计算物理学15春季

第五次作业解题报告

霍浩岩

July 6, 2015

1 Eigenvalue problem

1.1 一维无限深势阱

写出一维无限深势阱的薛定谔方程（无量纲化之后的方程）：

$$-\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\psi \tag{1.1}$$

再加上无限深势阱带来的边界条件:

$$\psi(0) = \psi(1) = 0 \tag{1.2}$$

这个方程的本征函数和本征值是:

$$\psi_n(x) = sin(n\pi x), n = 1, 2, \ldots \tag{1.3}$$

$$E_n = n^2\pi^2 \tag{1.4}$$

1.2 线性代数解法

设区间[0,1]被等分成N个区间，除了两端点之外，中间有$N-1$个节点$\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_{N-1}$。薛定谔方程变成离散化形式:

$$-\left(\frac{1}{N}\right)^2\begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{bmatrix} \tag{1.5}$$

或者可以说，其实就是求解矩阵

$$\mathbf{A} = -\left(\frac{1}{N}\right)^2\begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix} \tag{1.6}$$

的本征值和本征向量。

1.3 程序求解

使用MATLAB编写程序求解本征问题：

```
N = 5;
                    % for eigen problems, sparse matrix does not help!
A = full(spdiags(repmat([-1 2 -1], N-1, 1), [1 0 -1], N-1, N-1));
[Q, L] = eig(A);
```

此时，Q的所有列向量代表了归一化的本征函数，而L的对角元素乘$(-N^2)$就是对应的本征值。

1.4 和解析解的比较

在$N=5$时，矩阵求出的本征值为：

$$\lambda = 9.5492, 34.5492, 65.4508, 90.4508 \tag{1.7}$$

而真实的本征值前四个为：

$$\lambda = 9.8696, 39.4784, 88.8264, 157.9137 \tag{1.8}$$

再将本征矢画出来：

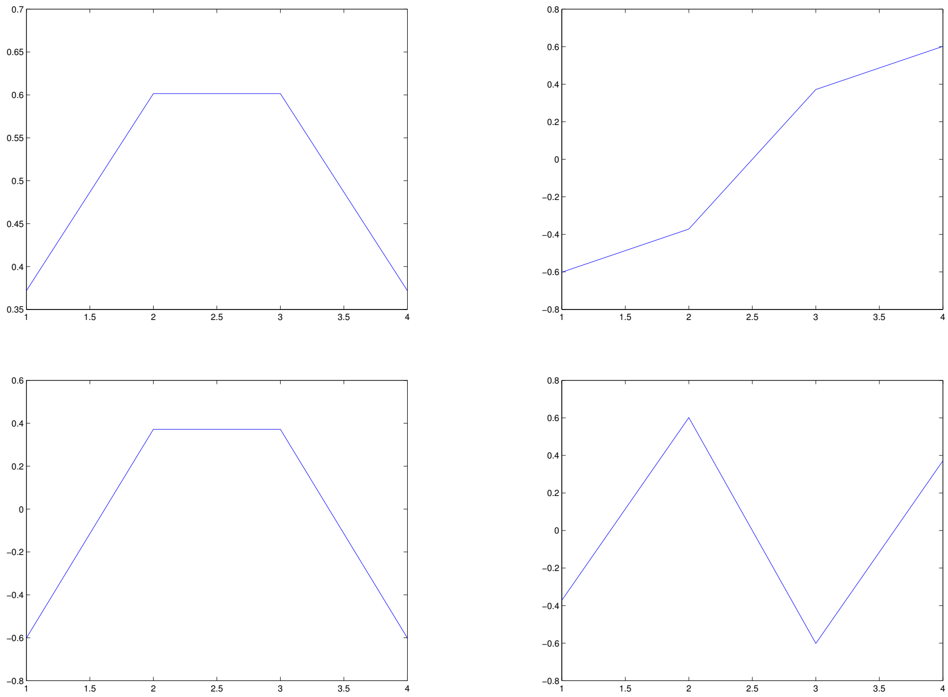


Figure 1.1: $N=5$的本征矢

完全不正确。试着将N变大，例如$N=100$，然后将求出的本征值和解析本征值画在一张图里：

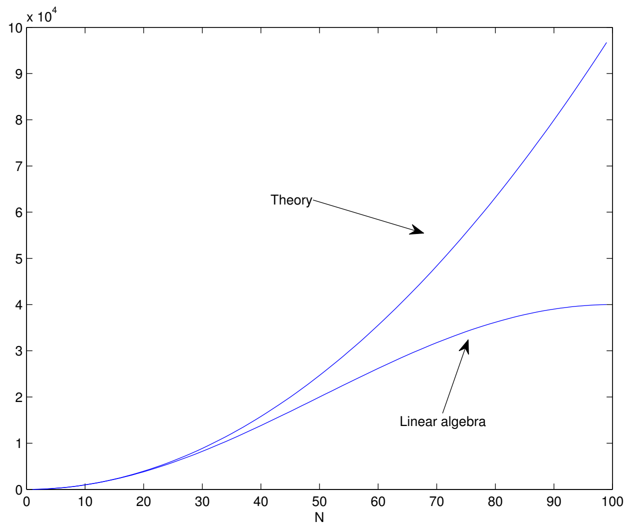
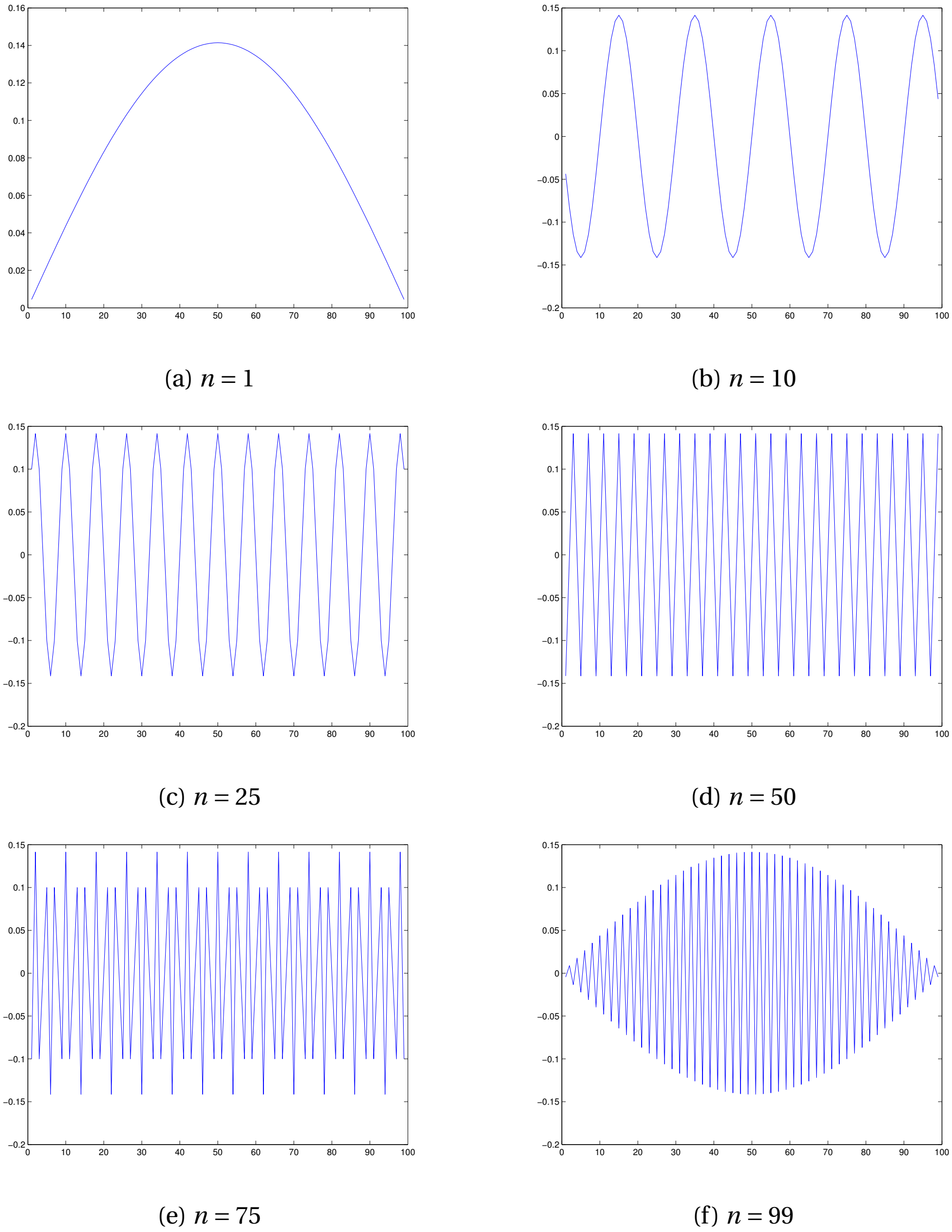


Figure 1.2: $N=100$的本征值理论值和线性代数方法比较

这个解的前面部分还是可以接受的，然而在后边的本征值却明显偏离了理论值，本来二次上升的本征值开始向下倾斜。
将$n = 1, 10, 25, 50, 75, 99$的本征矢绘于图中：



(a) $n = 1$ (b) $n = 10$ (c) $n = 25$ (d) $n = 50$ (e) $n = 75$ (f) $n = 99$

Figure 1.3: $N = 100$的本征矢

这里的问题在于，当n变大的时候，本征矢开始偏离解析解的$sin(n\pi x)$函数，正弦波的振幅出现“拍”的现象。对于这个问题，通过傅立叶分析可以得到一个比较形象的解释。

考虑$0 \le x \le 1$区间内的本征值问题，采用周期性边界条件，对方程做离散傅立叶变换，设区间被等分成N_x个小区间：

$$\sum_{i=1}^{N_x} e^{i\frac{2\pi}{N_x}k(i-1)} u(i) = f(k)$$

$$\sum_{i=1}^{N_x} e^{i\frac{2\pi}{N_x}k(i-1)} u(i-1) = e^{i\frac{2\pi}{N_x}k} f(k) \tag{1.9}$$

$$\sum_{i=1}^{N_x} e^{i\frac{2\pi}{N_x}k(i-1)} u(i+1) = e^{-i\frac{2\pi}{N_x}k} f(k)$$

因此，$-\frac{d^2u}{dx^2} = Eu$的傅立叶变换为

$$4N_x^2 sin^2(\frac{\pi}{N_x}k)f(k) = Ef(k) \tag{1.10}$$

通过1.10式，我们发现本征值是一个三角函数，最大值为4，这和上面的结果一致。对于更高的本征值，矩阵方法有自己本身的缺陷：我们可以理解为，区间离散化后丢失了高频率的信息。所以本征值问题的矩阵解法，它的结果在本征值较大时是不可信的，要想得到较高的本征值和相应的本征基矢，就必须提高细分程度，保留更多高频率的信息。

2 FINITE ELEMENT METHOD

作业一中的问题是：

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 1, 0 \leq x \leq 1$$
$$u(0) = u(1) = 1 \tag{2.1}$$

它的解析解为：

$$u(x) = -\frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}x + 1 \tag{2.2}$$

现在使用有限元算法求解，设

$$u(x) = v(x) + 1 \tag{2.3}$$

这样方程在边界上就都是零。选取三个hat函数：

$$\phi_1(x) = \begin{cases} 4x & \text{if } 0 \leq x \leq \frac{1}{4} \\ 2-4x & \text{if } \frac{1}{4} \leq x \leq \frac{1}{2} \end{cases}$$

$$\phi_2(x) = \begin{cases} -1+4x & \text{if } \frac{1}{4} \leq x \leq \frac{1}{2} \\ 3-4x & \text{if } \frac{1}{2} \leq x \leq \frac{3}{4} \end{cases} \tag{2.4}$$

$$\phi_3(x) = \begin{cases} -2+4x & \text{if } \frac{1}{2} \leq x \leq \frac{3}{4} \\ 4-4x & \text{if } \frac{3}{4} \leq x \leq 1 \end{cases}$$

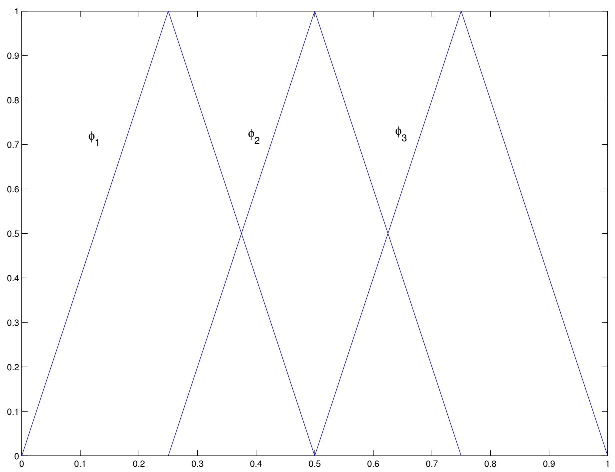


Figure 2.1: hat function

于是，$\mathbf{K}$的矩阵元$K_{ij}=\int_0^1 \frac{d\phi_1}{dx}\frac{d\phi_j}{dx}dx$为：

$$\mathbf{K}=\begin{bmatrix} 8 & -4 & 0 \\ -4 & 8 & -4 \\ 0 & -4 & 8 \end{bmatrix} \tag{2.5}$$

$\mathbf{F}$的矩阵元$F_{i1}=\int_0^1 f(x)\phi_i(x)dx=\int_0^1 \phi_i(x)dx$为

$$\mathbf{F}=\begin{bmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{bmatrix} \tag{2.6}$$

因此，$\mathbf{KU}=\mathbf{F}$解得：

$$\mathbf{U}=\begin{bmatrix} \frac{3}{32} \\ \frac{1}{8} \\ \frac{3}{32} \end{bmatrix} \tag{2.7}$$

将端点处的值代入$u(x)=\sum U_i\phi_i(x)+1$：

$$u(\frac{1}{4})=\frac{35}{32}, u(\frac{1}{2})=\frac{9}{8}, u(\frac{3}{4})=\frac{35}{32} \tag{2.8}$$

这与解析解在三个端点处给出的数值完全相等。