计算物理作业 8

杨远青 22300190015 CompPhys 24

2024 年 11 月 26 日

正面迎击 *ddl* 军团!

1 题目 1：松弛法求解泊松方程

1.1 题目描述

Consider the Poisson equation:

$$\nabla^2\varphi(x,y) = -\frac{\rho(x,y)}{\varepsilon_0}$$

from electrostatics on a rectangular geometry with $x \in [0, L_x]$ and $y \in [0, L_y]$. Write a program that solves this equation using the relaxation method and test your program with the following cases:
(a) $\rho(x,y) = 0$, $\varphi(0,y) = \varphi(L_x,y) = \varphi(x,0) = 0$, $\varphi(x,L_y) = 1\,\mathrm{V}$, $L_x = 1\,\mathrm{m}$, and $L_y = 1.5\,\mathrm{m}$;
(b) $\frac{\rho(x,y)}{\varepsilon_0} = 1\,\mathrm{V/m^2}$, $\varphi(0,y) = \varphi(L_x,y) = \varphi(x,0) = \varphi(x,L_y) = 0$, and $L_x = L_y = 1\,\mathrm{m}$.

1.2 程序描述

1.3 伪代码

Powered by LaTeX pseudocode generator

1.4 结果示例

1.4.1 Case (a)：无源电荷，三边接地

```
● (base) gilbert@Gilbert-YoungMacBook src % python -u poisson.py

  === 泊松方程求解器 ===
  请选择要求解的案例:
  a - 无源项, 顶部电势为1V其余为0V
  b - 均匀源项(ρ/ε₀ = 1 V/m²), 边界全为0V
  c - 自定义均匀源项和边界条件

  请输入选项 (a/b/c): a

  请输入网格点数 (Nx, Ny) 和最大迭代次数 (max_iter), 按回车使用默认值:
  请输入 x 方向的网格点数 Nx (默认 50):
  请输入 y 方向的网格点数 Ny (默认 75):
  请输入最大迭代次数 max_iter (默认 10000): 1000
  在 n = 149 时开始使用指数近似
  解析解未在最大 n 值 1000 内收敛, 最后一项贡献为 1.27e-03
  解析解使用的傅里叶级数中最大 n: 999
  从 n = 149 开始使用指数近似

  使用jacobi方法求解...
  Jacobi方法达到最大迭代次数1000仍未收敛
  最大偏差: 6.29e-02V
  最大偏差位置: (x=0.490m, y=0.912m)
  迭代次数: 1000
  求解时间: 0.0200秒
  2024-11-25 18:05:20.419 python[15777:372426] +[IMKClient subclass]: chose IMKClient_Modern
  2024-11-25 18:05:20.419 python[15777:372426] +[IMKInputSession subclass]: chose IMKInputSession_Modern

  使用gauss_seidel方法求解...
  Gauss-Seidel方法达到最大迭代次数1000仍未收敛
  最大偏差: 1.38e-02V
  最大偏差位置: (x=0.490m, y=0.770m)
  迭代次数: 1000
  求解时间: 2.7074秒

  使用sor方法求解...
  使用最优松弛因子: ω = 1.899
  SOR方法在第202次迭代收敛
  最大偏差: 7.25e-03V
  最大偏差位置: (x=0.959m, y=1.439m)
  迭代次数: 202
  求解时间: 0.6313秒
```

图 1: (a)：终端输出

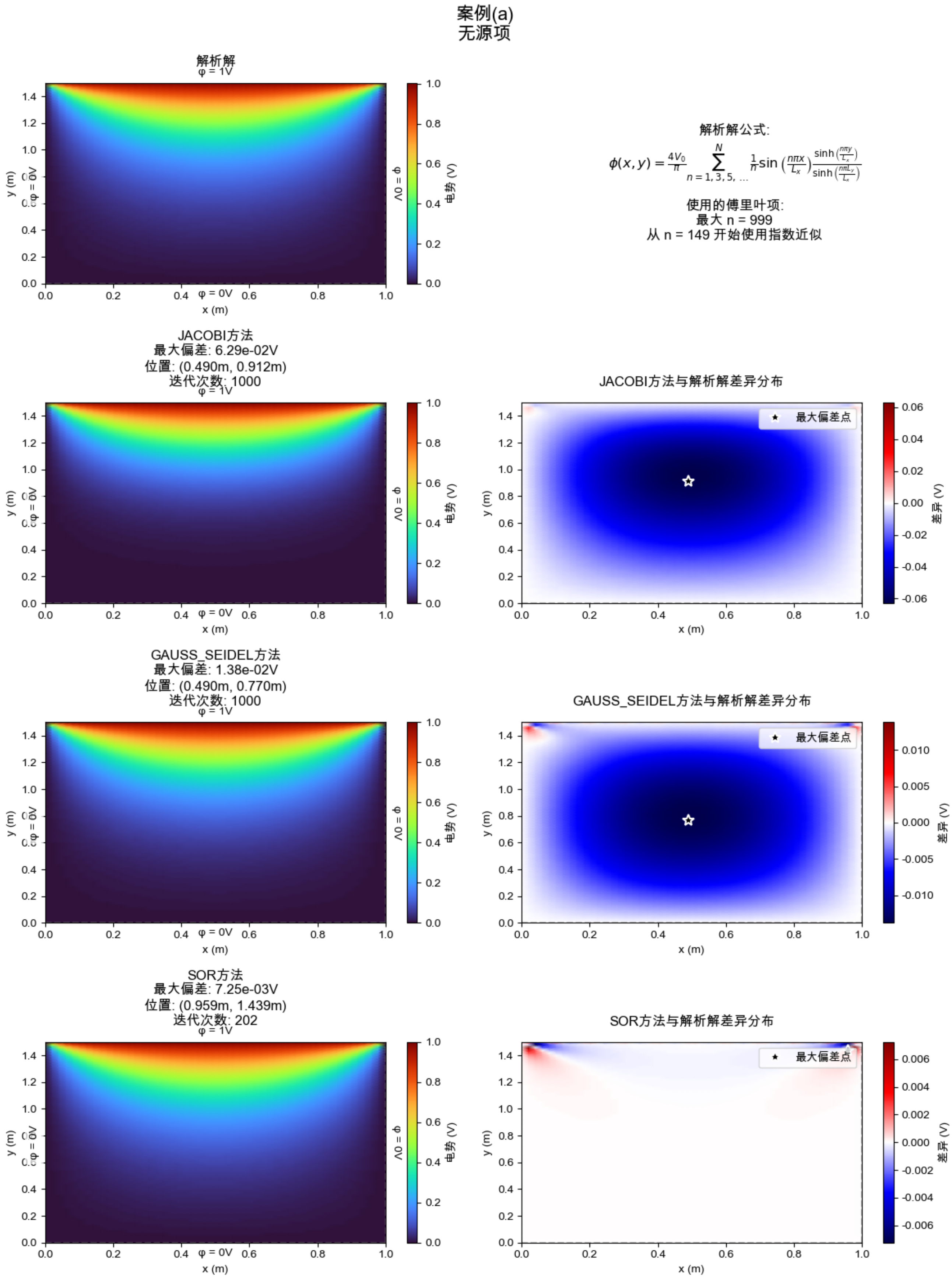

案例(a)
无源项
解析解
φ = 1V
φ = 0V
x (m)
y (m)
电势 (V)
解析解公式:
$\phi(x,y) = \frac{4V_0}{\pi} \sum_{n=1,3,5,\ldots}^{N} \frac{1}{n} \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \frac{\sinh\left(\frac{n\pi y}{L_x}\right)}{\sinh\left(\frac{n\pi L_y}{L_x}\right)}$
使用的傅里叶项:
最大 n = 999
从 n = 149 开始使用指数近似
JACOBI方法
最大偏差: 6.29e-02V
位置: (0.490m, 0.912m)
迭代次数: 1000
JACOBI方法与解析解差异分布
最大偏差点
差异 (V)
GAUSS_SEIDEL方法
最大偏差: 1.38e-02V
位置: (0.490m, 0.770m)
迭代次数: 1000
GAUSS_SEIDEL方法与解析解差异分布
SOR方法
最大偏差: 7.25e-03V
位置: (0.959m, 1.439m)
迭代次数: 202
SOR方法与解析解差异分布

图 2: (a)：计算结果及对比

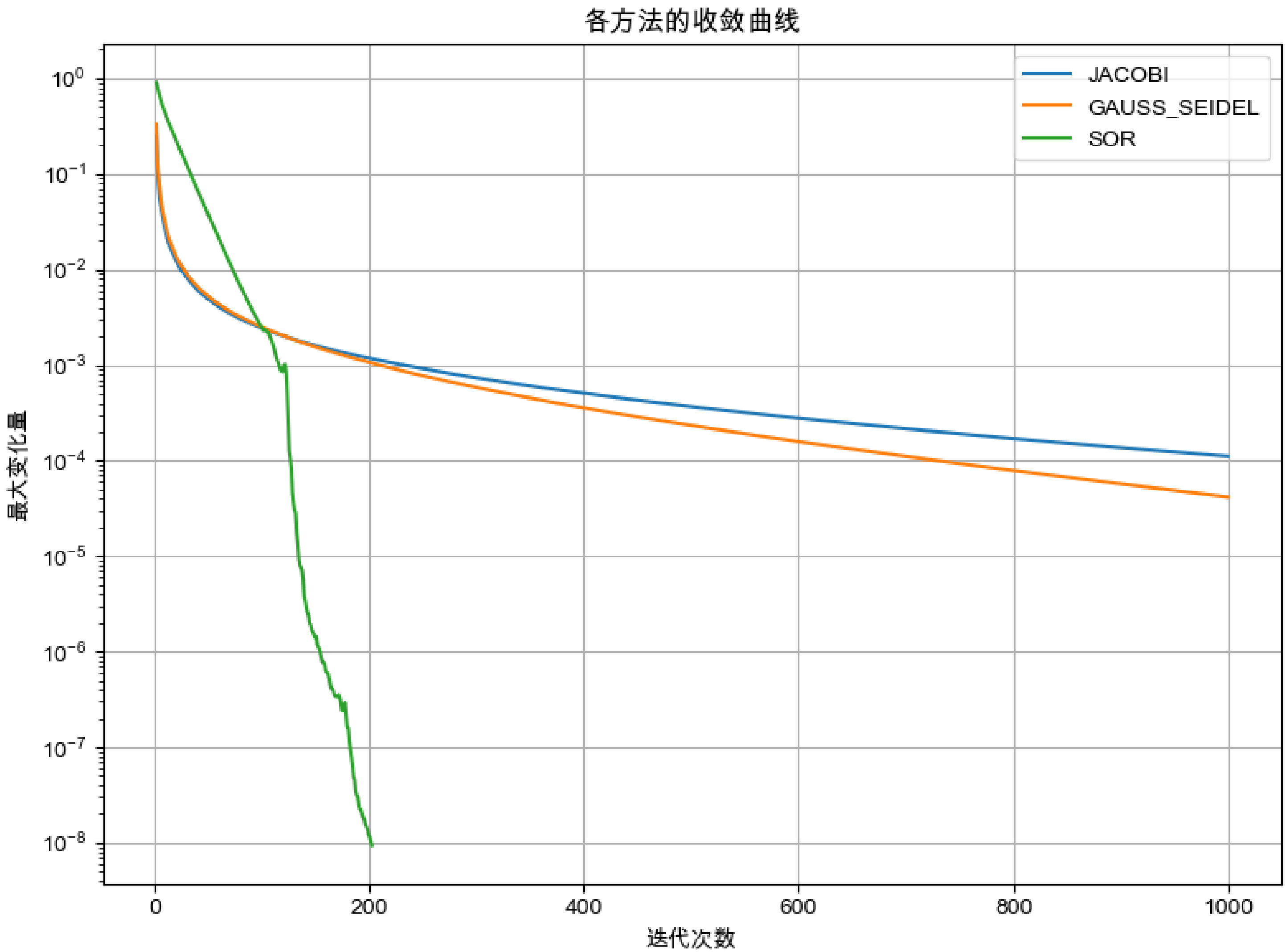

各方法的收敛曲线
JACOBI
GAUSS_SEIDEL
SOR
最大变化量
迭代次数
0
200
400
600
800
1000
10^0
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
10^{-6}
10^{-7}
10^{-8}

图 3: (a)：收敛曲线对比

1.4.2 Case (b)：均匀源电荷，四边接地

```
● (base) gilbert@Gilbert-YoungMacBook src % python -u poisson.py

  === 泊松方程求解器 ===
  请选择要求解的案例:
  a - 无源项，顶部电势为1V其余为0V
  b - 均匀源项(ρ/ε₀ = 1 V/m²)，边界全为0V
  c - 自定义均匀源项和边界条件

  请输入选项 (a/b/c): b

  请输入网格点数 (Nx, Ny) 和最大迭代次数 (max_iter)，按回车使用默认值:
  请输入 x 方向的网格点数 Nx (默认 50):
  请输入 y 方向的网格点数 Ny (默认 50):
  请输入最大迭代次数 max_iter (默认 10000): 3000
  INFO:root:解析解在 n = 11, m = 49 项时达到收敛，最大项贡献为 2.71e-21
  解析解使用的傅里叶级数项数: N = 11, M = 49

  使用jacobi方法求解...
  Jacobi方法达到最大迭代次数3000仍未收敛
  最大偏差: 2.25e-04V
  最大偏差位置: (x=0.571m, y=0.449m)
  迭代次数: 3000
  求解时间: 0.0443秒
  2024-11-25 18:07:32.196 python[15971:375251] +[IMKClient subclass]: chose IMKClient_Modern
  2024-11-25 18:07:32.196 python[15971:375251] +[IMKInputSession subclass]: chose IMKInputSession_Modern

  使用gauss_seidel方法求解...
  Gauss-Seidel方法在第2537次迭代收敛
  最大偏差: 1.67e-04V
  最大偏差位置: (x=0.980m, y=0.469m)
  迭代次数: 2537
  求解时间: 4.3666秒

  使用sor方法求解...
  使用最优松弛因子: ω = 1.882
  SOR方法在第133次迭代收敛
  最大偏差: 1.67e-04V
  最大偏差位置: (x=0.980m, y=0.449m)
  迭代次数: 133
  求解时间: 0.2592秒
```

图 4: (b)：终端输出

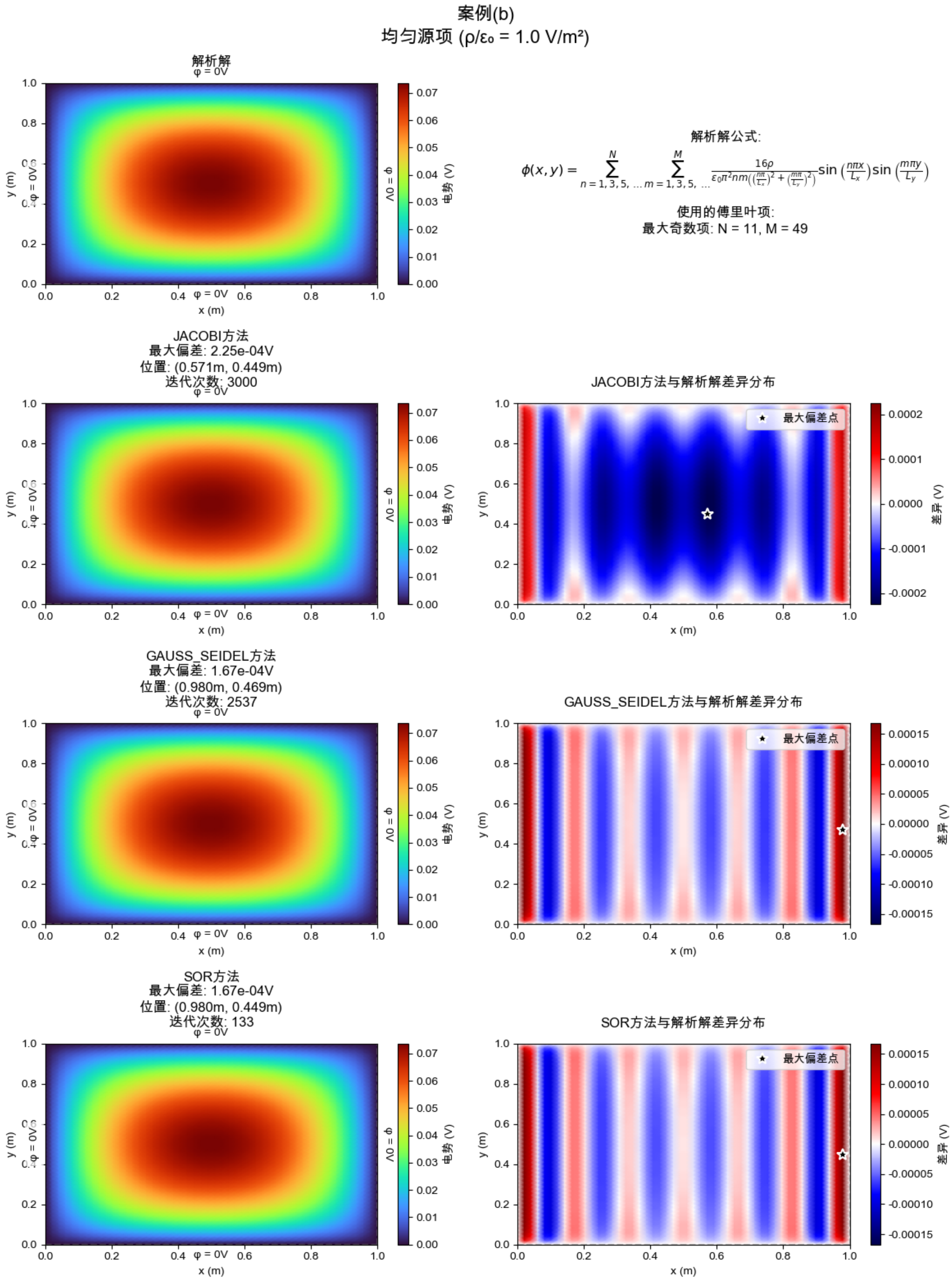

案例(b)
均匀源项 (ρ/ε₀ = 1.0 V/m²)
解析解
φ = 0V
解析解公式:
$\phi(x,y)=\sum_{n=1,3,5,\ldots}^{N}\sum_{m=1,3,5,\ldots}^{M}\frac{16\rho}{\varepsilon_0\pi^2 nm\left(\left(\frac{n\pi}{L_x}\right)^2+\left(\frac{m\pi}{L_y}\right)^2\right)}\sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right)$
使用的傅里叶项:
最大奇数项: N = 11, M = 49
JACOBI方法
最大偏差: 2.25e-04V
位置: (0.571m, 0.449m)
迭代次数: 3000
JACOBI方法与解析解差异分布
最大偏差点
GAUSS_SEIDEL方法
最大偏差: 1.67e-04V
位置: (0.980m, 0.469m)
迭代次数: 2537
GAUSS_SEIDEL方法与解析解差异分布
SOR方法
最大偏差: 1.67e-04V
位置: (0.980m, 0.449m)
迭代次数: 133
SOR方法与解析解差异分布
x (m)
y (m)
电势 (V)
差异 (V)

图 5: (b)：计算结果及对比

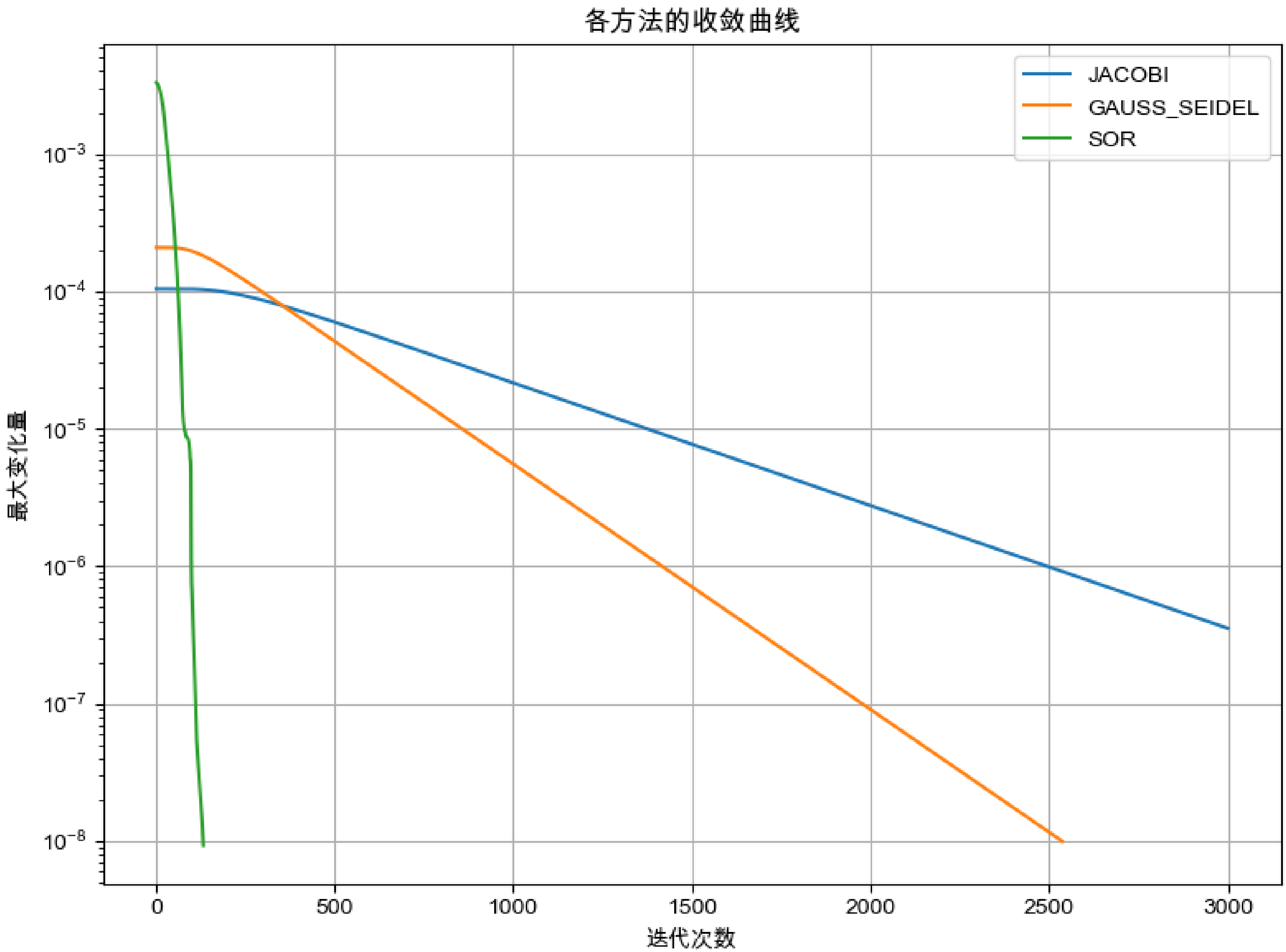
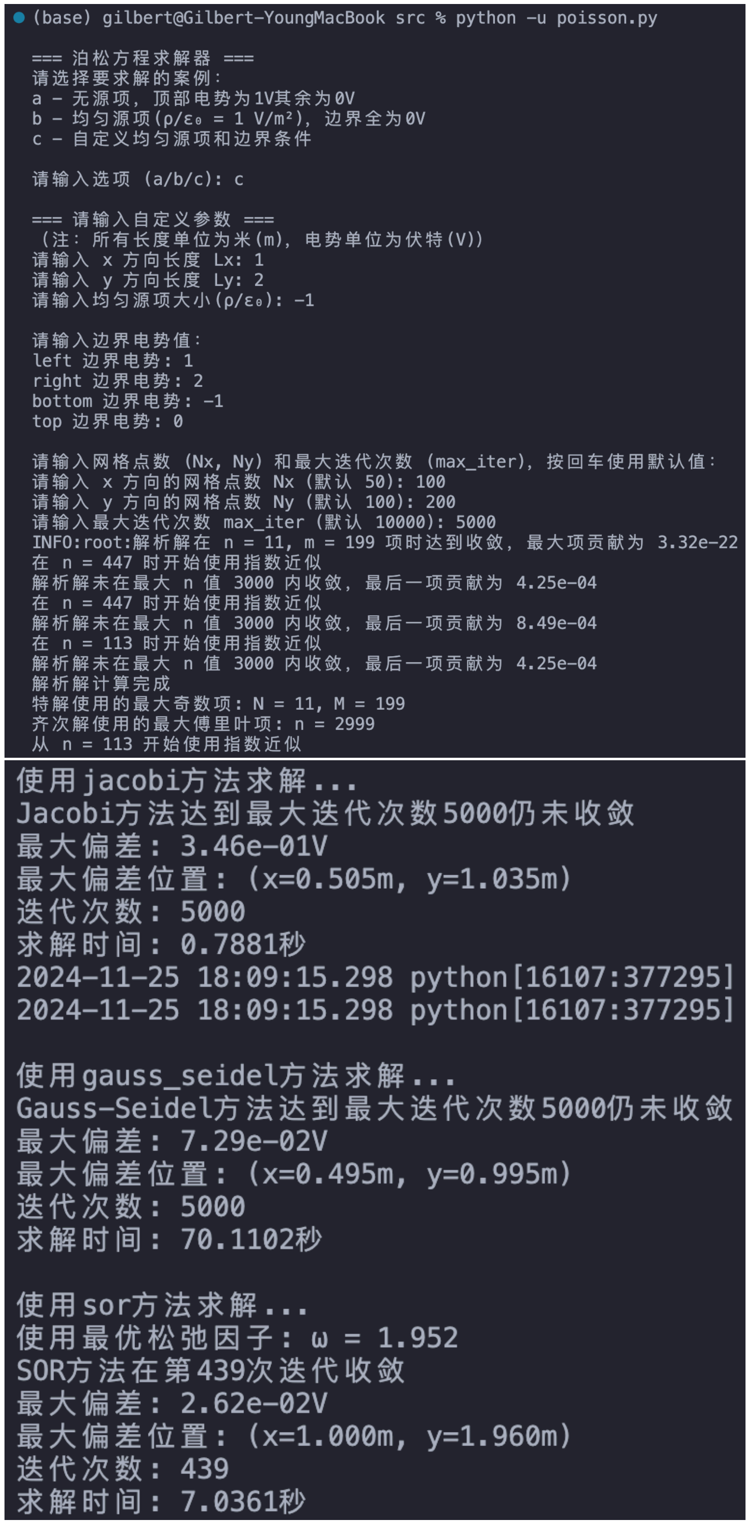


图 6: (b)：收敛曲线对比

1.4.3 Case (c)：均匀源电荷，自定义边界



```
(base) gilbert@Gilbert-YoungMacBook src % python -u poisson.py

=== 泊松方程求解器 ===
请选择要求解的案例：
a - 无源项，顶部电势为1V其余为0V
b - 均匀源项(ρ/ε₀ = 1 V/m²)，边界全为0V
c - 自定义均匀源项和边界条件

请输入选项 (a/b/c): c

=== 请输入自定义参数 ===
（注：所有长度单位为米(m)，电势单位为伏特(V)）
请输入 x 方向长度 Lx: 1
请输入 y 方向长度 Ly: 2
请输入均匀源项大小(ρ/ε₀): -1

请输入边界电势值：
left 边界电势: 1
right 边界电势: 2
bottom 边界电势: -1
top 边界电势: 0

请输入网格点数 (Nx, Ny) 和最大迭代次数 (max_iter)，按回车使用默认值：
请输入 x 方向的网格点数 Nx (默认 50): 100
请输入 y 方向的网格点数 Ny (默认 100): 200
请输入最大迭代次数 max_iter (默认 10000): 5000
INFO:root:解析解在 n = 11, m = 199 项时达到收敛，最大项贡献为 3.32e-22
在 n = 447 时开始使用指数近似
解析解未在最大 n 值 3000 内收敛，最后一项贡献为 4.25e-04
在 n = 447 时开始使用指数近似
解析解未在最大 n 值 3000 内收敛，最后一项贡献为 8.49e-04
在 n = 113 时开始使用指数近似
解析解未在最大 n 值 3000 内收敛，最后一项贡献为 4.25e-04
解析解计算完成
特解使用的最大奇数项: N = 11, M = 199
齐次解使用的最大傅里叶项: n = 2999
从 n = 113 开始使用指数近似
使用jacobi方法求解...
Jacobi方法达到最大迭代次数5000仍未收敛
最大偏差: 3.46e-01V
最大偏差位置: (x=0.505m, y=1.035m)
迭代次数: 5000
求解时间: 0.7881秒
2024-11-25 18:09:15.298 python[16107:377295]
2024-11-25 18:09:15.298 python[16107:377295]

使用gauss_seidel方法求解...
Gauss-Seidel方法达到最大迭代次数5000仍未收敛
最大偏差: 7.29e-02V
最大偏差位置: (x=0.495m, y=0.995m)
迭代次数: 5000
求解时间: 70.1102秒

使用sor方法求解...
使用最优松弛因子: ω = 1.952
SOR方法在第439次迭代收敛
最大偏差: 2.62e-02V
最大偏差位置: (x=1.000m, y=1.960m)
迭代次数: 439
求解时间: 7.0361秒
```

图 7: (c)：终端输出

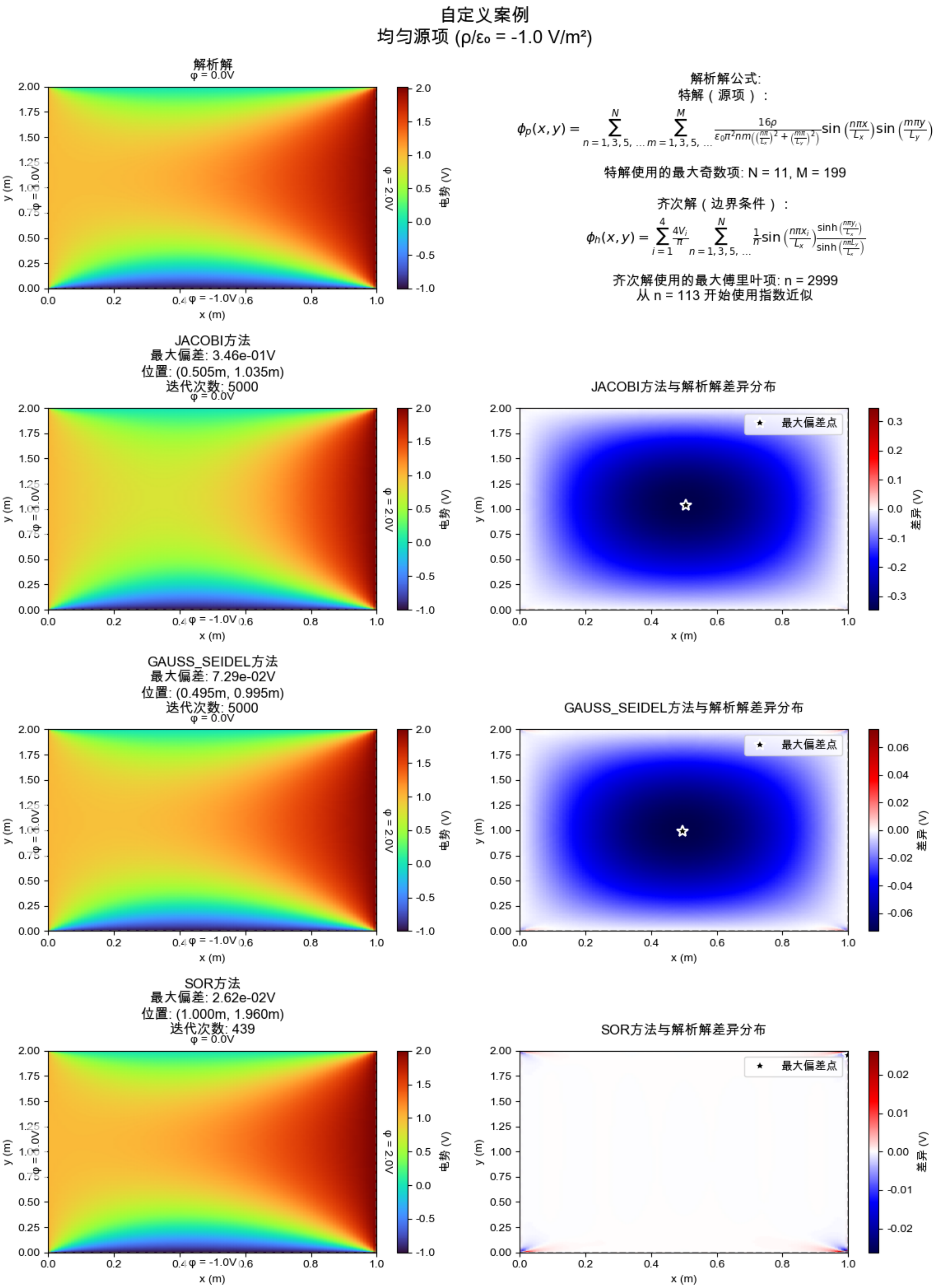

自定义案例
均匀源项 (ρ/ε₀ = -1.0 V/m²)
解析解
φ = 0.0V
φ = -1.0V
φ = 2.0V
x (m)
y (m)
电势 (V)
解析解公式:
特解（源项）：
特解使用的最大奇数项: N = 11, M = 199
齐次解（边界条件）：
齐次解使用的最大傅里叶项: n = 2999
从 n = 113 开始使用指数近似
JACOBI方法
最大偏差: 3.46e-01V
位置: (0.505m, 1.035m)
迭代次数: 5000
JACOBI方法与解析解差异分布
最大偏差点
差异 (V)
GAUSS_SEIDEL方法
最大偏差: 7.29e-02V
位置: (0.495m, 0.995m)
迭代次数: 5000
GAUSS_SEIDEL方法与解析解差异分布
SOR方法
最大偏差: 2.62e-02V
位置: (1.000m, 1.960m)
迭代次数: 439
SOR方法与解析解差异分布

图 8: (c)：计算结果及对比

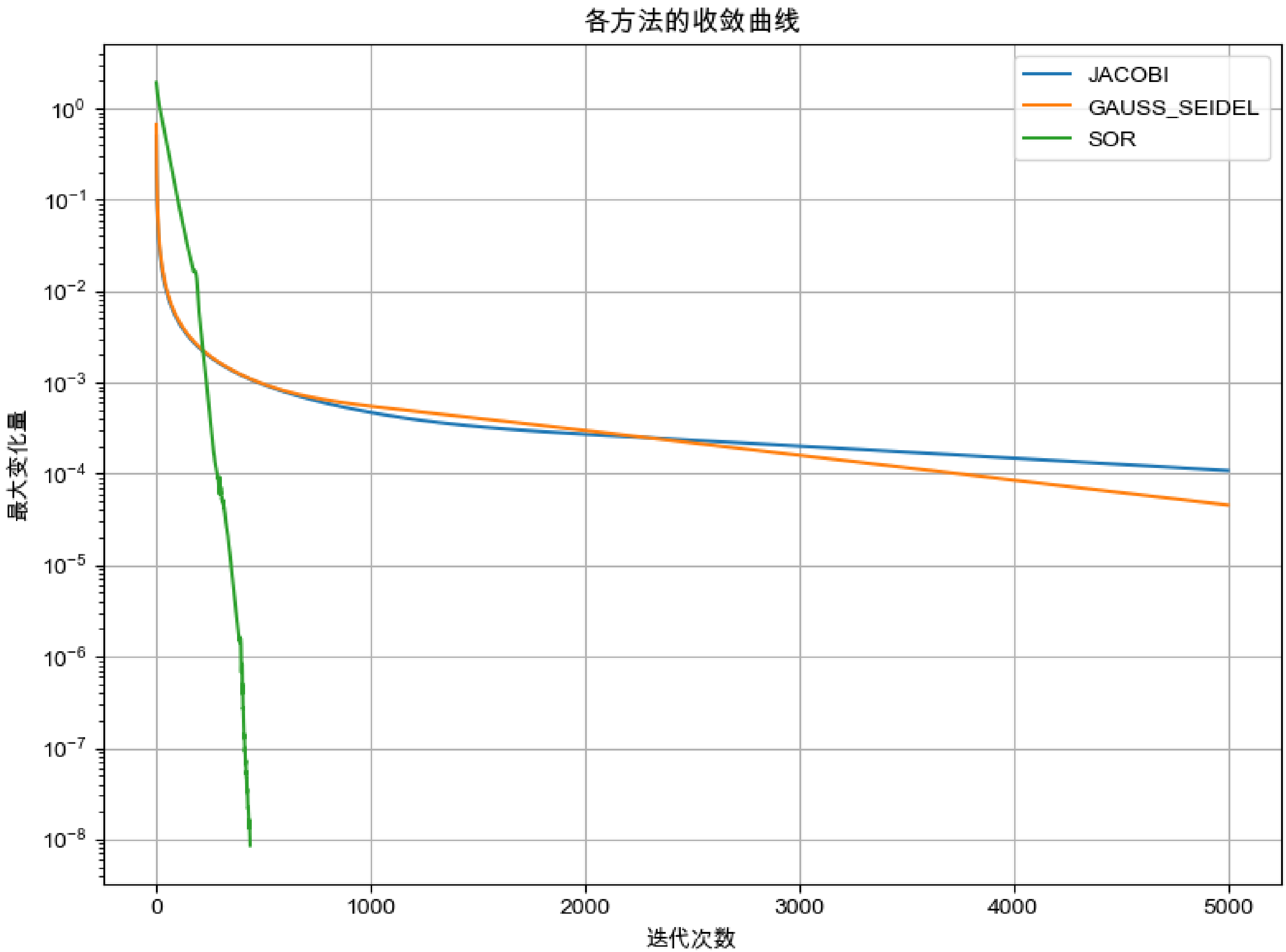


图 9: (c)：收敛曲线对比

2 题目 2：含时薛定谔方程求解

2.1 题目描述

Solve the time-dependent Schrödinger equation using both the Crank–Nicolson scheme and a stable explicit scheme. Consider the one-dimensional case and test it by applying it to the problem of a square well with a Gaussian initial state coming in from the left.

Hint: The Gaussian initial state could be expressed as:

$$\Psi(x,0)=\sqrt{\frac{1}{\pi}}\exp\left[ik_0x-\frac{(x-\xi_0)^2}{2}\right].$$

2.2 程序描述

2.3 伪代码

Powered by LaTeX pseudocode generator

2.4 结果示例

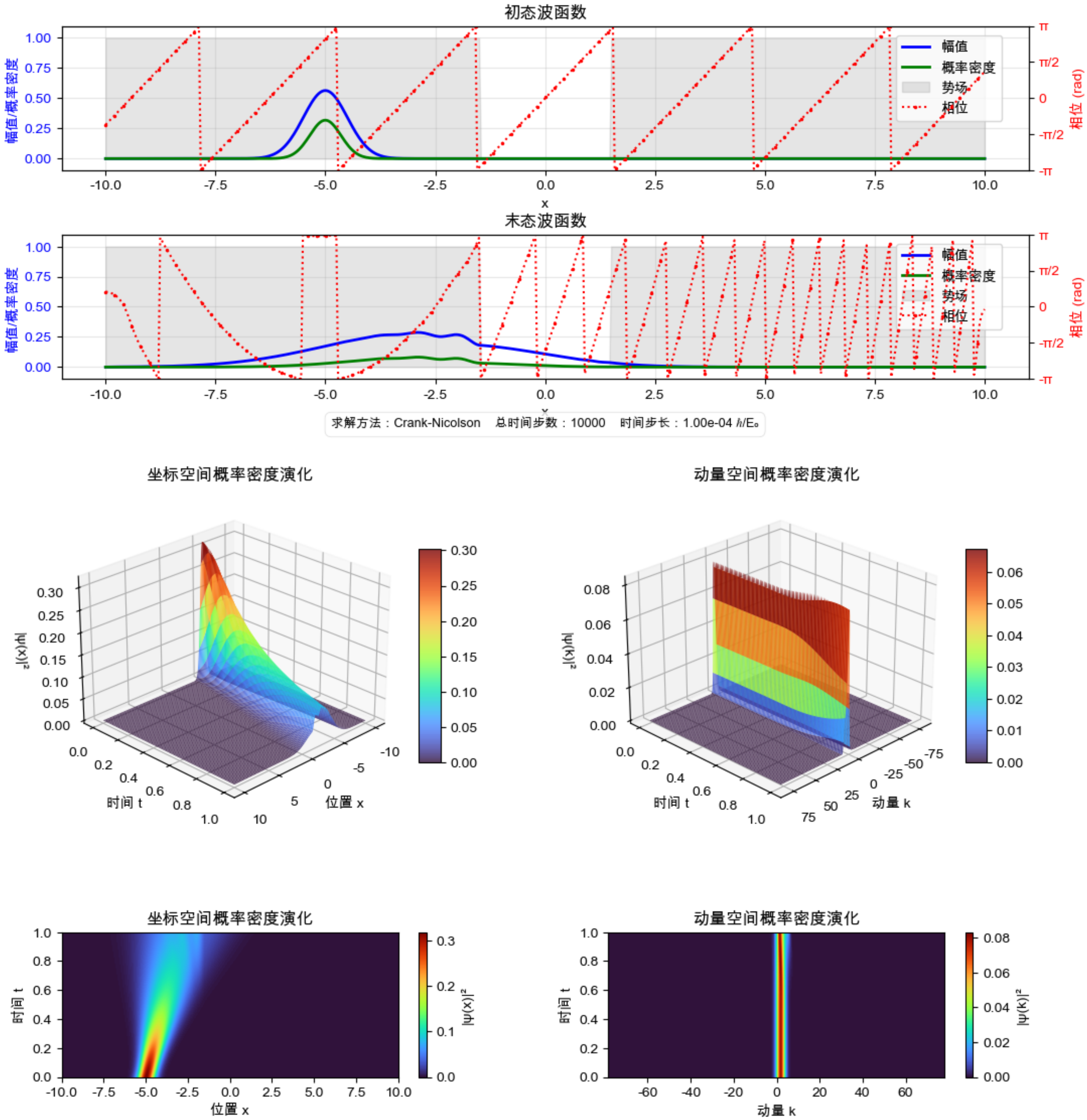


图 10: Crank–Nicolson 解法结果

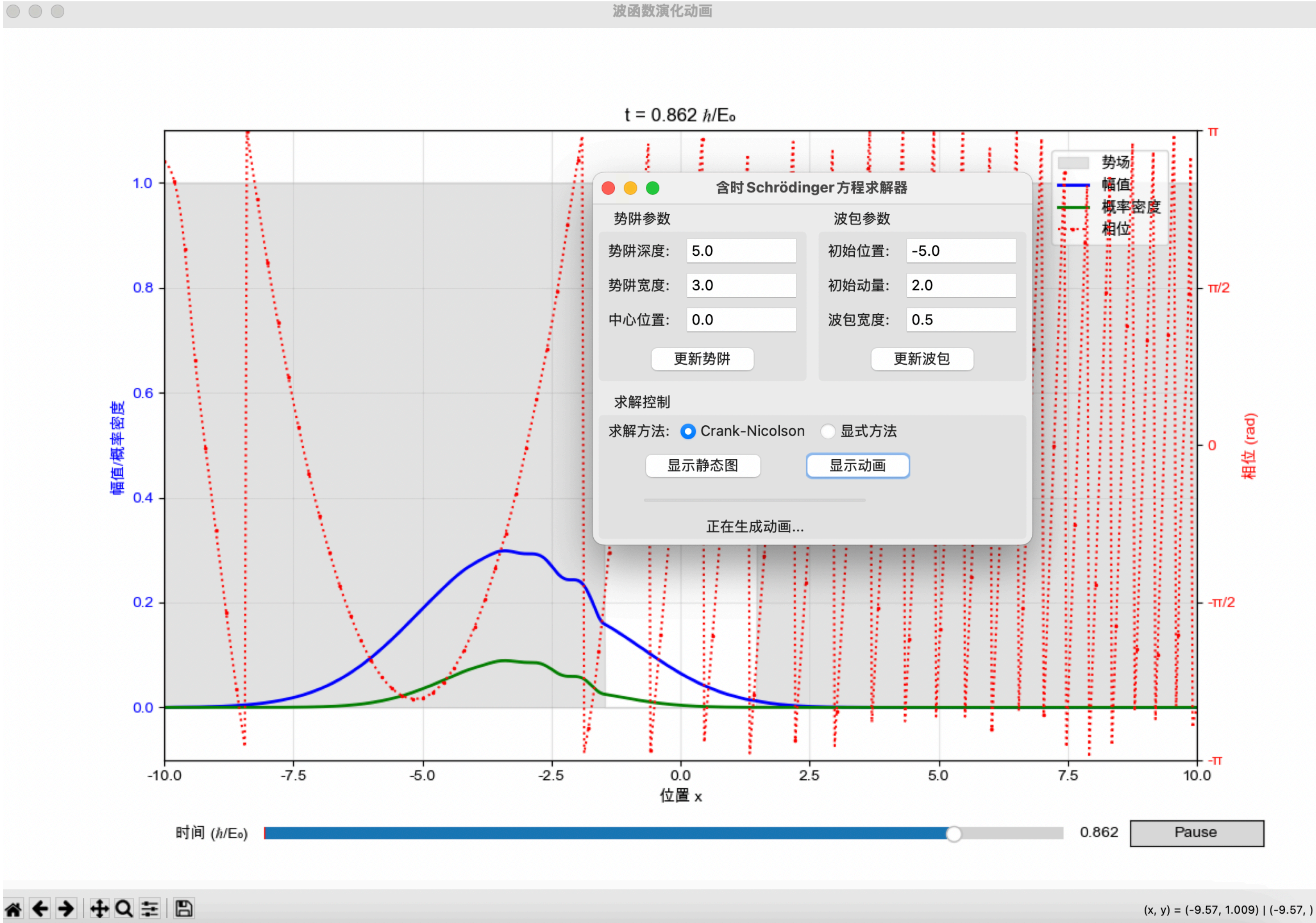


图 11: Crank–Nicolson 解法中间态（动画截图）

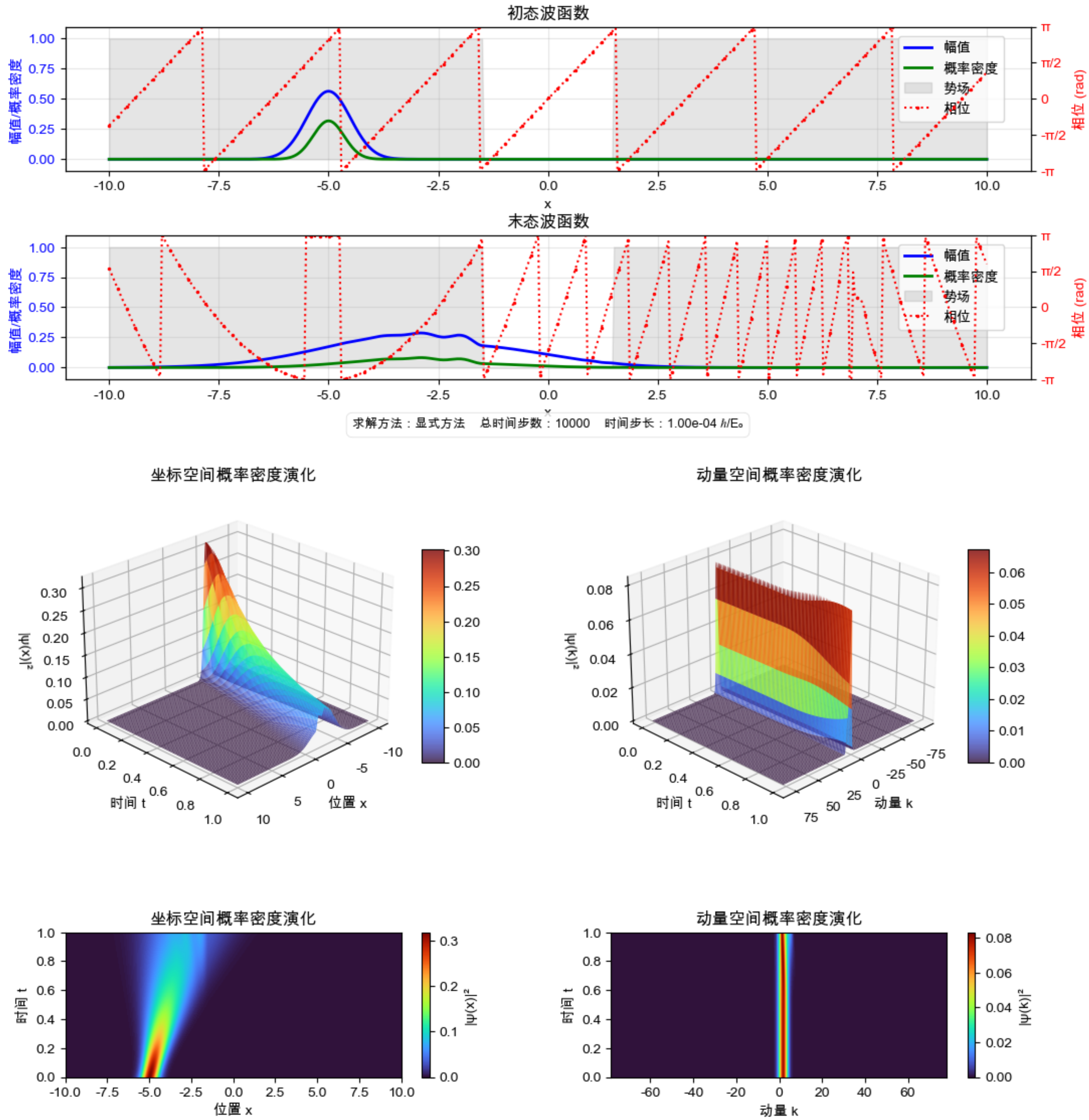

初态波函数
幅值
概率密度
势场
相位
幅值/概率密度
相位 (rad)
x
末态波函数
求解方法：显式方法　总时间步数：10000　时间步长：1.00e-04 ħ/E₀
坐标空间概率密度演化
时间 t
位置 x
动量空间概率密度演化
动量 k
|ψ(x)|²
|ψ(k)|²

图 12: 显式解法结果

3 题目 3：波动方程显式求解稳定条件

3.1 题目描述

Prove the stability condition of the explicit scheme of the 1D wave equation by performing Von Neumann stability analysis:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

If $c\Delta t/\Delta x \leq 1$, the explicit scheme is stable.

3.2 程序描述