yzy\Desktop\computation physics\computataion physics homework\homework3\shrodinger_equation>
```

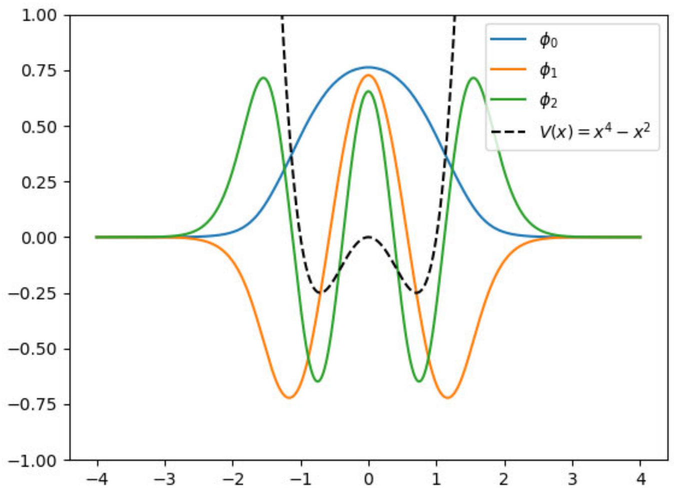

Figure 6: 3 lowest energy eigenstates and corresponding wave functions

从波函数图像看出，以s为变量和以v为变量两个波函数的解似乎并不一致。然而，因为只

改变v时，所叠加的基均是偶函数，最后的波函数的解一定也是偶函数。而对s进行变分时，由于是函数为偶函数，最后所得的解只能是奇函数或者偶函数。

从谐振子势能的解，容易得到对s变分得到的三个本征态分别为基态(n=0)、第一激发态(n=1)和第二激发态(n=2), 而对v进行变分得到的三个能态分别为基态、第二激发态、第四激发态，这从函数图像也可以看出。