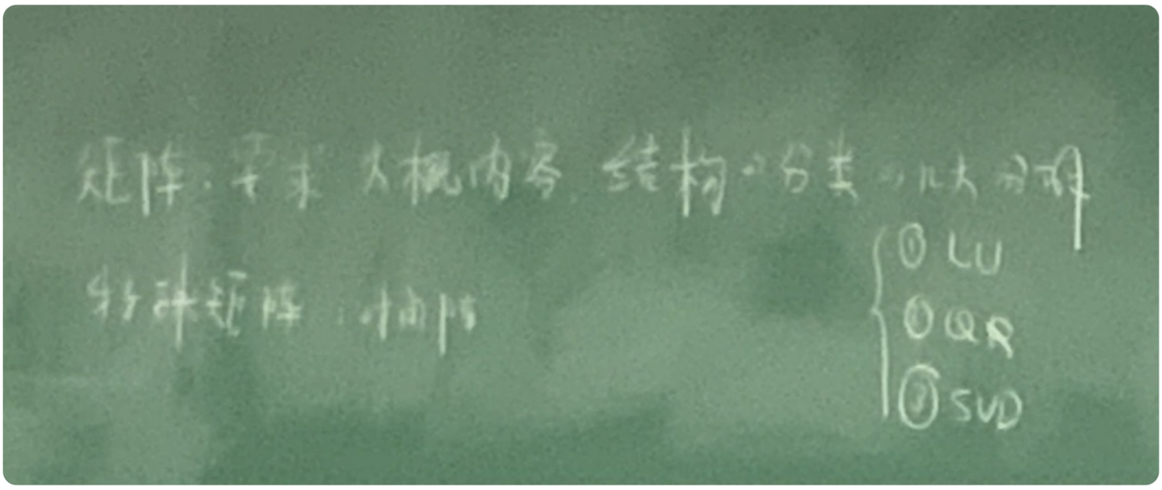
Review



技巧 Mathematica 简单

$$\begin{cases} H = -\xi\sigma, \quad \sigma = \pm 1. \\ \xi \text{ 无序 } \int P(\xi)\,d\xi = 1. \\ Z = e^{-\beta\xi} + e^{\beta\xi} = e^{-\beta F} \\ \Longleftrightarrow \quad F(\xi) = \frac{1}{\beta}\ln\left(e^{-\beta\xi} + e^{\beta\xi}\right) \end{cases}$$

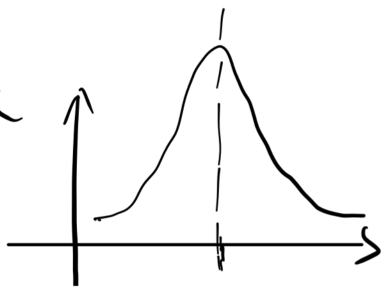
$$I = \int \ln(e^{-x} + e^{x})\, e^{-\alpha x^2}\, dx$$ ，求积分.

$$= \int f(x)\,dx$$

数值求解.

NIntegrate.

f(x)的图像

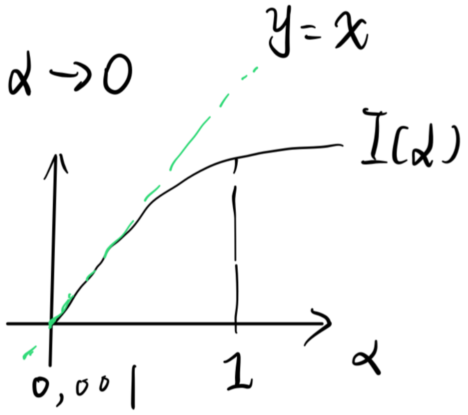


局域在0附近

$$I \simeq \int \ln(1+1)\, e^{-\alpha x^2} dx = \ln 2 \int e^{-\alpha x^2} dx$$

$$= \ln 2 \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2}$$

↑ 一个近似的解析表达式.



猜测

$$f(\alpha) = \beta_0 + \beta_1 \alpha + \beta_2 \alpha^2 + \cdots$$

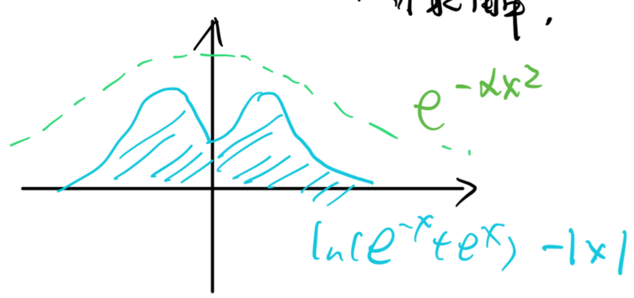
$$\begin{cases} \beta_1 = 1 \\ \beta_0 = \left(\frac{\pi^2}{12}\right) \end{cases}$$

$\alpha \to 0$ $\begin{cases} \text{如何解析计算.} \\ \text{Mathematical 辅助.} \end{cases}$

$$I(\alpha) = \int dx \left(\ln(e^{-x}+e^{x}) - |x|\right) e^{-\alpha x^2} + \int dx\, |x|\, e^{-\alpha x^2}$$

$$= I_1(\alpha) + I_2(\alpha)$$

↑ 可求解.



$\alpha \to 0 \Rightarrow I_1(\alpha) \simeq 2\int_0^{+\infty} \left[\ln(e^{x}+e^{-x}) - x\right] dx$

$$= 2\int_0^{+\infty} \left\{\ln\left[e^{x}(1+e^{-2x})\right] - x\right\} dx$$

⇐ x 很小时

$$\simeq 2\int_0^{+\infty} \ln(1+e^{-2x})\, dx$$

$$\ln(1+x)=\sum_{n=1}(-1)^{n-1}\frac{x^n}{n}$$

$$=2\int_0^{+\infty}\sum(-1)^{n-1}\frac{e^{-2nx}}{n}dx$$

$$=2\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{(-1)^{n-1}}{n}\int_0^{+\infty}e^{-2nx}dx=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n}\frac{1}{2n}$$

$$=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n^2}=\frac{\pi^2}{12}$$

高阶

$$\int_0^{+\infty}\ln(1+e^{-2x})e^{-\alpha x^2}dx$$

$$=\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{(-1)^{n-1}}{n}\int_0^{+\infty}e^{-2nx}\left(1-\alpha x^2+\frac{\alpha^2}{2}x^4+\cdots\right)dx$$

$$\int_0^{+\infty}e^{-\alpha x^2}x^n dx=\left(\frac{\alpha^{n-1}}{n!}\right)$$

总结：① 数值拟合
② 猜测
③ 极限下讨论

物理 = 数学 + 模型 + 近似

矩阵：三对角阵. $\begin{cases} O(N^2), & \text{计算时间} \\ O(N), & \text{内存} \end{cases}$

Lanczos 方法 $H \to$ 三对角矩阵.

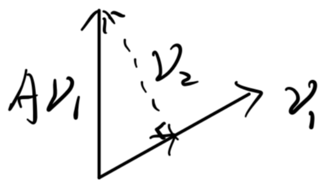
求 H 的本征值., $A_{n\times n}$, n 那级式

表示矩阵的方式。$\begin{cases} A u_n = \lambda_n u_n & \text{，数学} \\ A|u_n\rangle = \lambda_n |u_n\rangle & \text{，量子力学} \end{cases}$

Lanczos Methods.

选取一个矢量 v_1

$$A v_1 = \alpha_1 v_1 + \beta_1 v_2$$



$$\begin{cases} v_1^+ \cdot v_2 = 0 \\ v_1 \cdot v_1 = 1 \\ v_2 \cdot v_2 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} v_1^+ A v_1 = \alpha_1 \\ v_2^+ A v_1 = \beta \end{cases}$$

$$A v_2 = \gamma_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \beta_2 v_3$$

$$A v_n = \gamma_{n-1} v_{n-1} + \alpha_n v_n + \beta_n v_{n+1}$$

$\forall\, n \geq 2$，只和 v_{n-1}, v_n 正交，从而产生一个新的矢量 v_{n+1}。

类比

$HX = EX$	$\gamma_{n-1} v_{n-1} + \alpha_n v_n + \beta_n v_{n+1} = A v_n$
$\sum_j H_{ij} X_j = E X_i$	$X_i \to v_i$

$$\Rightarrow \quad A = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \gamma_{n-1} & \alpha_n & \beta_n & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

只需要存下 $\{\gamma_{n-1}, \alpha_n, \beta_n\}$ 即可。（只关心矩阵的谱）

求 H 的本征值. or 微分方程的本征值. 目标 (求任意 $V(x,y)$ 的方程)

e.g. $\left\{-\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi(x)=E\psi(x)$

① 离散化.

$\psi(x) \Rightarrow \psi_i=\psi(x_i)$

数值计算第一步

$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$. $\Leftarrow$ 对方程无量纲化

$x=\check{x}a$ a 长度量纲.

$\left[-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{\partial^2}{\partial \check{x}^2}+V(\check{x})\right]\psi(\check{x})=E\psi(\check{x})$

$E=\check{E}\frac{\hbar^2}{ma^2}$. 可以这样选取, 但不唯一.

$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \check{x}^2}+\check{V}(\check{x})\right]\psi(\check{x})=\check{E}\psi(\check{x})$ $\Leftarrow$ 无量纲后的方程.

$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x_i)=\lim_{h\to 0}\frac{\psi(x_i+h)-\psi(x_i)}{h}$

$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x_i)=\lim_{h\to 0}\frac{\psi(x_i+h)+\psi(x_i-h)-2\psi(x_i)}{h^2}$

$\Rightarrow \left[-\frac{1}{h^2}(\psi_{i+1}+\psi_{i-1}-2\psi_i)+\check{V}(x_i)\psi_i\right]=\check{E}\psi_i$

$h\to 0$. 动能变成了无穷大的数.

如何理解?

Actually, 解是收敛的.