2.2. Волновое уравнение

Схема «крест» для волнового уравнения.

Рассмотрим задачу о колебаниях струны в довольно общей постановке:

$$\begin{cases} u_{tt} = a^2 u_{xx} + f(x,\, t), & 0 < t, \quad 0 < x < l, \\ \alpha_L\, u(0,\, t) - \beta_L\, u_x(0,\, t) = \mu_L(t), & |\alpha_L| + |\beta_L| > 0, \\ \alpha_R\, u(l,\, t) + \beta_R\, u_x(l,\, t) = \mu_R(t), & |\alpha_R| + |\beta_R| > 0, \\ u(x,\, 0) = \varphi(x), & \\ u_t(x,\, 0) = \psi(x). & \end{cases} \tag{2.18}$$

Схема «крест» для численного решения задачи имеет следующий вид:

$$\frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{\tau^2} = a^2\, \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(x_j,\, t^n). \tag{2.19}$$

Схема имеет второй порядок аппроксимации по времени и координате $O(h^2) + O(\tau^2)$ и устойчива при выполнении условия Куранта

$$\tau \le \frac{h}{a}. \tag{2.20}$$

Схема является трехслойной, поэтому для начала счета необходимо определить два первых временных слоя u_j^0 и u_j^1. Для этого нам как раз потребуются оба начальных условия. Очевидно, следует выбрать $u_j^0 = \varphi(x_j)$. Для первого слоя легко сообразить формулу:

$$u_j^1 = u(x_j,\, 0) + \tau u_t(x_j,\, 0) = \varphi(x_j) + \tau\psi(x_j), \tag{2.21}$$

но она имеет только первый порядок аппроксимации. Разложим функцию $u(x,\, t)$ в ряд Тейлора до следующего слагаемого и получим аппроксимацию со вторым порядком:

$$\begin{gathered} u(x_j,\, \tau) \approx u(x_j,\, 0) + \tau\, u_t(x_j,\, 0) + \frac{\tau^2}{2}\, u_{tt}(x_j,\, 0), \\ u_j^1 = \varphi(x_j) + \tau\psi(x_j) + \frac{\tau^2}{2}\big(a^2\varphi''(x_j) + f(x_j, 0)\big). \end{gathered} \tag{2.22}$$

Схема (2.19) позволяет посчитать на новом $^{n+1}$ временном слое только внутренние точки. Для определения граничных точек необходимо воспользоваться граничными условиями. Угловые значения считаются после расчета значений во внутренних узлах сетки. Схема пересчета граничных условий с первым порядком аппроксимации:

$$\begin{aligned} \alpha_L\, u_0^{n+1} + \beta_L\, \frac{u_0^{n+1} - u_1^{n+1}}{h} \quad &= \mu_L\big(t^{n+1}\big), \\ \alpha_R\, u_N^{n+1} + \beta_R\, \frac{u_N^{n+1} - u_{N-1}^{n+1}}{h} \quad &= \mu_R\big(t^{n+1}\big). \end{aligned} \tag{2.23}$$

Для повышения порядка аппроксимации в угловых точках можно использовать численные производные со вторым порядком аппроксимации:

$$\begin{aligned} \alpha_L\, u_0^{n+1} + \beta_L\, \frac{3u_0^{n+1} - 4u_1^{n+1} + u_2^{n+1}}{2h} \quad &= \mu_L\big(t^{n+1}\big), \\ \alpha_R\, u_N^{n+1} + \beta_R\, \frac{3u_N^{n+1} - 4u_{N-1}^{n+1} + u_{N-2}^{n+1}}{2h} \quad &= \mu_R\big(t^{n+1}\big). \end{aligned} \tag{2.24}$$

Лабораторная работа.

Найти приближенное решение смешанной краевой задачи для неоднородного волнового уравнения на отрезке $0 \le x \le 1$. Для расчета решения использовать явную схему «крест». Предусмотреть возможность произвольного задания шага по координате x (шаг h) и времени t (шаг τ). По умолчанию расчет проводится до момента времени $T = 1$. Для получения решения использовать начальные и граничные условия первого и второго порядка точности. Для сравнения приведено точное решение $u_0(x,t)$. Проверить порядок аппроксимации схемы типа «крест».

Провести численное моделирование колебаний струны. Длина струны l, линейная плотность ρ и сила натяжения T заданы.

2.21. Струна закреплена с двух концов. Начальный профиль струны $u(x,\,0) = A\sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right)$, то есть совпадает с одной из собственных функций колебаний струны.

2.22. Правый конец струны закреплен, а на левый конец воздействует периодическая сила $F(t) = F_0\sin\omega t$. Продемонстрировать явление резонанса.

2.23. Правый конец струны свободен, а на левый конец воздействует периодическая сила $F(t) = F_0\sin\omega t$. Продемонстрировать явление резонанса.

2.24. Правый конец струны закреплен через пружину с жесткостью k, а на левый конец воздействует периодическая сила $F(t) = F_0\sin\omega t$. Подобрать резонансную частоту.

2.25. Струна закреплена с двух концов. По струне равномерно распределен заряд q. Струну вносят в однородное периодическое электрическое поле с напряженностью $E(t) = E_0\sin\omega t$. Продемонстрировать явление резонанса.

2.26. Концы струны закреплены. По левой части струны равномерно распределен положительный заряд q, а по правой — отрицательный $-q$. Струну вносят в электрическое поле с напряженностью $E(t) = E_0 \sin \omega t$. Продемонстрировать явление резонанса.

2.27. Концы струны закреплены. В точке x_0 подвешен шарик массы m. В начальный момент времени шарику придают импульс I.

2.28. Концы струны закреплены. В точке x_0 подвешен шарик массы m с зарядом q. Струну вносят в однородное периодическое электрическое поле с напряженностью $E(t) = E_0 \sin \omega t$. Подобрать резонансную частоту. Что будет, если поместить шарик в узел стоячей волны? *Hint: поставить задачу без δ-функции.*

2.29. В точке x_0 подвешен шарик массы m. Правый конец струны закреплен, а на левый конец воздействует периодическая сила $F(t) = F_0 \sin \omega t$. Подобрать резонансную частоту. Что будет, если поместить шарик в узел стоячей волны? *Hint: поставить задачу без δ-функции.*

В следующих задачах путем численного моделирования исследовать распространение и отражение волн для одномерного волнового уравнения. Уединенные волны создаются путем задания отклонения на одном из концов струны.

$$\mu(t) = A\,\eta(t_0 - t)\sin^3 \frac{\pi t}{t_0}, \qquad \eta(x) \text{ — функция Хевисайда.} \tag{2.25}$$

2.30. Правый конец струны закреплен, левый конец струны отклоняют для создания уединенной волны (2.25). Смоделировать отражение волны от закрепленного конца струны.

2.31. Правый конец струны свободен, левый конец струны отклоняют для создания уединенной волны (2.25). Смоделировать отражение волны от свободного конца струны.

2.32. Правый конец струны закреплен через пружину с жесткостью k, левый конец струны отклоняют для создания уединенной волны (2.25). Смоделировать отражение волны от правого конца струны.

2.33. Задача 2.30, но на струну действует сила тяжести. В начальный момент времени струна находится в равновесии.

2.34. Правый и левый концы струны отклоняют по законам $\mu_L(t)$ и $\mu_R(t)$ для создания уединенных волн (2.25). Смоделировать взаимодействие двух волн.

2.35. Имеется неоднородная по плотности струна, левая и правая части которой имеют плотности ρ_L и ρ_R соответственно. Правый конец струны закреплен, левый конец струны отклоняют для создания уединенной волны (2.25). Смоделировать прохождение/отражение волны при прохождении неоднородности.

2.36. В точке x_0 струны подвешен шарик массы m. Правый конец струны закреплен, левый конец струны отклоняют для создания уединенной волны (2.25). Смоделировать прохождение/отражение волны при взаимодействии с точечной массой. *Hint: поставить задачу без δ-функции.*

2.37. Решить задачу 2.36 при условии, что на струну действует сила тяжести. В начальный момент времени струна находится в равновесии. Стационарная подзадача решается численно.

2.3. Уравнения параболического типа

Уравнение диффузии/теплопроводности.

Рассмотрим задачу о теплопроводности в довольно общей постановке:

$$\begin{cases} u_t = ku_{xx} + f(x,\, t), & 0 < t, \quad 0 < x < l, \\ \alpha_L\, u(0,\, t) - \beta_L\, u_x(0,\, t) = \mu_L(t), & |\alpha_L| + |\beta_L| > 0, \\ \alpha_R\, u(l,\, t) + \beta_R\, u_x(l,\, t) = \mu_R(t), & |\alpha_R| + |\beta_R| > 0, \\ u(x,\, 0) = \varphi(x). \end{cases} \tag{2.26}$$

Выпишем разностную схему, которая первой приходит в голову:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = k\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f\Big(x_j,\, t^{n+\frac{1}{2}}\Big). \tag{2.27}$$

Схема является явной, то есть позволяет пересчитать значения во внутренних узлах u_j^{n+1} на новом временном слое по явной формуле. Схема имеет первый порядок аппроксимации по времени и второй по координате $O(\tau) + O(h^2)$. Схема устойчива при выполнении условия:

$$\tau \le \frac{h^2}{2k}. \tag{2.28}$$

Данное условие является более жёстким по сравнению с условием Куранта для уравнений гиперболического типа ($\tau \le h/a$). Пусть для повышения точности расчета требуется уменьшить шаг h в 10 раз, тогда для сохранения устойчивости временной шаг потребуется уменьшить в 100 раз, а значит придется выполнить в 100 раз больше временных шагов до достижения заданного времени.

При использовании явной схемы граничные условия учитываются после расчета значений во внутренних узлах. Поскольку схема имеет первый порядок, ограничимся формулами первого порядка для угловых точек:

$$\begin{aligned} \alpha_L\, u_0^{n+1} + \beta_L\, \frac{u_0^{n+1} - u_1^{n+1}}{h} \quad &= \mu_L\big(t^{n+1}\big), \\ \alpha_R\, u_N^{n+1} + \beta_R\, \frac{u_N^{n+1} - u_{N-1}^{n+1}}{h} \quad &= \mu_R\big(t^{n+1}\big). \end{aligned} \tag{2.29}$$

Если в уравнении (2.26) для аппроксимации производной u_{xx} использовать значения узлов на новом временном слое, то получится неявная схема для уравнения теплопроводности:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = k\frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f\Big(x_j,\, t^{n+\frac{1}{2}}\Big). \tag{2.30}$$

Для неявной схемы значения в узлах на новом временном слое не выражаются по явной формуле из значений u_j^n на предыдущем временном слое. Значения u_j^{n+1} связаны друг с другом посредством системы линейных уравнений с трёхдиагональной матрицей. Как известно, оптимальным способом решения СЛАУ с трёхдиагональной матрицей является метод прогонки.

Неявная схема для уравнения теплопроводности, как и предыдущая явная, имеет первый порядок аппроксимации по времени и второй по координате $O(\tau) + O(h^2)$. Важным преимуществом схемы является абсолютная устойчивость: схема является устойчивой при любом выборе шага интегрирования τ.

Если скрестить явную и неявную схемы с весовыми коэффициентами σ и $1-\sigma$, то мы получается схема Кранка–Николсон:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = (1-\sigma)k\frac{u_{j+1}^{n} - 2u_j^{n} + u_{j-1}^{n}}{h^2} + \sigma k\, \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} + f\Big(x_j,\, t^{n+\frac{1}{2}}\Big), \tag{2.31}$$

параметр $\sigma \in [0,\, 1]$. При $\sigma = 0$ получается явная схема, при $\sigma = 1$ — полностью неявная. При использовании симметричной схемы с $\sigma = \frac{1}{2}$ разностная схема имеет второй порядок аппроксимации по времени и координате $O(\tau^2) + O(h^2)$. Схема абсолютно устойчива при преобладании неявной части $\sigma \geq \frac{1}{2}$.

Добавим к неявной схеме граничные условия со вторым порядком аппроксимации:

$$\begin{aligned} \alpha_L\, u_0^{n+1} + \beta_L\, \frac{3u_0^{n+1} - 4u_1^{n+1} + u_2^{n+1}}{2h} \quad &= \mu_L\big(t^{n+1}\big), \\ \alpha_R\, u_N^{n+1} + \beta_R\, \frac{3u_N^{n+1} - 4u_{N-1}^{n+1} + u_{N-2}^{n+1}}{2h} \quad &= \mu_R\big(t^{n+1}\big). \end{aligned} \tag{2.32}$$

Угловые точки также включаются в СЛАУ. При использовании граничных условий высокого порядка, построенных по трём точкам, матрица СЛАУ теряет трехдиагональный вид, поскольку в этом случае первая и последняя строки матрицы содержат по 3 значения вместо двух. Перед выполнением прогонки предлагаю исключить лишние коэффициенты из матрицы методом Гаусса (эквивалентные преобразования расширенной матрицы). Проще это делать непосредственно в коде в общем виде, а не выписывать формулы на бумаге.

Лабораторная работа.

Найти приближенное решение смешанной краевой задачи для неоднородного уравнения теплопроводности на отрезке $0 \le x \le 1$. Для расчета решения использовать симметричную схему (схема Кранка—Николсон). Предусмотреть возможность произвольного задания шага по координате x (шаг h) и времени t (шаг τ). По умолчанию расчет проводится до момента времени $T = 1$. Для получения решения использовать граничные условия первого и второго порядка точности. Для сравнения приведено точное решение $u_0(x,t)$. Проверить порядок аппроксимации схемы.

Уравнение Шрёдингера.

Уравнение Шрёдингера также параболического типа. Оно отличается от уравнения теплопроводности только чисто мнимым «коэффициентом теплопроводности».

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x). \tag{2.33}$$

Явная конечно-разностная схема для эволюционного уравнения Шрёдингра является неустойчивой при любых условиях. Неявная схема Кранка–Николсон абсолютно устойчива при использовании весового коэффициента $\sigma \ge \frac{1}{2}$.

$$\begin{aligned}\frac{\psi_j^{n+1}-\psi_j^n}{\tau} &= i(1-\sigma)\left(\frac{\hbar}{2m}\frac{\psi_{j+1}^n-2\psi_j^n+\psi_{j-1}^n}{h^2} - \frac{V(x_j)}{\hbar}\psi_j^n\right)+\\ &+ i\sigma\left(\frac{\hbar}{2m}\frac{\psi_{j+1}^{n+1}-2\psi_j^{n+1}+\psi_{j-1}^{n+1}}{h^2} - \frac{V(x_j)}{\hbar}\psi_j^{n+1}\right), \qquad \sigma \ge \frac{1}{2}.\end{aligned} \tag{2.34}$$

Схема имеет второй порядок аппроксимации по времени и координате $O(\tau^2) + O(h^2)$.

Дополнительные задачи.

2.38. Два стержня с одинаковыми параметрами (плотность, теплоемкость, сечения и т. д.) совмещают друг с другом, а между ними вставляют теплоизоляцию (сосредоточенная теплоемкость C). Правый конец теплоизолируют, а левый конец нагревают постоянным тепловым потоком q. Рассчитать температуру в стержнях.

2.39. Решить задачу диффузии на бесконечной прямой.

$$\begin{cases} u_t = a^2 u_{xx}, \quad 0 < t, \quad x \in \mathbb{R}, \\ u(x,\,0) = u_1 + (u_2 - u_1)\,\eta(x), \end{cases} \qquad \eta(x) \text{ — функция Хевисайда.}$$

Точное решение задачи:

$$u_0(x,\,t) = \frac{u_1 + u_2}{2} + \frac{u_2 - u_1}{2}\,\mathrm{erf}\left(\frac{x}{a\sqrt{t}}\right).$$

<u>Указание</u>. Для численного моделирования следует использовать нерегулярную одномерную сетку. Узлы сетки в интересующем интервале $|x| < l$ следует распределить равномерно, а при значениях $|x| > l$ экспоненциально. Для генерации сетки подойдет отображение $x_j = l \cdot \sinh s_j$, где s_j — равномерная сетка на отрезке $|s| \le S$. Значения $|s| < 1$ почти равномерно отображаются в окрестность $(-l,\,l)$, значения $|s| > 1$ распределены экспоненциально.

В угловых точках сетки следует использовать граничные условия $u_x(\pm\infty,\,t) = 0$.

Аппроксимация производных на неструктрированных одномерных сетках:

$$f'_j \approx \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{h_{j+\frac{1}{2}} + h_{j-\frac{1}{2}}}, \qquad f''_j \approx 2\,\frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{h^2_{j+\frac{1}{2}} + h^2_{j-\frac{1}{2}}}, \tag{2.35}$$

где f_j — значения функции в узлах, $h_{j+\frac{1}{2}} = x_{j+1} - x_j$ — длина отрезка.

2.40. Смоделировать функцию Грина для уравнения теплопроводности на полупрямой с граничным условием первого рода на левой границе.

$$\begin{cases} G_t = a^2 G_{xx}, \qquad 0 < t, \quad 0 < x, \\ G(0,\,t) = 0, \quad \lim\limits_{x\to\infty} G_x(x,\,t) = 0, \\ G(x,\,0) = \delta(x - \tilde{x}). \end{cases} \tag{2.36}$$

Использовать равномерную сетку на интервале $[0,\,2\tilde{x}]$ и неравномерную для значений $x > \tilde{x}$ с экспоненциальным распределением узлов. Вариант отображения для генерации узлов сетки: $x_j = \tilde{x}\left(1 + \dfrac{\sinh s_j}{\sinh 1}\right)$, где s_j — равномерная сетка в интервале $[-1,\,S]$ (смотри указания к задаче 2.39). Искомая функция Грина:

$$G(x,\,t) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}}\,\exp\left(-\frac{(x - \tilde{x})^2}{4a^2 t}\right) - \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}}\,\exp\left(-\frac{(x + \tilde{x})^2}{4a^2 t}\right).$$

2.41. Смоделировать функцию Грина для уравнения теплопроводности на полупрямой с граничным условием второго рода на левой границе.

$$\begin{cases} G_t = a^2 G_{xx}, \qquad 0 < t, \quad 0 < x, \\ G_x(0,\,t) = 0, \quad \lim\limits_{x\to\infty} G_x(x,\,t) = 0, \\ G(x,\,0) = \delta(x - \tilde{x}). \end{cases} \tag{2.37}$$

Использовать равномерную сетку на интервале $[0,\,2\tilde{x}]$ и неравномерную для значений $x > \tilde{x}$ с экспоненциальным распределением узлов. Вариант отображения для генерации узлов сетки: $x_j = \tilde{x}\left(1 + \dfrac{\sinh s_j}{\sinh 1}\right)$, где s_j — равномерная сетка в интервале $[-1,\,S]$ (смотри указания к задаче 2.39). Искомая функция Грина:

$$G(x,\,t) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}}\,\exp\left(-\frac{(x-\tilde{x})^2}{4a^2 t}\right) + \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}}\,\exp\left(-\frac{(x+\tilde{x})^2}{4a^2 t}\right).$$

2.42. Смоделировать прохождение/отражение волнового пакета через потенциальный барьер $V(x) = V_0\,\eta(x - x_1)\,\eta(x_2 - x)$, $\quad\eta(x)$ — функция Хевисайда ($\hbar = 1$).

$$\begin{cases} \psi_t = \dfrac{i}{2m}\,\psi_{xx} - iV(x)\psi, \qquad 0 < t, \quad 0 < x < l, \\ \psi(0,\,t) = \psi(l,\,t) = 0, \\ \psi(x,\,0) = \psi_0(x). \end{cases}$$

Волновая функция, описывающая волновой пакет:

$$\psi_0(x) = \eta(\varepsilon - |x - x_0|)\,\cos^3\frac{\pi(x - x_0)}{2\varepsilon}\,e^{ikx}, \tag{2.38}$$

где волновое число $k = \sqrt{2mE}$ характерно для свободной частицы массы m с энергией E.

В качестве иллюстрации можно построить графики численного решения $\operatorname{Re}\psi$, $\operatorname{Im}\psi$ или плотности вероятности. Есть ещё один красивый способ: построить график в трехмерных осях, на осях отложить x, $\operatorname{Re}\psi$, $\operatorname{Im}\psi$ (Рис. 7).

2.43. Смоделировать туннелирование волнового пакета (2.38) через потенциальный барьер в виде δ-функции, $V(x) = v_0\,\delta(x - x_1)$. Постановка задачи без δ-функции содержит условие