

计算物理导论 - Homework 5 : GP方程 & 最短路径

A. TSSP方法 & GP方程

使用时间分裂谱方法（time-splitting spectral, TSSP）求解一维的含时Gross-Pitaevskii方程

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) + \eta(\psi) \psi(x, t).$$

其中，势能项取谐振子势 $V(x) = \frac{1}{2}x^2$. 非线性项取 $\eta(\psi) = \frac{1}{2}|\psi|^2$. 波函数初始条件为

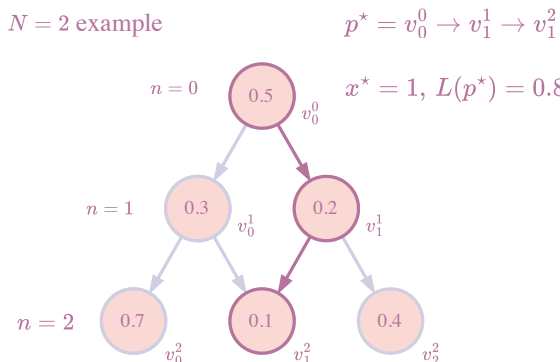
$$|\psi(x, 0)| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}.$$

- 写出TSSP方法的基本原理，包括如何分解哈密顿量以及怎么处理动能项和势能项。为了方便求解，你需要怎样的边界条件？对一维问题，TSSP方法的计算复杂度是多少？（1.5分）
- 选取时间范围 $t \in [0, 20]$ ，求解密度函数 $\rho(x, t) \equiv |\psi(x, t)|^2$ 随着时间的演化情况。画出 ρ 的热力图（横轴为 t ，纵轴为 x ）。你发现了什么？（1分）
- 画出同样时间中，波包宽度的演化情况。波包宽度定义为 $w(t) \equiv \langle x^2 \rangle(t)$. 你发现了什么？（1分）
- 结合GP方程的物理意义，定性解释上述现象。（1分）
- 你体会到TSSP方法有什么优势？（0.5分）

B. 堆上的最短路径

定义这样一个总共 N 层 ($N \in \mathbb{N}$) 的堆和其上的“最短路径”如图：

- 第 n 层拥有 $n + 1$ 个节点 v_i^n .
- 每个节点 v_i^n 指向 $n + 1$ 层的两个子节点 v_i^{n+1}, v_{i+1}^{n+1} .
- 每个点 v_i^n 上的取值是一个 $[0, 1]$ 上均匀分布的随机数.
- 从根节点 v_0^0 起，选择一条深度 n 递增的路径直到最底层 N 。路径的长度 $L(\text{path}) = \sum_{v \in \text{path}} v$.
- 最短路径为 $p^* = \text{argmin}[L(\text{path})]$ 。与此同时，记录下最短路径的终点横坐标 x^* .



- 随机生成这样一个堆。（1分）
- 找到最短路径 p^* 和终点横坐标 x^* . 呈现代码并阐述你所使用的算法以及其复杂度。（1.5分）
- 对不同的 N 生成大量不同的堆，计算 $w(N) = \sqrt{\langle [x^*(N)]^2 \rangle - \langle x^*(N) \rangle^2}$ 随着堆的高度 N 的变化规律，你发现了什么？（2分）
- 尝试解释你发现的规律（0.5分）