计算物理第五次作业

2000012425 张弛

2023年1月4日

1.参考课件《偏微分方程A》,对Kruskal,Zalusky孤立子问题,给出数值解(随时间演化的动画示意图,或者代表性时刻的帧图)及说明,注意保证大t时数值结果的稳定性。

$$\begin{cases} u_t + uu_x + \delta^2 u_{xxx} = 0, \\ u(x, 0) = \cos(\pi x), & 0 \le x \le 2. \end{cases}$$

 u, u_x, u_{xx} 为在[0, 2]上的周期函数。

解. 一些差分

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t}, \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x}.$$

然后一点平均方法

$$u = \frac{u_{i-1,j} + u_{i,j} + u_{i+1,j}}{3}.$$

得到差分公式

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\frac{1}{6} (u_{i+1,j} - u_{i-1,j}) (u_{i-1,j} + u_{i,j} + u_{i+1,j}) + \frac{\delta^2}{2(\Delta x)^2} (u_{i+2,j} + 2u_{i-1,j} - 2u_{i+1,j} - u_{i-2,j}) \right].$$

近似一下变量t为中心差分情形的Von Neumann稳定条件

$$\frac{1}{(\Delta x/\Delta t)} \left[|u| + 4 \left(\frac{\delta}{\Delta x} \right)^2 \right] \le 1.$$

一些变量步数和步长的选取

$$0 \le x \le 2, \Delta x = 2/128,$$

$$0 \le t \le 12.6, \Delta t = 12.6/600000.$$

然后取 $\delta = 0.022$.借助程序"HW5计物第一题.py"得到动图"KZ.qif"。

可以看到随着时间演进,余弦波开始挤压产生截波。然后色散项 u_{xxx} 开始起作用,解变成一列由8个类sech函数组成的波,速度快的波会追上慢的波,吞入然后又吐出。经过一段时间,原先的余弦波又出现了。不过这时稳定性已经不佳了。

2.参考课件《偏微分方程B》,使用谱方法或者其他方法求解2维扩散方程,给出数值解(随时间演化的动画示意图,或者代表性时刻的帧图)及说明:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{(\partial x)^2} + D \frac{\partial^2 T}{(\partial y)^2}.$$

其中 $D = 1, 0 \le x \le 1, 0 \le y \le 1,$

x方向的边界条件为T(x = 0, y) = T(x = 1, y) = 0,

y方向的边界条件为dT/dy(x, y = 0) = dT/dy(x, y = 1) = 0.

解. 使用谱方法。x方向为Dirichlet边界条件,将解按照x进行傅里叶展开

$$T(x, y, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{T}_i(y, t) \sin(i\pi x).$$

一些差分

$$t_n = t_0 + n\delta t, x_i = x_0 + i\delta x, y_i = y_0 + j\delta y.$$

其中 $0 \le i \le I, 0 \le j \le J$. 差分化后的傅里叶展开的截断形式

$$T_{i,j}^{n} = \sum_{k=0}^{I} \hat{T}_{k,j}^{n} \sin(ik\pi/I).$$

原方程差分化,使用了Crank-Nicholson方法,其中y变量中心差分

$$\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\delta t} = \frac{D}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 T}{\delta x^2} \right)_{i,j}^{n+1} + \left(\frac{\partial^2 T}{\delta x^2} \right)_{i,j}^n \right] + \frac{D}{2} \left[\frac{T_{i,j-1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j+1}^{n+1}}{(\delta y)^2} + \frac{T_{i,j-1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j+1}^n}{(\delta y)^2} \right].$$

则差分过后的傅里叶分量满足的方程

$$-\frac{C}{2}\hat{T}_{i,j-1}^{n+1} + \{1 + C(1+i^2\kappa^2/2)\}\hat{T}_{i,j}^{n+1} - \frac{C}{2}\hat{T}_{i,j+1}^{n+1} = \frac{C}{2}\hat{T}_{i,j-1}^n + \{1 - C(1+i^2\kappa^2/2)\}\hat{T}_{i,j}^n + \frac{C}{2}\hat{T}_{i,j+1}^n.$$

其中 $C = D \frac{\delta t}{(\delta u)^2}$, $\kappa = \pi \delta y$. 边界条件比较简单

$$\hat{T}_{i,0}^n = \hat{T}_{i,1}^n, \hat{T}_{i,J-1}^n = \hat{T}_{i,J}^n$$

是个三对角矩阵。取定一些差分的格子

$$I = J = 128, \delta t = 0.0001.$$

初始条件为

$$T(x, y, 0) = \eta(0.1 - |x - 0.5|)\eta(0.1 - |y - 0.5|).$$

需要用到差分形式的傅里叶变换

$$\hat{T}_{i,j}^n = \frac{2}{I} \sum_{k=0}^{I} T_{k,j}^n \sin(ik\pi/I).$$

时间范围

$$0 \le t \le 0.1, N = 1000.$$

用Thomas算法来解三对角线性方程。借助程序"HW5计物第二题.py"得到动图"Heat.gif"。

可以看到随着时间演进,中心方块的浓度开始扩散,近似为圆形,逐渐扩大,由于边界条件的限制, 在时间充分大后,会形成边界平行于y轴的等浓度层。

3.考虑由一下初始条件和边界条件给出的振动方膜的二维波动方程:

$$\begin{cases} \lambda \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, & x, y \in [0, 1], t \ge 0, \\ u(x, y, 0) = \sin(\pi x) \sin(2\pi y), & x, y \in (0, 1), \\ u = 0 \ boundary, & t \ge 0, \\ \partial u / \partial t|_{t=0}, & x, y \in (0, 1). \end{cases}$$

边界由x = 0, x = 1, y = 0及y = 1给定。 λ 可以取为1.

1)使用分离变量法给出该方程的解析解。

解. 直接将解按照本征函数展开

$$u(x, y, t) = \sum_{mn} c_{mn}(t) \sin(m\pi x) \sin(n\pi y).$$

代入原方程, 得

$$\ddot{c}_{mn}(t) + (m^2 + n^2)\pi^2 c_{mn} = 0.$$

知道初始条件

$$\begin{cases} c_{mn}(0) = \delta_{m1}\delta_{n2}, \\ \dot{c}_{mn}(0) = 0. \end{cases}$$

解得

$$c_{mn}(t) = \delta_{m1}\delta_{n2}\cos\left(\sqrt{5}\pi t\right).$$

则解析解为

$$u(x, y, t) = \sin(\pi x)\sin(2\pi y)\cos(\sqrt{5}\pi t).$$

2)使用二维差分网格,写出求解该方程的显式方法的算法,并编写数值求解离散波动方程的程序。 特别是描述如何处理边界条件和初始条件,并将结果与封闭形式的解决方案进行比较。

解,使用谱方法。x方向为Dirichlet边界条件,将解按照x进行傅里叶展开

$$u(x, y, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \hat{u}_i(y, t) \sin(i\pi x).$$

一些差分

$$t_n = t_0 + n\delta t, x_i = x_0 + i\delta x, y_j = y_0 + j\delta y.$$

其中 $0 \le i \le I, 0 \le j \le J$. 差分化后的傅里叶展开的截断形式

$$u_{i,j}^{n} = \sum_{k=0}^{I} \hat{u}_{k,j}^{n} \sin(ik\pi/I).$$

原方程差分化,使用了Crank-Nicholson方法,其中y变量和t变量使用中心差分

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^n + u_{i,j}^{n-1}}{(\delta t)^2} = \frac{\lambda}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 u}{\delta x^2} \right)_{i,j}^{n+1} + \left(\frac{\partial^2 u}{\delta x^2} \right)_{i,j}^n \right] + \frac{\lambda}{2} \left[\frac{u_{i,j-1}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j+1}^{n+1}}{(\delta y)^2} + \frac{u_{i,j-1}^{n} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i,j+1}^{n}}{(\delta y)^2} \right].$$

则差分过后的傅里叶分量满足的方程

$$-\frac{C}{2}\hat{u}_{i,j-1}^{n+1} + \{1 + C(1+i^2\kappa^2/2)\}\hat{u}_{i,j}^{n+1} - \frac{C}{2}\hat{u}_{i,j+1}^{n+1} = \frac{C}{2}\hat{u}_{i,j-1}^n + \{2 - C(1+i^2\kappa^2/2)\}\hat{u}_{i,j}^n + \frac{C}{2}\hat{u}_{i,j+1}^n - \hat{u}_{i,j}^{n-1}.$$

其中 $C = \lambda \left(\frac{\delta t}{\delta y}\right)^2$, $\kappa = \pi \delta y$. 边界条件比较简单

$$\hat{u}_{i,0}^n = 0, \hat{u}_{i,I}^n = 0.$$

初值条件直接离散傅里叶变换即可

$$\hat{u}_{i,j}^{0} = \frac{2}{I} \sum_{k=0}^{I} u_{k,j}^{0} \sin{(ik\pi/I)}.$$

一阶初值条件写为

$$\hat{u}_{i,j}^{1} = \hat{u}_{i,j}^{0}.$$

取定一些差分的格子

$$I = J = 128, \delta t = 0.001.$$

时间范围

$$0 \le t \le 1, N = 1000.$$

借助程序"HW5计物第三题数值法.py"得到动图"OscillationNum.gif"。

另外借助程序"HW5计物第三题解析法.py"得到动图"OscillationAna.gif"。

可以看到两种方法得到的结果看不出差别。都是标准的本征振动形式,且频率振幅相同。

3)给出不同差分步长 $(\Delta t, \Delta x \mathcal{D} \Delta y)$ 情形的数值表现,特别是考虑和校验数值稳定性条件(此处可以设置 $\lambda=1,2$ 等不同值):

$$\Delta t \le \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right)^{-1/2}.$$

解. 上一题已经给出一种较稳定的情况,下面看两个另外的情况。 取

$$\Delta t = 0.1, \Delta x = 1/128, \Delta y = 1/128.$$

此时

$$\Delta t \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}} = 18 \ge 1.$$

借助程序"HW5计物第三题稳定性比较.py"得到动图"OscillationTlarge.gif"。发现振动发生了不应该发生的衰减。

取

$$\Delta t = 0.001, \Delta x = 1/128, \Delta y = 1/16.$$

此时

$$\Delta t \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}} = 0.13 \le 1.$$

借助程序"HW计物第三题稳定性比较.py"得到动图"OscillationLattice.gif"。由于满足稳定性,振动模式保持正确,但是由于差分格子较大,出现锐利边缘。

4)对 $\Delta x = \Delta y$ 情形,给出结果的动画展示。

答. 比如前面的"OscillationNum.gif"和"OscillationTlarge.gif"。

4.参考课件《随机数及简明概率论》,选取某种程序自带的随机数产生方法,产生一组[0-1]之间均匀分布的随机数,统计[0-0.1-0.2...0.9-1.0]各个区间的撒点数。重复上述步骤多次(如: 10000次)

- 1)请数值模拟,得到落入区间如[0.3-0.4]内的随机数的比例,给出这个比例的10000次数值的分布曲线,并给予论述说明;
- 解. 使用python的random函数,每次模拟产生1000个随机数,然后统计相关比例并画出比例曲线。借助程序"HW5计物第四题随机性统计.py"得到下图

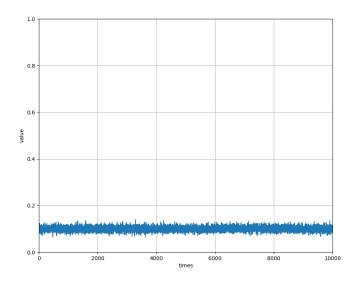


图 1: random函数随机性统计

当然我感觉散点图更好

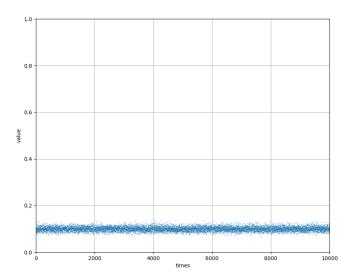


图 2: random函数随机性统计

可以看出来比例基本在0.1上下波动, 比较稳定均匀。

2)参照课件,构建Chi2检验随机数的性质,并论述结果。

解. 列联表检验。生成20000个随机数,交替分成两组,第一组作为10000个x,第二组作为10000个y,共10000个点。这10000个点应当随机分布。考虑x-y平面,划分为 10×10 的格子,统计这10000个点落入每个方格的频次 n_{ij} ,将理论频次 $m_{ij}=100$ 作为平均值,算出统计检验量

$$\chi^2 = \sum_{i,j=1}^k \frac{(n_{ij} - m_{ij})^2}{m_{ij}}.$$

卡方检验自由度

$$n = 9999$$
.

由程序"HW5计物第四题卡方独立性检验.py"得到假设"random函数产生随机数是独立的"的置信概率为100%,十次模拟结果都是100%。