计算物理作业 2

谢昀城 22307110070

2024 年 9 月 20 日

1 题目 1：求方程的根

1.1 题目描述

Sketch the function$x^3 - 5x + 3 = 0$

1. Determine the two positive roots to 4 decimal places using the bisection method. Note: You first need to bracket each of the roots.
2. Take the two roots that you found in the previous question (accurate to 4 decimal places) and “polish them up” to 14 decimal places using the Newton-Raphson method.
3. Determine the two positive roots to 14 decimal places using the hybrid method.

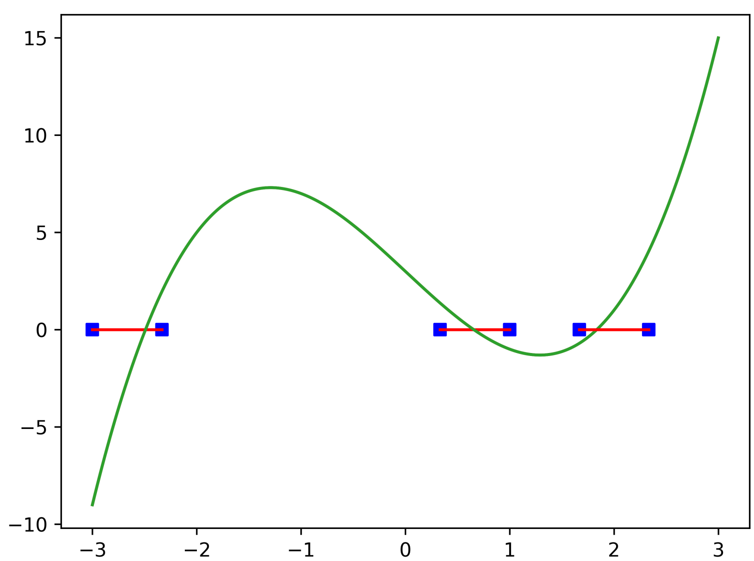


图 1: f(x)-x 图像。其中标出了由 $find\_bracket$ 函数找出的变号区域

1.2 程序描述

对于题目要求求解的方程，我们首先通过在一定范围内均匀采样 (一般采样 10 个点) 找到其变号区间，在程序中由 $find\_bracket$ 完成 (见图1)。对于 1.1 题，我们使用 $bisection\_method$ 函数接收其变号区间，并在区间内使用二分法逼近其中的根，直到误差在容差 10^{-4} 以下，这里根的误差使用二分区间大小 $|a-b|$ 估计。对于 1.2 和 1.3 题，由于 np.float64 类型浮点数的精度大约只有 16 位有效位数左右，因此我们使用 decimal 库实现 50 位有效数字的计算。我们在 $newton_raphson_method$ 和 $hybrid_method$ 函数中接收由 1.1 中得到的解，将其误差缩小至 $10^(-14)$ 以下，这里误差我们使用 $|f(x)/f'(x)|$ 估计。

本程序源文件为 findroot.py，在终端进入当前目录，使用命令 `python -u findroot.py` 运行本程序。运行时请保证 Python 第三方库 Numpy,Matplotlib,decimal 已安装。程序开发环境为 Python3.12.3，可在 Python3.8 以上版本中运行。

1.3 伪代码

1.3.1 bisection method 伪代码:

Algorithm 1 FindBracket

function FINDBRACKET($f, rg, n, ifplot$)
- **INPUT:** f (function), rg (range), n (number of points), $ifplot$ (boolean)
- **OUTPUT:** $bracket$ (list of tuples)
- $x \leftarrow \text{linspace}(rg[0], rg[1], n)$
- $y \leftarrow f(x)$
- $yRoll \leftarrow roll(y, 1)$
- $yCov \leftarrow y[1:] * yRoll[1:]$
- $cr0 \leftarrow where(yCov < 0)$ ▷ Convolve 2 series to find the cross point
- $bracket \leftarrow [(x[i], x[i+1])$ for i in $cr0[0]]$
- **return** $bracket$

end function

1.3.2 bisection method 伪代码:

Algorithm 2 BisectionMethod

function BISECTIONMETHOD($f, rg, tol, maxIter$)
- **INPUT:** f (function), rg (range), tol (tolerance), $maxIter$ (maximum iterations)
- **OUTPUT:** $(root, error)$ (root of the function and the error)
- $a, b \leftarrow rg$
- **if** $f(a) * f(b) \geq 0$ **then**
  - **Raise** ValueError(”Function does not change sign in the interval.”)
- **end if**
- **for** $i \leftarrow 0$ **To** $maxIter - 1$ **do**
  - $c \leftarrow (a+b)/2$
  - **if** $|b-a| < tol$ **then** ▷ Convergence condition, using $|a-b|$ as the error
    - **print the root and Break**
  - **else if** $f(c) * f(a) < 0$ **then**

$b \leftarrow c$

else

$a \leftarrow c$

end if

end for

return $(a+b)/2, |b-a|$

end function

1.3.3 Newton-Raphson method 伪代码:

Algorithm 3 NewtonRaphsonMethod

function NEWTONRAPHSONMETHOD($fDecimal$, $dfDecimal$, $x0$, tol, $maxIter$)

INPUT: $fDecimal$ (function), $dfDecimal$ (function), $x0$ (initial point), tol (tolerance), $maxIter$ (maximum iteration)

OUTPUT: x (root), $error$ (absolute error)

$x \leftarrow$ Decimal($x0$) ▷ Convert $x0$ to decimal type

$tol \leftarrow$ Decimal(tol) ▷ Convert tol to decimal type

for $i \leftarrow 1$ **To** $maxIter$ **do**

$fx \leftarrow fDecimal(x)$

$dfx \leftarrow dfDecimal(x)$

if $dfx = 0$ **then**

Raise ValueError("Meet zero derivative at", x)

end if

$dx \leftarrow fx/dfx$

if $|dx| < tol$ **then**

print the root and Break

end if

$x \leftarrow x - dx$

end for

return x, $|dx|$

end function

1.3.4 Hybrid method 伪代码:

Algorithm 4 HybridMethod

function HYBRIDMETHOD(f, df, rg, tol, $maxIter$)

INPUT: f (function), df (derivative of f), rg (range), tol (tolerance), $maxIter$ (maximum iteration)

OUTPUT: x (root), $error$ (absolute error)

$a, b \leftarrow$ Decimal(rg) ▷ Convert range to decimal type

$eps \leftarrow 10^{5-\text{environment precision}}$

$x \leftarrow (a+b)/2$

if $f(a) * f(b) \geq 0$ **then**

Raise ValueError("Function does not change sign in the interval.")

end if
for $i \leftarrow 1$ **To** $maxIter$ **do**
$dfx \leftarrow df(x)$
$fx \leftarrow f(x)$
if $|dfx| < eps$ **then** ▷ If derivative is too small, use bisection method
$x \leftarrow (a+b)/2$
$dx \leftarrow |b-a|$
else
$dx \leftarrow fx/dfx$
$x \leftarrow x - dx$
end if
if $|dx| < tol$ **then**
print the root and Break
end if
end for
return x, $|dx|$
end function

1.4 输入输出实例

对于本程序，运行后会生成图1为"f(x) with bracket.png" 于当前目录下，并输出使用不同方法求得的根。表 1 为不同方法求得的根及其误差，图2为程序运行截图，可以看到 $NewtonRaphson$ 方法和混合方法均可以在很少的迭代次数内将根逼近到很高的精度。

Method	Root1	Error1	Root11	Root2
Bisection	0.656619	5.1e-06	1.834241	5.1e-06
Newton-Raphson	0.656620431047110366142231	1.2e-24	1.83424318431392171711564	1.8e-23
Hybrid	0.656620431047110366	1.4e-18	1.83424318431392171711562613	1.3e-26

表 1: 问题 1 的结果实例

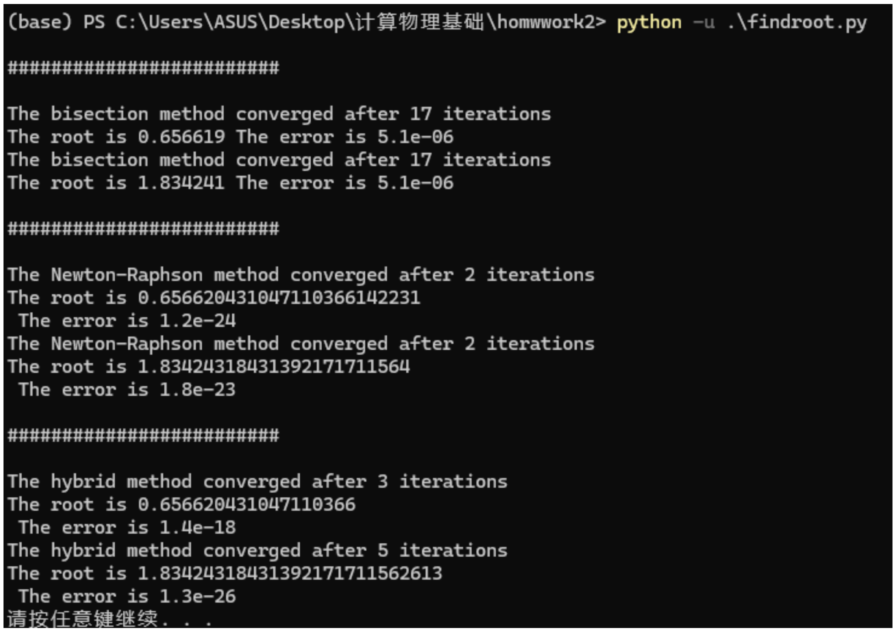
2 题目 2：求函数极小值

2.1 题目描述

Search for the minimum of the function $g(x,y) = sin(x+y) + cos(x+2y)$ in the whole space.

2.2 程序描述

在本程序中，我们使用梯度下降方法来搜索 g(x,y) 的极小值点，其在函数 $gradiant\_descent$ 中实现, 并且，为了防止在某些位置梯度消失而导致停留在函数的鞍点上，每次下降会加上一个小的高斯噪声。



```
(base) PS C:\Users\ASUS\Desktop\计算物理基础\homwork2> python -u .\findroot.py

#########################

The bisection method converged after 17 iterations
The root is 0.656619 The error is 5.1e-06
The bisection method converged after 17 iterations
The root is 1.834241 The error is 5.1e-06

#########################

The Newton-Raphson method converged after 2 iterations
The root is 0.656620431047110366142231
 The error is 1.2e-24
The Newton-Raphson method converged after 2 iterations
The root is 1.83424318431392171711564
 The error is 1.8e-23

#########################

The hybrid method converged after 3 iterations
The root is 0.656620431047110366
 The error is 1.4e-18
The hybrid method converged after 5 iterations
The root is 1.83424318431392171711562613
 The error is 1.3e-26
请按任意键继续. . .
```

图 2: 题目 1 运行结果

由于 $sin(x)$ 和 $cos(x)$ 的周期性，$g(x, y)$ 实际上有无数多个极值点，只需满足 $x_1 + y_1 = 2m\pi, x_2 + 2y_2 = 2n\pi, (m, n) \in \mathbb{Z}$。并且，由于:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2, -1 \\ -1, 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x+y \\ x+2y \end{pmatrix}$$

故只需要在图3(a) 红线所围成的元胞中找到一个极小值点 x_0, y_0 即可，其余极小值点由 $x_m = x_0 + 2m\pi, y_n = y_0 + 2n\pi, (m, n) \in \mathbb{Z}$ 给出。

本程序源文件为 findmin.py，在终端进入当前目录，使用命令 python -u findmin.py 运行本程序。运行时请保证 Python 第三方库 Numpy,Matplotlib 已安装。程序开发环境为 Python3.12.3，可在 Python3.8 以上版本中运行。

2.3 伪代码

梯度下降法伪代码:

Algorithm 5 GradiantDescent

function GRADIANTDESCENT($X0, g, dg, ap, tol, maxIter$)

  INPUT: $X0$ (initial guess), g (function), dg (gradient of g), ap (learning rate), tol (tolerance), $maxIter$ (maximum iterations)

  OUTPUT: X (final point), his (history of points)

  $X \leftarrow$ array($X0$) ▷ Initialize X with $X0$ as a float array

  $his \leftarrow []$ ▷ Initialize empty history list

  for $i \leftarrow 1$ **To** $maxIter$ **do**

    $dX \leftarrow \nabla dg(X)$ ▷ Calculate the gradient at current X

    $X \leftarrow X - ap \times dX+$ randomNormal(0, tol) ▷ Update X with learning rate and noise

    $his \leftarrow$ append(his, copy(X)) ▷ Store the current X in history

    if $||dX||) < tol$ **then**

      Break

end if
end for
return X, his
end function

2.4 输入输出实例

对于本程序，运行后会生成图3为”find g(x,y) min.png” 于当前目录下，并输出使用梯度下降法找到的极小值点。图4为程序运行截图, 得到极小值为-2.00000, 极小值点为

$$Xmin = 0.00000 + 2m\pi, Y_min = -1.57079 + 2n\pi, (m, n) \in \mathbb{Z}$$

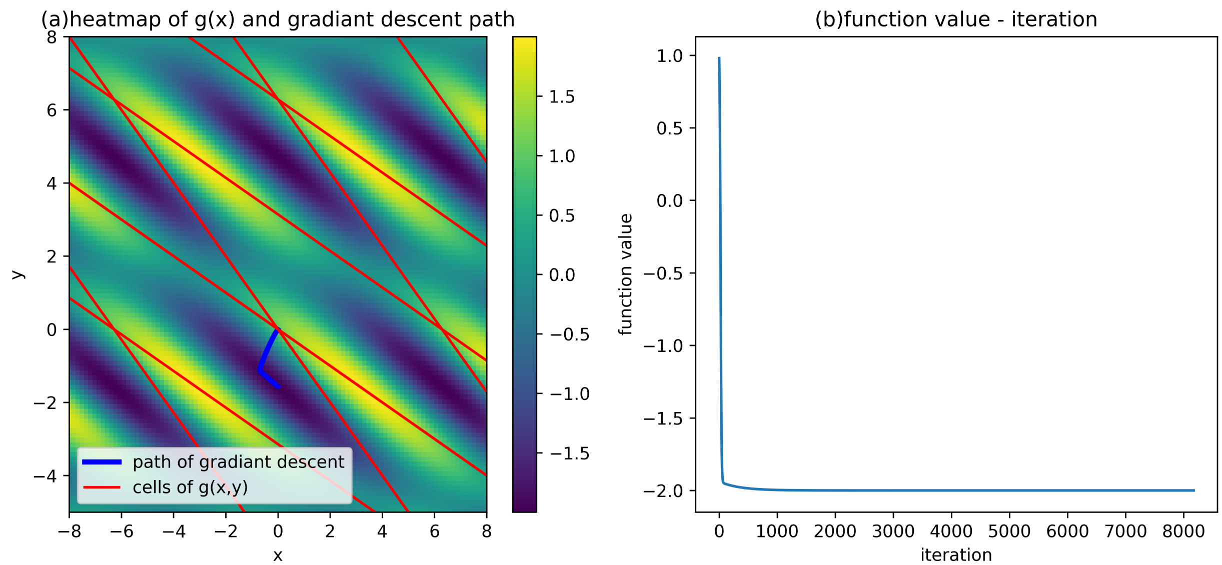


图 3: 题目 2 (a)g(x,y) 的热力图，用红线标注了其单元，蓝线为梯度下降路径。(b) 函数值随迭代次数的变化

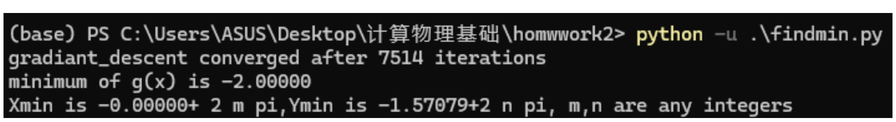


图 4: 题目 2 程序运行截图

3 题目 3

3.1 题目描述

Electron in the finite square-well potential is, ($V_0 = 10eV, a = 0.2nm$)

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{if } x \le -a, \textbf{Region I} \\ 0, & \text{if } -a < x < a, \textbf{Region II} \\ V_0, & \text{if } x \ge a, \textbf{Region III} \end{cases}$$

Find the three lowest eigen states (both energies and wavefunctions).

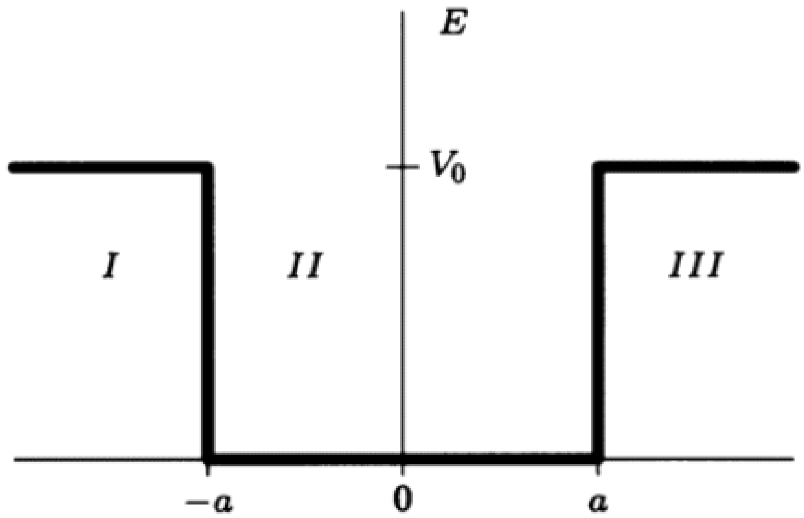


图 5: 题目 3 方势阱示意图

3.2 程序描述

在本程序中，我们通过求解奇、偶宇称的波函数的边界条件方程:$f_{odd} = \alpha sin\alpha a + \beta cos\alpha a = 0$ 和 $f_{even} = \alpha sin\alpha a + \beta cos\alpha = 0$, 其中 $\alpha = \sqrt{2mE}/\hbar^2, \beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, 得到波函数的三个能量最小的束缚态 (由图6可看出事实上只存在 3 个束缚态)。

对 f_{even} 和 f_{odd} 的求根使用在题目 1 中实现的 *bisection_method* 实现，并重新计算出 A,B,C,D 系数得到波函数。接着对波函数的平方进行积分，将波函数归一化。积分在 $int_Trapezoidal$ 中使用梯形法实现，即 $N_e = h(1/2\rho_0 + rho_1 + ... + \rho_{N-1} + 1/2\rho_N)$, 其中 $h = \frac{b-a}{N}, a, b$ 为上下界，N 为采样点数。由于 $|x| > a$ 波函数为指数下降，因此我们对波函数在 $|x| > 50a$ 处截断。

为了降低数值误差，本程序中能量单位采用 eV, 长度单位采用 nm, 并定义常数 $k = \frac{2m_e}{\hbar^2} = 26.24684351 nm^{-1} \cdot eV^{-1}$

本程序源文件为 solvesqurepotential.py，在终端进入当前目录，使用命令 python -u solvesqurepotential.py 运行本程序。运行时请保证此程序与题目 1 程序 findroot.py 在同一文件夹下，且 Python 第三方库 Numpy,Matplotlib 已安装。程序开发环境为 Python3.12.3，可在 Python3.8 以上版本中运行。

3.3 伪代码

3.3.1 Trapezoidal integrate 伪代码:

Algorithm 6 IntTrapezoidal

function $\text{INTTRAPEZOIDAL}(f, a, b, n)$

INPUT: f (function), a (lower limit), b (upper limit), n (number of points)

OUTPUT: $intfx$ (integration result)

$x \leftarrow \text{linspace}(a, b, n+1)$ ▷ Generate $n+1$ points between a and b

$intfx \leftarrow \left(\sum_{i=0}^{n} f(x[i]) - \frac{1}{2}f(x[0]) - \frac{1}{2}f(x[n])\right) \cdot \frac{b-a}{n}$

return $intfx$

end function

Algorithm 7 Calculate the wave function

$Ei, erri \leftarrow \text{BisectionMethod}(fEven/odd, bracketEven/odd[0])$

$F \leftarrow 1$

if Even Wave Fucntion **then**

$A \leftarrow 0$,$C \leftarrow F$,$B \leftarrow Fe^{-\beta a}/cos(\alpha a)$

else if Odd Wave Function **then**

$B \leftarrow F$,$C \leftarrow -F$

$A \leftarrow Fe^{-\beta a}/sin(\alpha a)$ ▷ Calculate A,B,C,F

end if

$norm \leftarrow \text{IntTrapezoidal}(f, -10a, 10a, 1000)$ $A, B, C, F \leftarrow (A, B, C, F)/norm$ ▷ Normalize the wave function

Plot and Output the wave function

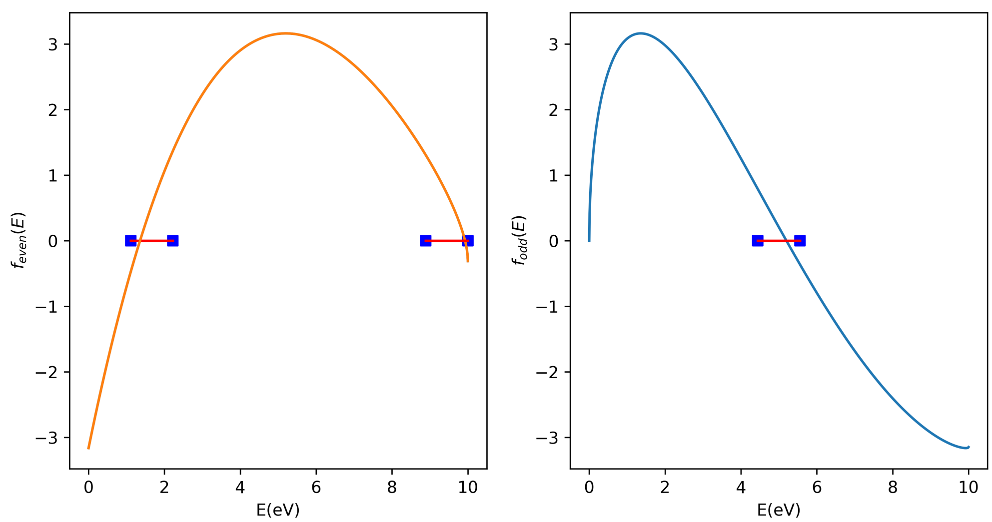


图 6: f_{odd} 和 f_{even} 根位置示意图

3.4 输入输出实例

对于本程序，运行后会生成图6为"f_even and f_odd.png" 和图7为"wavefunction.png" 于当前目录下，并输出三个束缚态的能量和波函数表达式。图8为程序运行截图。程序得到束缚态能量为 $E_0 = 1.35689eV, E_1 = 5.19897eV, E_2 = 9.92541eV$，波函数表达式分别为 ($x$ 单位为 nm)

$$\psi_0(x) = \begin{cases} 14.51282\, e^{-15.06168\, x}, & x > a \\ 14.51282\, e^{15.06168\, x}, & x < -a \\ 1.93748\, \cos(5.96776\, x), & -a \le x \le a \end{cases}$$

$$\psi_1(x) = \begin{cases} 12.66141\, e^{-11.22550\, x}, & x > a \\ -12.66141\, e^{11.22550\, x}, & x < -a \\ 1.85990\, \sin(11.68146\, x), & -a \le x \le a \end{cases}$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} 1.37808\, e^{-1.39923\, x}, & x > a \\ 1.37808\, e^{1.39923\, x}, & x < -a \\ -1.04560\, \cos(16.14034\, x), & -a \le x \le a \end{cases}$$

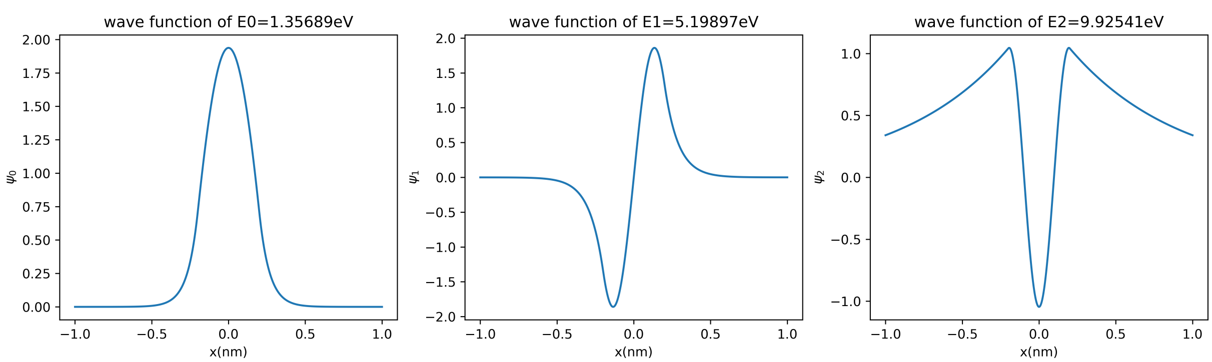


图 7: 不同能量的波函数图像

```
(base) PS C:\Users\ASUS\Desktop\计算物理基础\hw2\homework2> python -u .\solvesqurepotential.py
The bisection method converged after 27 iterations
The root is 1.356892449 The error is 8.3e-09
The bisection method converged after 27 iterations
The root is 5.198969555 The error is 8.3e-09
The bisection method converged after 27 iterations
The root is 9.925406256 The error is 8.3e-09

wave function of E0=1.35689eV:
14.51282 Exp(-15.06168*x) for x>a
14.51282 Exp(15.06168*x) for x<-a
1.93748 cos(5.96776*x) for -a<x<a

wave function of E0=5.19897eV:
12.66141 Exp(-11.22550*x) for x>a
-12.66141 Exp(11.22550*x) for x<-a
1.85990 sin(11.68146*x) for -a<x<a

wave function of E0=9.92541eV:
1.37808 Exp(-1.39923*x) for x>a
1.37808 Exp(1.39923*x) for x<-a
-1.04560 cos(16.14034*x) for -a<x<a
```

图 8: 题目 3 程序运行截图