物理学中的非线性计算

- ✓ 非线性方程求根 --铁磁相变平均场模型求解
- ✓ 打靶法求解无限深势阱（或一维弦振动）的本征问题
- ✓ 基于最速下降法的局部优化

非线性方程求根

求函数 $f(x) = x^2 - 8=0$ 的正根

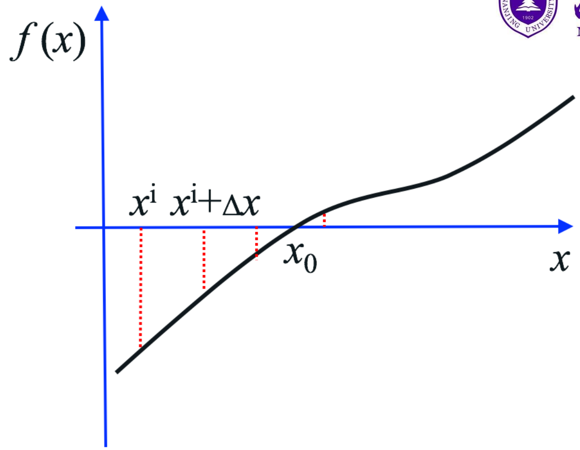
1 搜索法

2 二分法

3 Newton-Raphson

非线性方程求根

搜索法： $f(x) = x^2 - 8 = 0$



一般步骤：

1. 设定搜索初始值$x = x^i$，步长Δx，精度要求ε，并计算函数值$f(x^i)$；

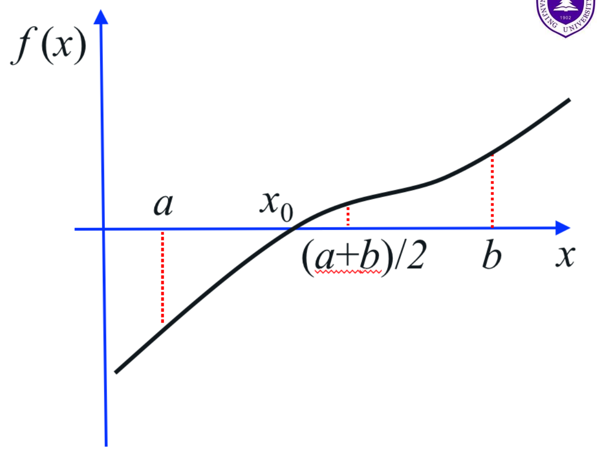
2. 更新x：$x^{i+1} = x^i + \Delta x$，计算$f(x^{i+1})$的数值，若$f(x^{i+1}) < \varepsilon$，停止搜索；

3. 判断$f(x^i)\,f(x^{i+1}) > 0$是否成立；如成立，则接受$x = x^{i+1}$为新的搜索值；

4. 否则$x = x^i$，并减小步长，即$\Delta x = \Delta x/2$，并返回步骤2。

“逐步试探” + “步长减半”

非线性方程求根



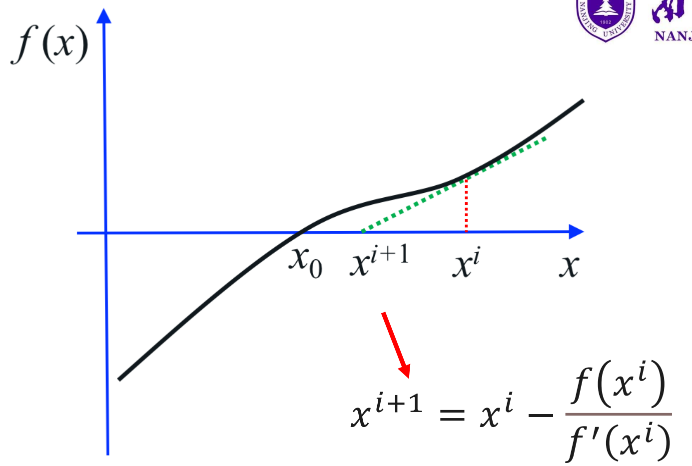
二分法： $\boldsymbol{f(x) = x^2 - 8 = 0}$

一般步骤：

1. 设定初始区间边界**[a,b]**，满足即**f(a)f(b)<0**，并设定精度要求**ε**；
2. 计算新区间边界$x^i = (a+b)/2$，并计算$f(x^i)$的数值；
3. 判断$f(x^i) < \varepsilon$是否成立；如果成立，则x^i为满足精度要求的根，停止计算；
4. 判断$f(x^i)\,f(a) < 0$是否成立，如成立，则$b = x^i$,否则$a = x^i$，并返回步骤**2**。

非线性方程求根

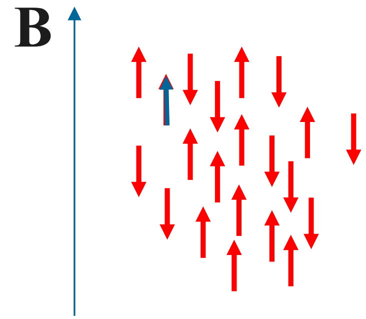
牛顿-拉普逊法： $\boldsymbol{f(x) = x^2 - 8 = 0}$



一般步骤：

1. 设定初始值$\boldsymbol{x = x^i}$，精度要求$\boldsymbol{\varepsilon}$；
2. 计算$f(x^i)$和$f'(x^i)$的数值，判断若$f(x^i) < \varepsilon$是否成立，若成立停止迭代；
3. 根据$x^{i+1} = x^i - f(x^i)/f'(x^i)$ 计算$\boldsymbol{x^{i+1}}$，$\boldsymbol{x^i = x^{i+1}}$；
4. 重复步骤**2,3**直到找到满足精度的根。

非线性方程求根：铁磁相变平均场模型



moment: **μ**

Energy: E = **-μ·B**

$$\boldsymbol{P_i = \frac{e^{-E_i\ /k_B T}}{\sum_i e^{-E_i\ /k_B T}}}$$

spin-up and spin-down的几率为：

$$P_u = \frac{e^{\mu B/k_B T}}{e^{\mu B/k_B T} + e^{-\mu B/k_B T}} \qquad P_d = \frac{e^{-\mu B/k_B T}}{e^{\mu B/k_B T} + e^{-\mu B/k_B T}}$$

忽略外磁场，则分子磁场可有下式给出：

$$M(T) = \mu \times (N_u - N_d) = N \cdot \mu \cdot \frac{e^{\mu B/k_B T} - e^{-\mu B/k_B T}}{e^{\mu B/k_B T} + e^{-\mu B/k_B T}} = N \cdot \mu \cdot \tanh(\frac{\lambda \mu M(T)}{k_B T})$$

$$\frac{M(T)}{N \cdot \mu} = tanh\left(\frac{\lambda \mu M(T)}{k_B T}\right) \qquad m(\mathrm{T}) = \frac{M(T)}{N\mu}; t = \frac{T}{T_C}; T_C = \frac{N\mu^2\lambda}{k_B}$$

方程约化为：$m(\mathrm{t}) = \tanh\left(\frac{m(\mathrm{t})}{t}\right)$ 即：$m(t) - tanh\left(\frac{m(t)}{t}\right) = 0$

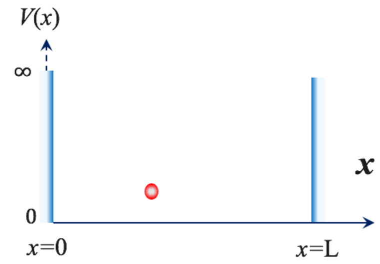
以上方程为超越方程，需数值求解！

非线性方程求根：打靶法求解本征值问题

物理问题：一维薛定谔方程的定态解

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V(x)=E\psi \xrightarrow{k^2=\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]} \boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0}$$

无限深势阱



$$V(x)=\begin{cases}\infty; & x\le 0 \ or \ x\ge 1.0\\ 0; 0<x<1.0\end{cases}$$

特点：1 只对一些特定的 k_n 值才能找到满足边界条件的解 ψ_n

本征值：k_n　　　　本征函数：ψ_n

2 方程是线性的和齐次的

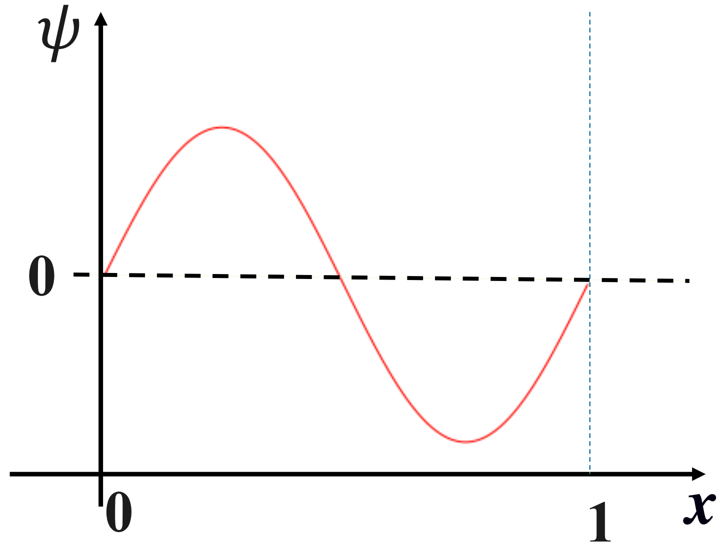
解析解：　$k_n=n\pi$　　　$\psi_n\propto\sin(n\pi x)$

非线性方程求根：打靶法求解本征值问题

物理问题：一维薛定谔方程的定态解

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad (0 < x < 1.0) \\ \psi(x=0) = \psi(x=1.0) = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dfrac{d\phi}{dx} = -k^2\psi \\ \dfrac{d\psi}{dx} = \phi \end{cases}$$



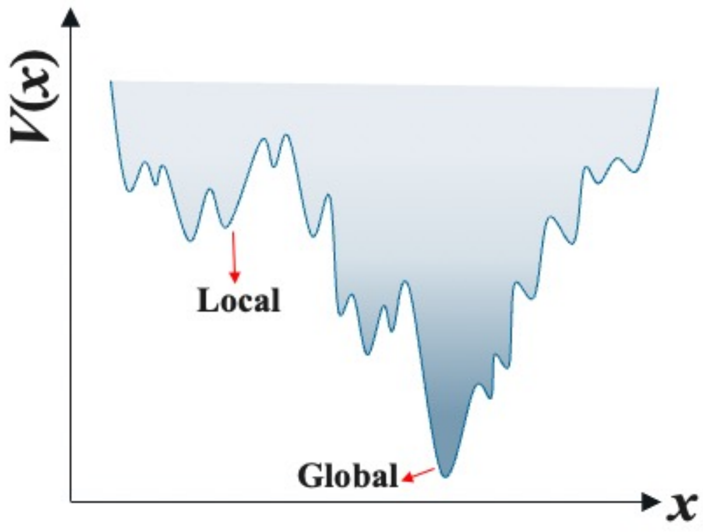
打靶法求解步骤：

1. 先猜一个试验本征值k；
2. 从x=0开始求微分方程，初始条件为：

$$\boldsymbol{\psi(x=0)=0,\ \psi'(x=0)=\varphi(x=0)=\varepsilon}$$

3. 求出x=1时的ψ值，判断是否满足条件$\psi(x=1)=0$
4. 若满足，得本征值与本征函数，否则重复1, 2, 3步

最优化问题：基于最速下降法的局部优化



常用优化方法：

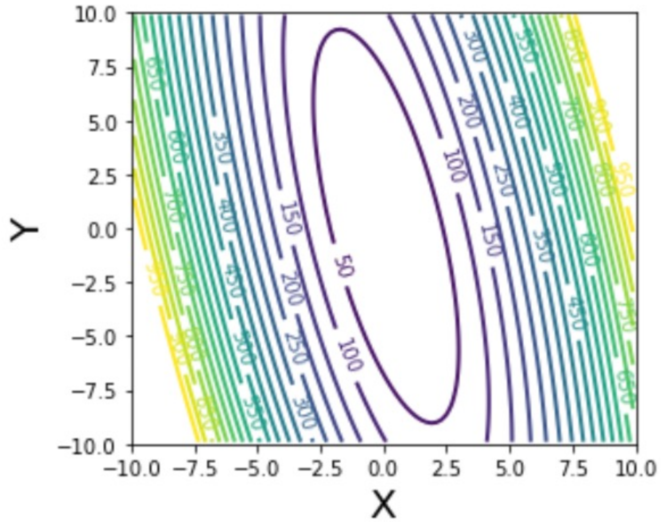
- ✓ **最速下降法，共轭梯度法**
- ✓ 模拟退火
- ✓ 遗传算法
- ✓ ……

最优化问题：基于最速下降法的局部优化

$$U(x,y) = x^2 + 10y^2 + 4xy$$

什么方向下降速度最快？ $-\nabla U(x,y)$

$$\Delta(x_n, y_n) = G(x_n, y_n)$$



最速下降法实现步骤:

1. 设定精度要求ϵ，初始搜索位置和搜索步长$\boldsymbol{h}$；

2. 计算负梯度方向，以步长$\boldsymbol{h}$更新位置(x', y')并计算能量$U(x', y')$；

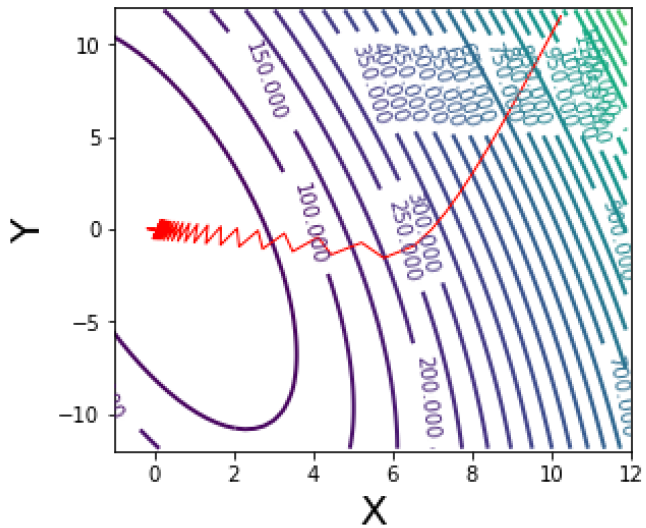
3. 如果$U(x', y') > U(x, y)$成立，则试探新位置舍弃，并令$\boldsymbol{h=h/2}$；

   反之将当前位置设置为试探新位置，即$(x, y) = (x', y')$；

4. 判断**h**<ϵ是否成立，若成立，结束计算；否则返回步骤**2**。

最优化问题：基于最速下降法的局部优化

共轭梯度法：



最速下降方法的缺点：

- ✓ 狭窄通道的激烈振荡行为
- ✓ 历史信息的缺失

改进方法：共轭梯度方法

- ✓ 整合梯度知识
- ✓ 借助历史信息

最优化问题：基于最速下降法的局部优化

共轭梯度法：

$$\Delta(x_n, y_n) = G(x_n, y_n) + \lambda_n \Delta(x_{n-1}, y_{n-1})$$

搜索方向：当前梯度和上一步搜索方向及梯度的整合！

Fletcher-Reeves法：

$$\lambda_n = \frac{|\mathrm{G}(x_n, y_n)|^2}{|\mathrm{G}(x_{n-1}, y_{n-1})|^2}$$

第一步无历史信息，用最陡下降法！