计算物理学作业 4

1. 完成所有题目。作业截止日期面议。
2. 请提交一个 PDF 格式的作业解答，其中可以描述相应的解题步骤，必要的图表等 (建议用 LaTeX 进行排版)
3. 请提交程序的源文件 (格式：python/fortran/c,c++)，并请提交一个源文件的说明文档 (任意可读格式)，主要说明源程序如何编译、输入输出格式等方面的事宜。请保证它们能够顺利编译通过，同时运行后产生你的解答中的结果。
4. 所有文件打包后发送到课程的公邮。压缩包的文件名和邮件题目请取为“学号 + 姓名 + 作业 1”(如果多于一个人，请写“所有学号 + 所有姓名 + 作业 1”)。

1. **利用标准的 4 阶 Runge-Kutta 来求解简单的常微分方程的初值问题** 我们需要求解的问题是所谓的 Lotka–Volterra 微分方程：

$$\begin{cases} \dot{x} = \alpha x - \beta xy \ , \\ \dot{y} = \delta xy - \gamma y \ . \end{cases} \tag{1}$$

其中 $x(t)$ 和 $y(t)$ 可以分别描写猎物 (比如兔子) 和捕猎者 (比如狼) 的数目。按照其物理意义，它们都必须是大于零的实数。第一个方程告诉我们：如果没有捕猎者的存在，食草动物的数目会自然增长 (实际上是指数增长，增长率由 $\alpha > 0$ 给出)。但是如果有捕猎者那么它们相遇的几率正比于 xy 且有一定的概率 (由参数 $\beta > 0$ 描写食草动物会被猎杀。第二个方程告诉我们，食肉动物本身如果没有食草动物可捕食，自己最终会饿死的 (数目指数衰减，衰减率由 $\gamma > 0$ 描写)。但是如果有可捕食的食草动物存在，它有一定概率会成功捕食并且实现种群的繁衍，增长率由参数 $\delta > 0$ 控制。因此这个简单模型描写了在一个生态系统中，食草动物 (猎物) 与食肉动物 (捕食者) 之间的相互作用机制。

   (a) 从理论上说明，四个正的参数 α，β，γ，δ 中通过 y 和 x 和时间 t 的重新定义 (即每一个变量可以乘以一个相应的常数)，只有参数 γ/α 是唯一的剩余的参数并写出这时候的方程的具体形式。

   (b) 方程的固定点解 (即 x 和 y 都不随时间变化的解) 有哪些？在固定点附近它们是否是稳定的 (为此你可以在相应的固定点附近进行小量展开，并讨论微扰随时间的演化)？

   (c) 将两个方程相除，可以获得仅仅关于 x 和 y 的微分方程。将所得的方程积分获得这个系统的一个守恒量。

   (d) 利用你写的 RK4 数值解法验证一下特殊的情形：$\alpha = 2/3, \beta = 4/3$，$\gamma = \delta = 1$(这时非零的固定点在 $(1, 1/2)$). 选择下列五种不同的初始条件：

$(x(0), y(0)) = (0.8, 0.8), (1.0, 1.0), (1.2, 1.2), (1.4, 1.4), (1.6, 1.6)$，[1] 在 (x, y) 平面画出它们的演化的轨迹。

2. **迭代法求解偏微分方程的边值问题** 本题中，我们将分别比较 Jacobi，Gauss-Seidel 以及 Over-relaxation 方法求解二维单位正方形上的 Poisson 方程的速度。我们考虑如下的方程：

$$
\begin{aligned}
&-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 2\pi^2 \sin(\pi x) \sin(\pi y) \\
&u(x, y) = 0 \;, \quad (x, y) \in \partial\Omega \;, \\
&\Omega = \{(x, y) | 0 < x, y < 1\} \;.
\end{aligned}
\tag{2}
$$

这个问题的严格解是已知的：

$$
u(x, y) = \sin(\pi x) \sin(\pi y) \;, \tag{3}
$$

但是假定我们不知道这个严格解。而是采用数值的方法来求解方程 (11)。

(a) (本问同学们并不需要计算什么，只是统一一下符号而已) 将单位正方形的每一边分为 $N+1$ 份，令 $h = 1/(N+1)$。于是内部的点可以用 $(x, y) = (ih, jh)$, 1 ? $0 \le i, j \le N$ 表示而边界上的点具有相同的表达形式只不过其中的 i, j 分别可以取 0 以及 $N+1$。如我们课上所说，我们将 $u(ih, jh)$ 简记为 u_{ij}，那么微分表达式 $-\partial_x^2 u - \partial_y^2 u$ 可以利用下面的差分表达式来近似表达，

$$
\frac{1}{h^2} \left[4u_{ij} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1} \right] \;. \tag{4}
$$

于是我们获得了如下的线性方程组，

$$
A \cdot z = b \;, \tag{5}
$$

这里我区分了近似解 z_{ij} 和严格解 u_{ij}，后者由 (12) 给出，而近似解 z 则由上面的线性方程组给出，其中 $b_{ij} = h^2 f(x_i, y_j)$，$f(x, y) = 2\pi^2 \sin(\pi x) \sin(\pi y)$。可以证明近似解与严格解之间的差别是 $O(h^2)$。因此，如果我们仅仅感兴趣原始的微分方程的解，我们没有必要在迭代求解线性方程的过程中要求高于 $O(h^2)$ 的精度。矩阵 A 的表达式为 (用二维的坐标 $\mathbf{x} = (x, y)$ 来标记各个点)，

$$
A_{\mathbf{x},\mathbf{y}} = 4\delta_{\mathbf{x},\mathbf{y}} - \sum_{i=1}^{2} [\delta_{\mathbf{x}-\hat{i},\mathbf{y}} + \delta_{\mathbf{x}+\hat{i},\mathbf{y}}] \tag{6}
$$

显然，矩阵 A 是一个 $N^2 \times N^2$ 的稀疏矩阵而已知矢量 b 和待求矢量 z 则都是 $\mathbb{R}^{N^2}$ 中的矢量。

[1]当然，这时候我们认为这些动物的数目是以比较大的基数 (比如万或者更多) 来计算的。毕竟我们不可能有半只狼，1/3 只兔子等等。

(b) 现在选取 Jacobi，Gauss-Seidel 以及优化的 Over-relaxation 算法，都以零矢量 $z^{(0)} = 0$ 作为初始解开始迭代，分别取 $N = 10, 20, 50$ 比较一下这三种算法达到收敛的速度。停止迭代的原则统一选取为：

$$r^{(i)} \equiv \frac{1}{h^2}||Az^{(i)} - b||_\infty < 10^{-4} \ , \tag{7}$$

请列表给出每种算法在上述不同的 N 下收敛时的迭代次数和 $r^{(i)}$ 的数值。