

计算物理 Hw9 报告文档

白博臣

(四川大学 物理学拔尖计划)



Figure 1: 白博臣 2022141220036

1 Problem 1

1.1 问题回顾

德拜固体理论给出了温度 T 下固体的热容，其中 V 是固体的体积， ρ 是原子的数量密度， k_B 是玻尔兹曼常数， θ_D 是所谓的德拜温度，这是固体的一个特性，取决于它们的密度和声速。

$$C_V = 9V\rho k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2} \quad (1)$$

固体铝组成的样品体积 $V = 1000\text{cm}^3$ ， $\rho = 6.022 \times 10^{28}\text{m}^{-3}$ ， $\theta_D = 428\text{K}$ 。

我们采用辛普森方法来计算该积分，并将温度范围为 $T = 5\text{K}$ to $T = 500\text{K}$ 的 C_V 的函数图像绘制出来。

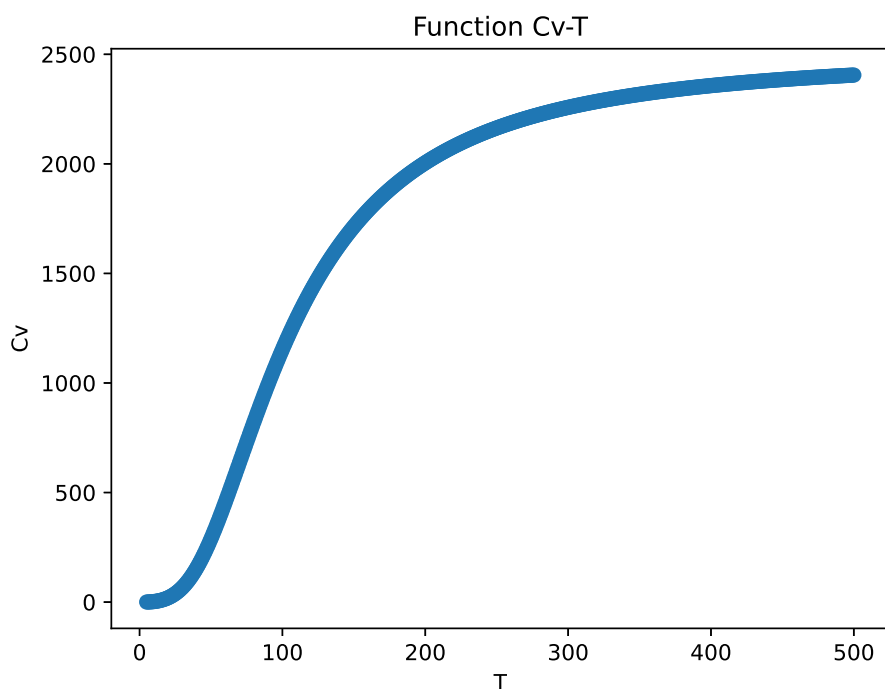


Figure 2: Problem1 函数图像

2 Problem 2

在问题二中，我们编写出了一个可以在每次二分处理前进行误差判断的自适应梯形算法与自适应辛普森算法。由题意得，当二分前后两次算法所得出的结果误差小于 $\varepsilon_0 = 10^{-10}$ 时，停止二分并输出最终结果。

Adaptive Trapezoid Rule Results		
Number of Intervals	Integral Estimate	Error Estimate
1.0	0.3252319078064746	0.1306006245026105
2.0	0.5122828507233315	0.05645031841424636
4.0	0.40299744847824825	0.05283508383083685
8.0	0.43010336929474696	0.02572916301433814
16.0	0.4484146657874699	0.007417866521615191
32.0	0.4539129312153759	0.0019196010937092
64.0	0.45534850437280217	0.00048402793628293805
128.0	0.45571126645324106	0.00012126585584404381
256.0	0.4558021996516641	3.033265742102831e-05
512.0	0.4558249481324202	7.5841766649098474e-06
1024.0	0.45583063620164616	1.8961074389478583e-06
2048.0	0.4558320582782708	4.740308143236227e-07
4096.0	0.4558324138011344	1.1850795073042875e-07
8192.0	0.4558325026820821	2.9627003017562714e-08
16384.0	0.45583252490233334	7.4067517674691885e-09
32768.0	0.45583253045739724	1.8516878586005703e-09
65536.0	0.4558325318461632	4.6292192301677915e-10
131072.0	0.4558325321933545	1.1573059177649725e-10
262144.0	0.4558325322801525	2.8932578555185273e-11

Figure 3: Problem2 自适应梯形算法运算结果

将梯形算法改为辛普森算法，再次输出运算结果：

Adaptive Simpson Rule Results		
Number of Intervals	Integral Estimate	Error Estimate
1.0	0.5746331650289503	0.11880063271986524
2.0	0.36656898106322056	0.08926355124586455
4.0	0.4391386762335799	0.01669385607550522
8.0	0.45451843128504416	0.0013141010240409479
16.0	0.4557456863580111	8.68459510739994e-05
32.0	0.4558270287586106	5.503550474517116e-06
64.0	0.4558321871467208	3.451623643013768e-07
128.0	0.4558325107178055	2.1591279597554802e-08
256.0	0.4558325309593385	1.3497465922718277e-09
512.0	0.4558325322472203	8.436307208370408e-11
1024.0	0.455832532303812	5.2731152777596435e-12

Figure 4: Problem2 自适应辛普森算法运算结果

通过表格数据我们可知，自适应辛普森算法收敛速度要明显快于自适应梯形算法，体现在收敛的所需要的 n 值更少。

从原理出发，辛普森算法和梯形算法的误差估计公式如下：

$$SimpsonErrorEstimated : |E_n| \leq \frac{(b-a)^5}{180n^4} \cdot K = \frac{(b-a)h^4}{180} \cdot K$$

$$\text{TrapezoidalErrorEstimated} : |E_n| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} \cdot M = \frac{(b-a)h^2}{12} \cdot M$$

可知实验结果与理论结果一致。h 过小和过大时，误差结果偏离拟合曲线，下分析其可能的原因。

1. 当 h 较大时， $|E_n|$ 的高阶项部分不能忽略，仍然对结果有一定的贡献，造成了结果的偏离，当 h 减小时，理论上 $|E_n|$ 应趋近于估计公式。

2. 当 h 逐渐减小时，由于 Cancellation Error 的作用，两个很接近的数字做减法，计算出的 Error 值不再准确，难以避免。

3 Problem 3

对于积分： $\int_1^0 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi}{4}$ ，分别采用梯形算法、辛普森算法以及龙贝格算法进行计算，研究间隔 h 与误差大小的关系。

对于梯形算法：

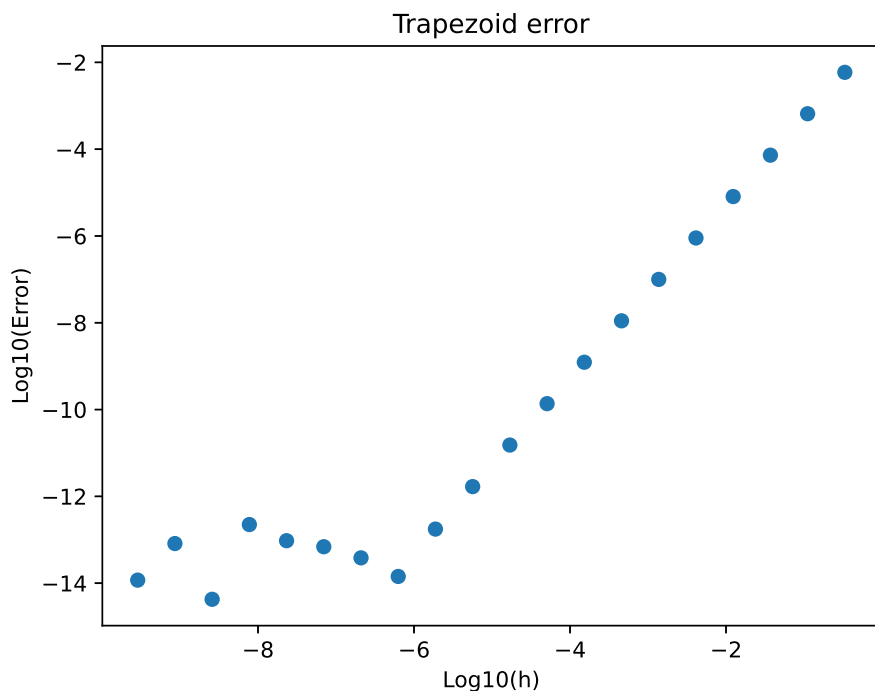


Figure 5: Problem3 梯形算法误差分析图

对于辛普森算法：

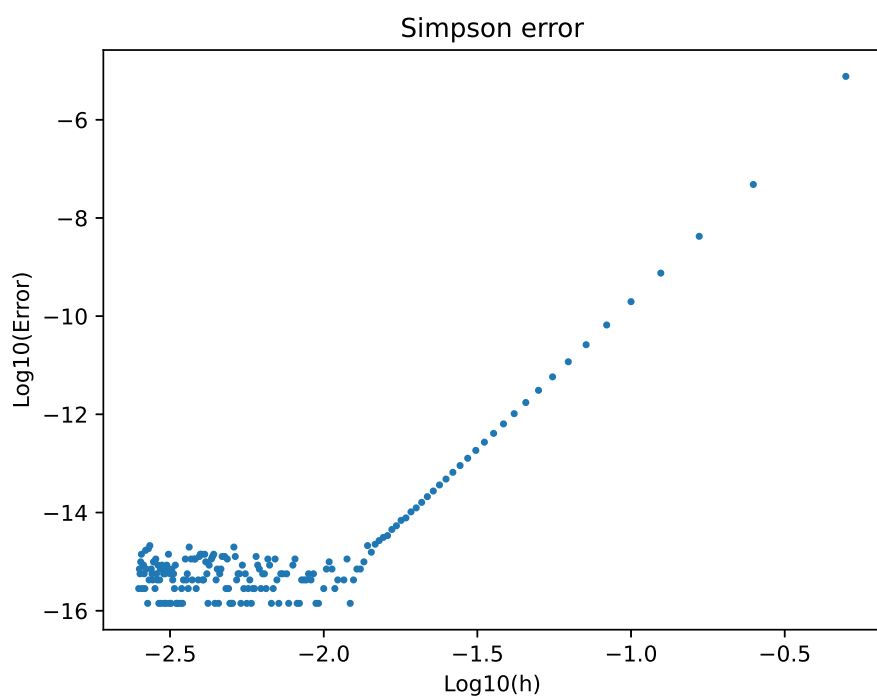


Figure 6: Problem3 辛普森算法误差分析图

对于龙贝格算法:

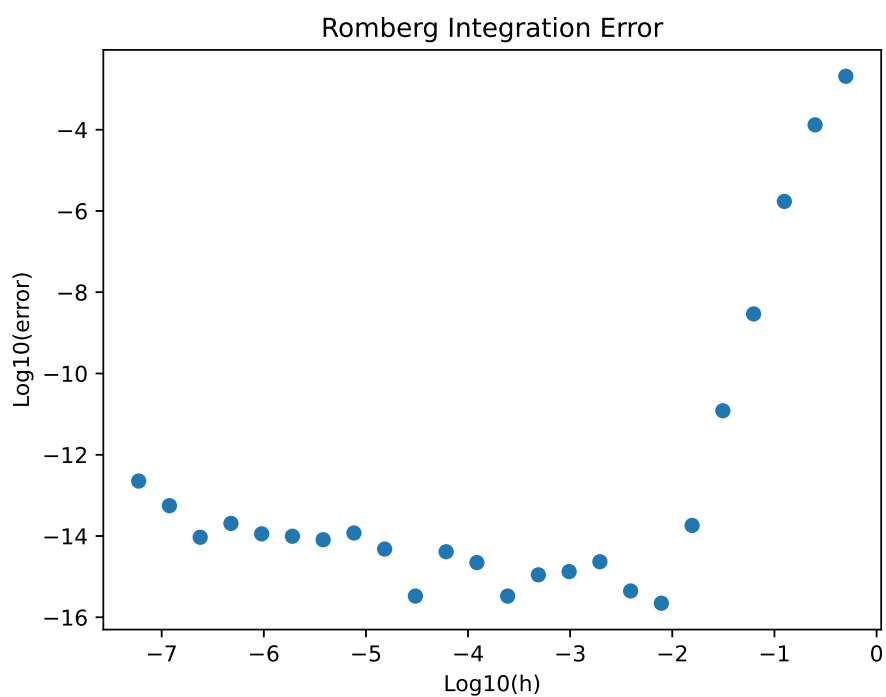


Figure 7: Problem3 龙贝格算法误差分析图

我们对图像右半部分较为平滑的部分进行斜率拟合估计如下：

$$k(\text{Trapezoidal}) = 1.99 \approx 2$$

$$k(\text{Simpson's}) = 5.98 \approx 6$$

可知实验结果 Trapezoidal 方法误差与理论结果一致, Simpson's 方法误差与理论结果“不一致”(理论值 $k(\text{Simpson's})=4$, 实际值 $k(\text{Simpson's})\approx 6$)。其原因解释如下：

通过 Taylor 展开得到 Simpson's Rule 的误差具有如下形式：

$$|E_n| = S_1 h^4 [f^{(3)}(a) - f^{(3)}(b)] + \dots$$

当 $f^{(3)}(a) - f^{(3)}(b) \neq 0$ 时, 误差首项 $\mathcal{O}(h^4)$ 起主导作用, 使用 Taylor 中值定理得一般情况误差: $|E_n| = S_1 h^4 [f^{(4)}(\xi)]$, (a, b) , 精度达到 $\mathcal{O}(h^4)$ 。

当 $f^{(3)}(a) - f^{(3)}(b) = 0$ 时, 由 Taylor 中值定理得: $|E_n| = S_2 h^6 [f^{(6)}(\xi)]$ (a, b) , 精度达到 $\mathcal{O}(h^6)$ 。

被积函数: $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$ 恰好满足 $f^{(3)}(1) - f^{(3)}(0) = 0$, 故拟合结果为 $\mathcal{O}(h^6)$ 。

误差拟合结果可视化如上图所示, 后续偏离拟合曲线的原因可能如下：

1. 当 h 较大时, $|E_n|$ 的高阶项部分不能忽略, 仍然对结果有一定的贡献, 造成了结果的偏离, 当 h 减小时, 理论上 $|E_n|$ 应趋近于估计公式。

2. 当 h 逐渐减小时, 由于 Cancellation Error 的作用, 两个很接近的数字做减法, 计算出的 Error 值不再准确, 难以避免。