

差分法求解偏微分方程

何翼成 *

April 6, 2022

Project 1

一 题目分析

◆ **作业1：经典扩散方程** $\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (u(t=0, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}})$

**取a=1, 在-10<x<10的范围内, t=5时u 随x的分布
并画出在t=[0,5]范围内, $\langle x^2 \rangle = \int dx u(t, x) x^2$ 随时间的演化**

Figure 1: 题目总览

二 代码展示

```
1 %project1
2 clear;clc;
3 dx=0.05;
4 dt=0.001;
5 x=-10:dx:10;
6 t=0:dt:5;
7 r=dt/(dx^2);
8
9 %偏微分方程的初始条件以及边界条件
10 numX=length(x)-1;
11 numT=length(t)-1;
12 Phi=ones(numT+1,numX+1);
13 Phi(1,:)=1/sqrt(2*pi)*exp(-x.^2/2);%初始条件
14 Phi(2:numT+1,1)=0;%边界条件
15 Phi(2:numT+1,numX+1)=0;%边界条件
16
17 %差分法计算数值解
```

*学号:520072910043;
邮箱地址: heyicheng@sjtu. edu. cn

```

18 for k=1:numT
19     for i=2:numX
20         Phi(k+1,i)=(1-2*r)*Phi(k,i)+r*(Phi(k,i-1)+Phi(k,i+1));
21     end
22 end
23
24 %绘制(x,t,Phi)的三维网格图
25 figure(1)
26 set(gcf,'units','normalized','position',[0.2 0.2 0.6 0.6]);
27 [xx,tt]=meshgrid(x,t);
28 mesh(xx,tt,Phi)
29 xlabel('x')
30 ylabel('t')
31 zlabel('\Phi(x,t)')
32 figure(2)
33 plot(x,Phi(end,:), 'k')
34 xlabel('x')
35 ylabel('\Phi at t=5')
36
37 %计算<x^2>的时间变化
38 for ti=1:numT+1
39     X2(ti)=sum(Phi(ti,:).*x.^2*dx);
40 end
41 figure(3)
42 plot(t,X2, 'r')
43 xlabel('t')
44 ylabel('<x^2> at t \in [0,5]')

```

三 结果分析与结论

通过上述的代码可以完整得到 $u(x,t)$ 在 $x \in [-10, 10] \times t \in [0, 5]$ 的演化情况，为了进行分析进行截取即可。首先是 $t=5$ 的部分，显然我们对所命名的二维数组截取 $(end,:)$ 即可。

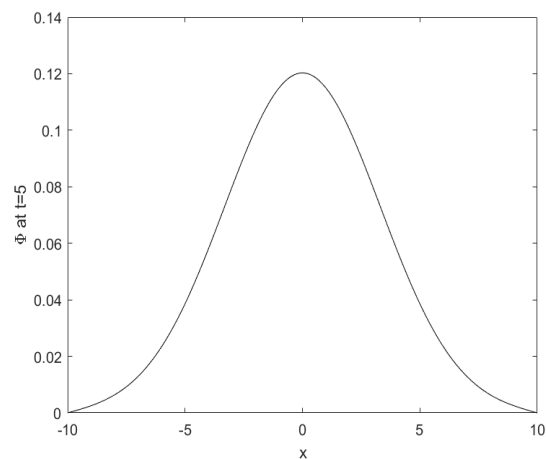


Figure 2: $t=5$ 时的 ϕ $x \in [-10, 10]$

然后就是计算的方均值。我们可以按照时间顺序依次截取 $u(x,t)$ ，然后按照离散数列求和的方法计算得到积分值，最后依次绘制在二维图像上即可。

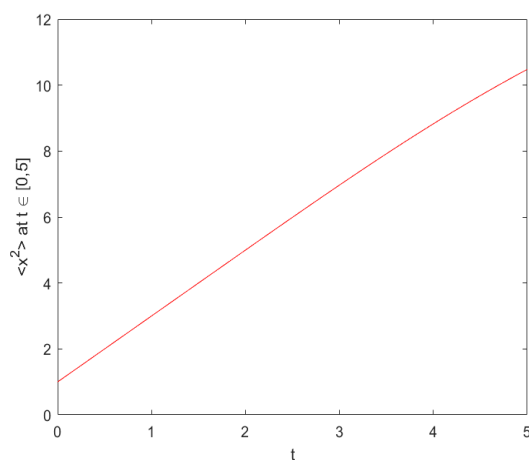


Figure 3: $\langle x^2 \rangle$ at $t \in [0, 5]$

最后展示以下求解得到的总览值。

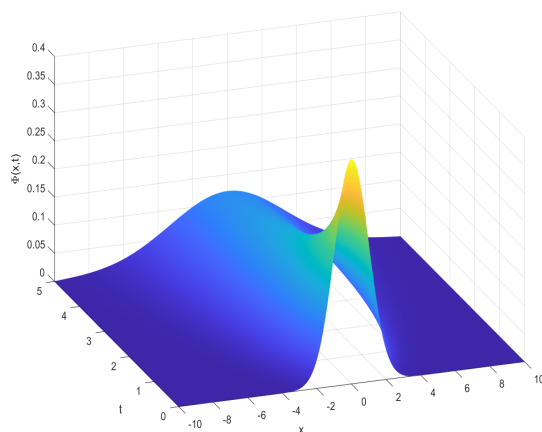


Figure 4: $u(x,t)$ 在 X,T 平面上的演化总览

Project2

四 题目分析

由题意知我们可以将 $\frac{\partial \psi(t)}{\partial t}$ 差分化，从而将该方程离散写作 $i \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{\Delta t} = H \psi_i$ ，其中 H 为题目中所定义的对称矩阵。所以我们将不难看出，这个题目实际上是迭代的背景。

♦ 作业2: 1维格点系统 (L=200)中的单粒子薛定谔方程:

$$i \frac{\partial \bar{\psi}(t)}{\partial t} = H \bar{\psi}(t) \quad H = -\sum_i (a_i^\dagger a_{i+1} + h.c)$$

H is a $L \times L$ matrix, $H_{ij} = 0$ unless: $H_{i,i+1} = H_{i+1,i} = -1$ ($i=1, L-1$),

$\bar{\psi}(t=0) = [0, 0 \dots 1 \dots 0, 0]^T$, 初态一个粒子在第100个格点上

数值求解 t 时刻的波函数, $\bar{\psi}(t) = [\psi_1(t), \psi_2(t), \dots, \psi_{100}(t), \dots, \psi_{200}(t)]^T$,

1. 画出 $t=1, 10, 20, 50$ 时刻的波函数空间分布 $|\psi_i(t)|^2$ as a function of i

2. 画出在 $t=[0, 50]$ 范围内, 波包的宽度 $w(t) = \sqrt{\sum_i (i-100)^2 |\psi_i(t)|^2}$ 随时间的演化

Figure 5: 题目总览

五 代码展示

```

1  %%
2  %project2
3  clear;clc;
4  L=200;
5  dt=0.001;
6  %哈密顿矩阵的生成
7  H=zeros(L,L);
8  for ii=1:L-1
9      H(ii,ii+1)=-1;
10     H(ii+1,ii)=-1;
11 end
12 psi=zeros(200,1);
13 psi(100)=1;
14 numT=50/dt+1;
15 psi_series=zeros(L,numT);
16 psi_series(:,1)=psi;
17 for n=2:numT
18     psi_series(:,n)=psi_series(:,n-1)-1i*H*psi_series(:,n-1)*dt;
19 end
20 %计算波函数的模方
21 psi2_series=abs(psi_series);
22 figure(1)%t=1,10,20,50的情况
23 ts=[1,10,20,50];
24 for tn=1:length(ts)
    
```

```

25 tmp=ts(tn);
26 subplot(2,2,tn)
27 l=ts(tn)/dt;
28 plot(1:L,psi2_series(:,tmp/dt+1)')
29 xlabel("i \in [1,L] with t="+tmp)
30 xlim([1,200])
31 ylabel("\Psi|^2(i)")
32 end
33 %计算波包宽度
34 b=((1:L)'-100).^2;
35 w=zeros(1,numT);
36 for j=1:numT
37     w(j)=sqrt(sum(b.*psi2_series(:,j)));
38 end
39 figure(2)%绘制波包宽度随时间的演化
40 tspan=linspace(0,50,numT);
41 plot(tspan,w,'k')
42 xlabel('t')
43 ylabel('w(t)')
    
```

六 结果分析与结论

下面展示的是 t 在不同时间的时候 $|\psi(t)|^2$ 在 $i \in [1, 200]$ 的分布，如图已经标注了各个子图所代表的时间。

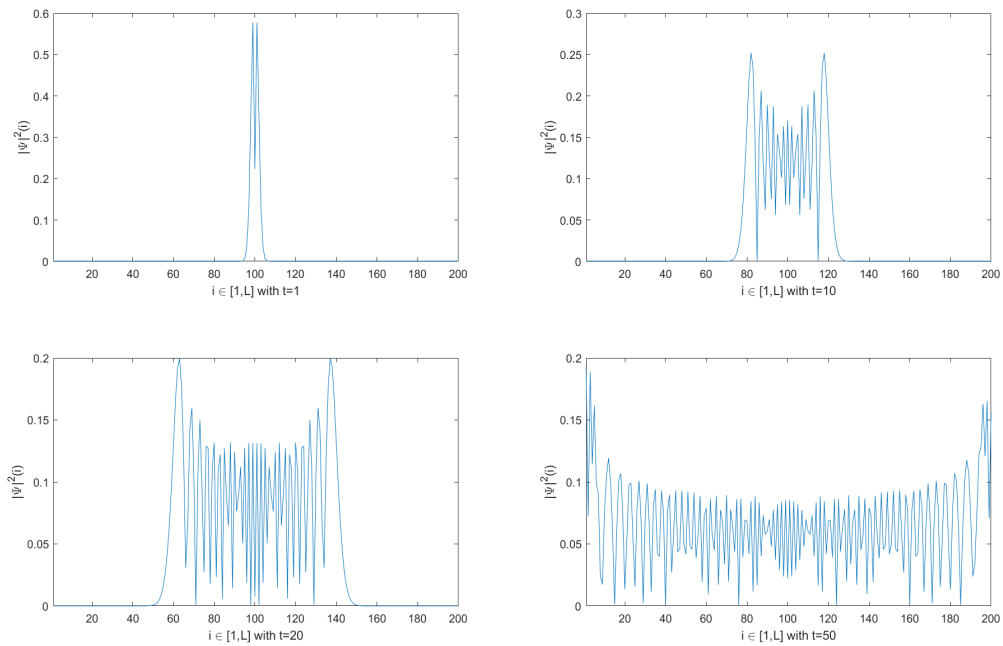


Figure 6: 不同时间下的 $|\psi|^2$

下面展示的是 $w(t)$ 在 $t \in [0, 50]$ 的演化情况，可以看出随着时间的延长波包的宽度逐渐增大，在本数值方法下 t 接近 50 的时候， $w(t)$ 出现了小幅度的回落。

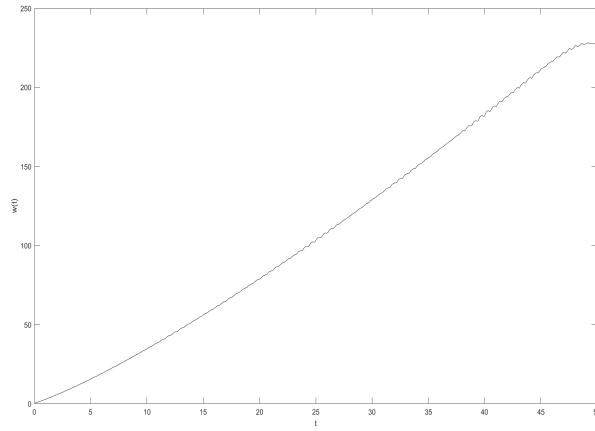


Figure 7: 波包宽度 $w(t)$ 随着时间的演化情况