

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) $\rho(x, y) = 0$, $\varphi(0, y) = \varphi(L_x, y) = \varphi(x, 0) = 0$, $\varphi(x, L_y) = 1 \text{ V}$, $L_x = 1 \text{ m}$, and $L_y = 1.5 \text{ m}$;
- (b) $\frac{\rho(x, y)}{\varepsilon_0} = 1 \text{ V/m}^2$, $\varphi(0, y) = \varphi(L_x, y) = \varphi(x, 0) = \varphi(x, L_y) = 0$, and $L_x = L_y = 1 \text{ m}$.

1.2 程序描述

1.3 伪代码

Powered by  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( $\rho/\epsilon_0 = 1 \text{ V/m}^2$ )，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:  $\omega = 1.899$ 
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

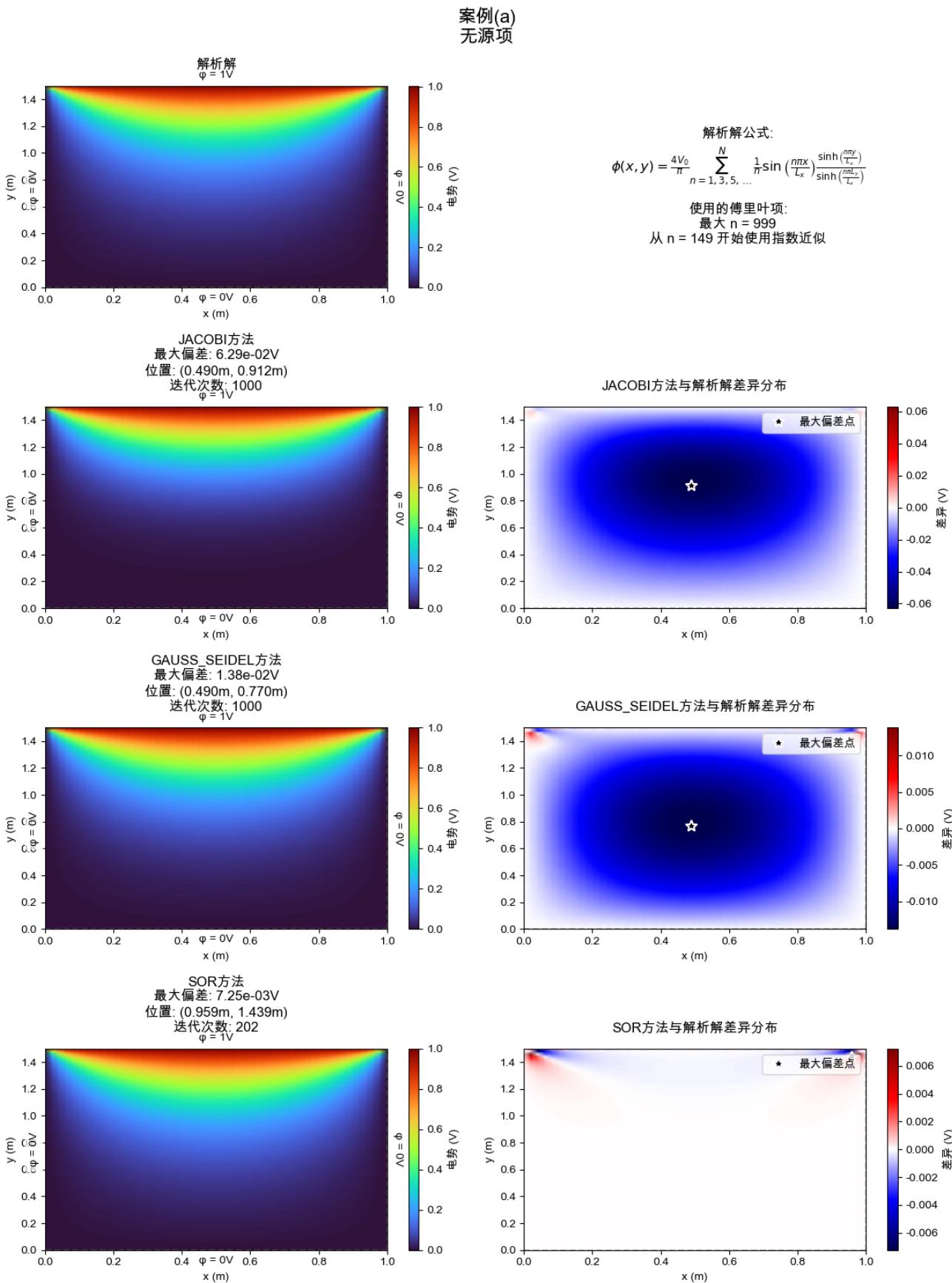


图 2: (a): 计算结果及对比

各方法的收敛曲线

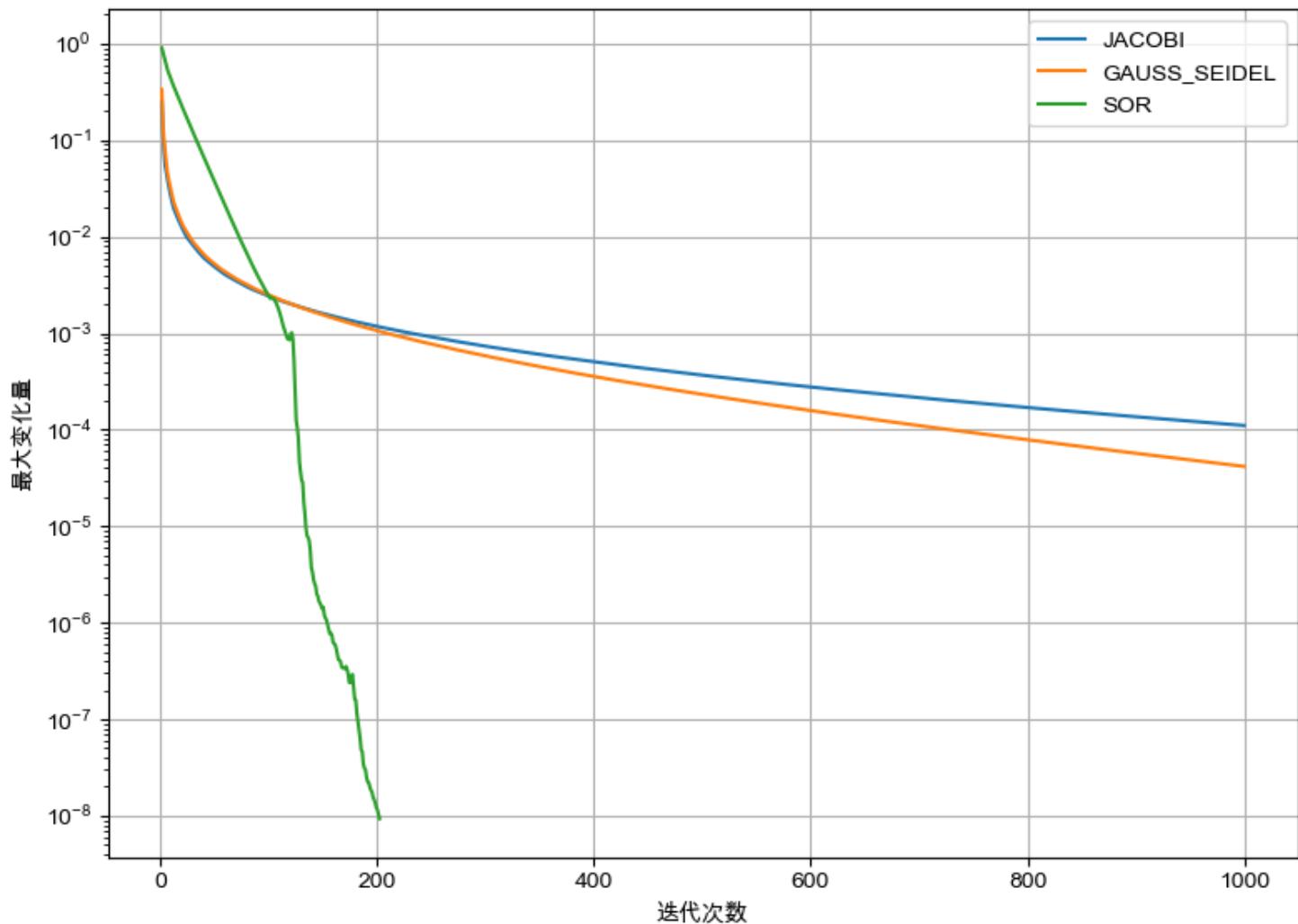


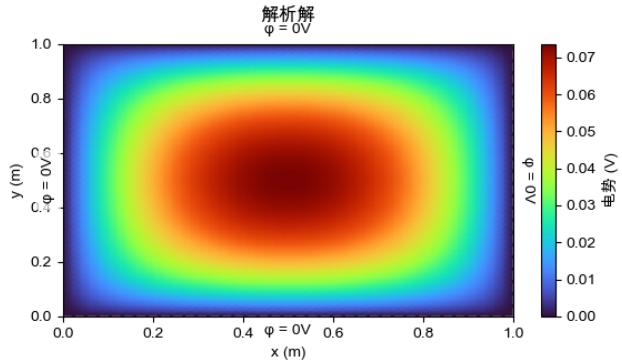
图 3: (a): 收敛曲线对比

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( $\rho/\epsilon_0 = 1 \text{ V/m}^2$ ), 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:  $\omega = 1.882$   
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 ($\rho/\epsilon_0 = 1.0 \text{ V/m}^2$)



解析解公式:

$$\phi(x, y) = \sum_{n=1, 3, 5, \dots}^N \sum_{m=1, 3, 5, \dots}^M \frac{16\rho}{\epsilon_0 \pi^2 n m \left(\left(\frac{n\pi}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{m\pi}{L_y} \right)^2 \right)} \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right)$$

使用的傅里叶项:
最大奇数项: N = 11, M = 49

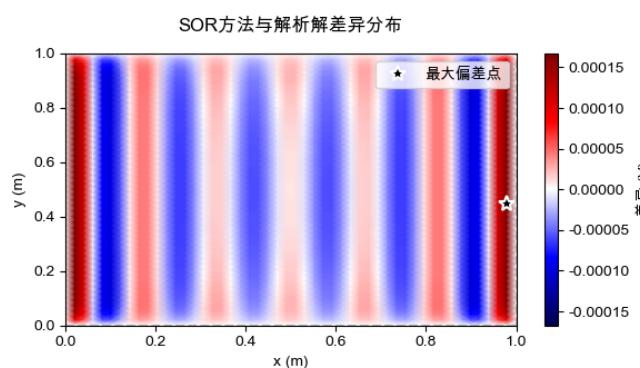
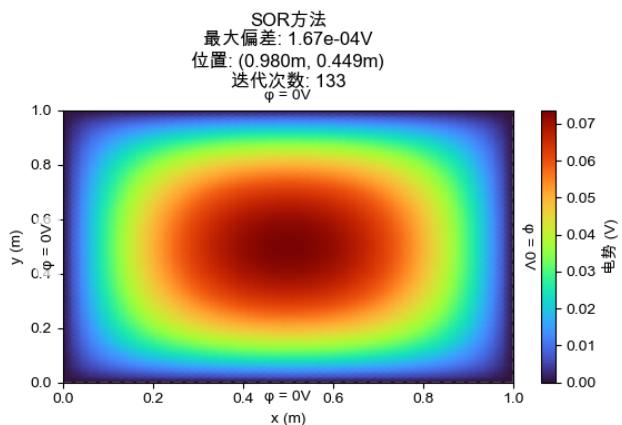
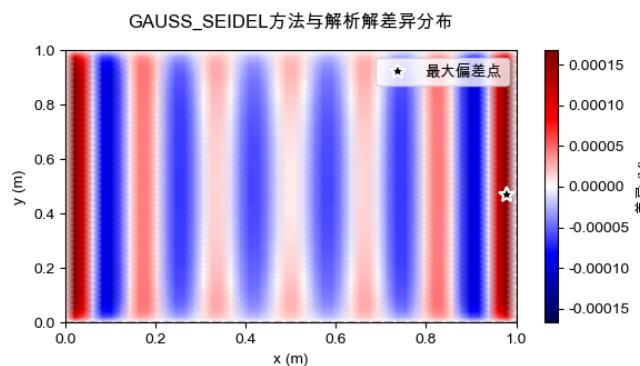
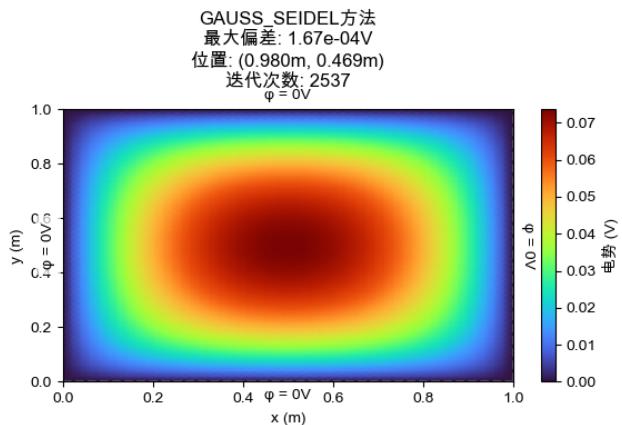
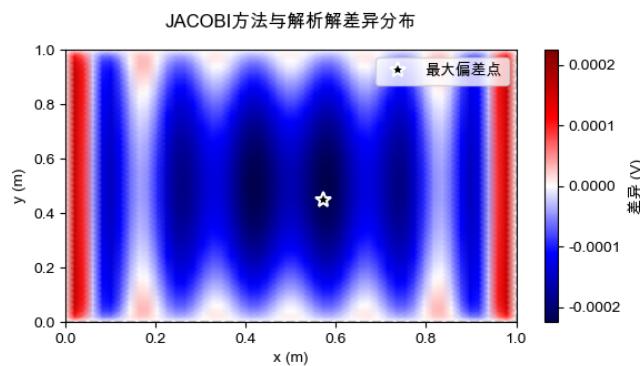
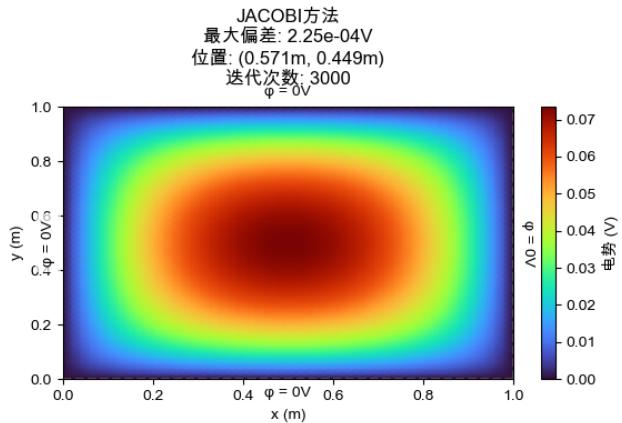


图 5: (b): 计算结果及对比

各方法的收敛曲线

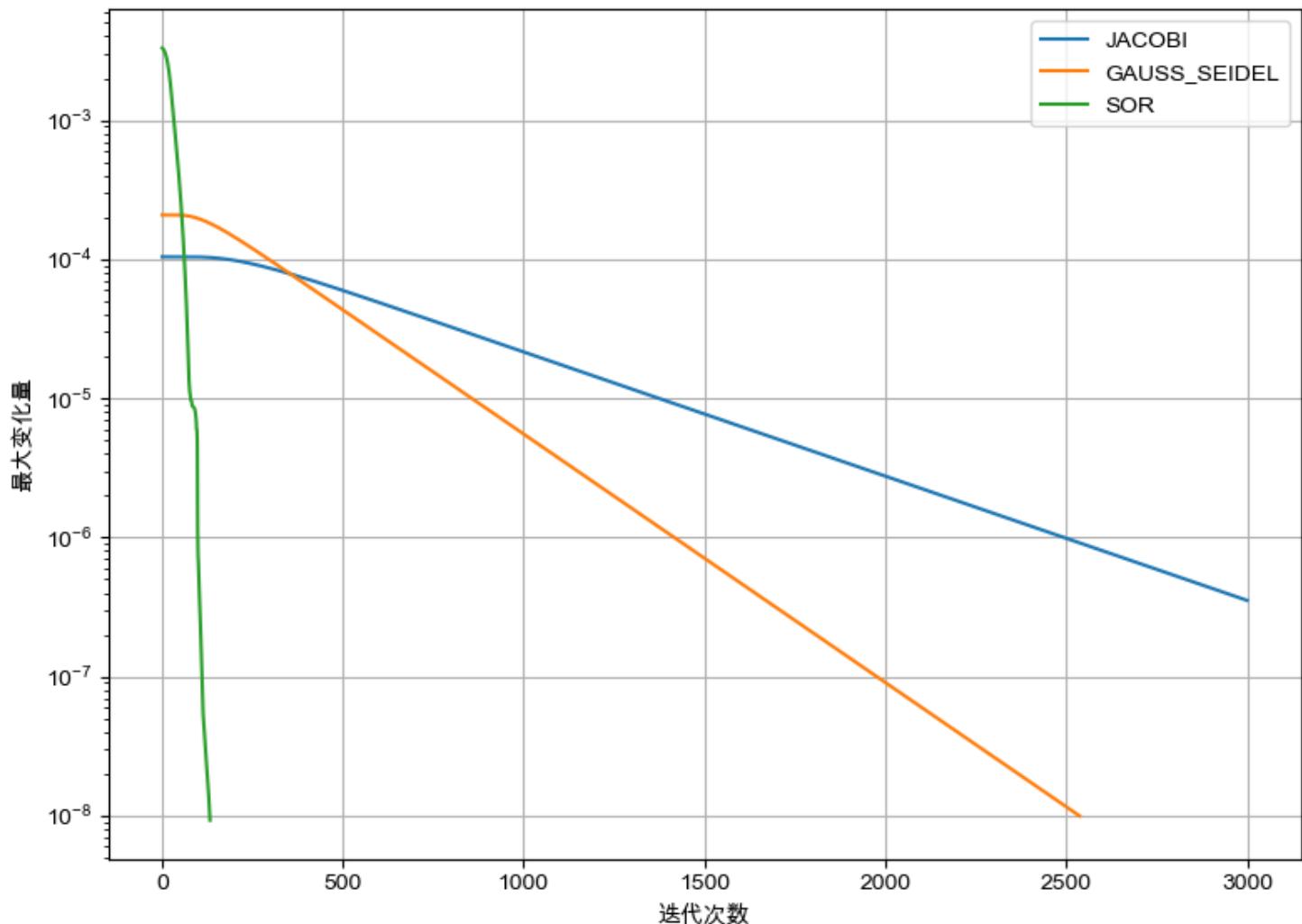


图 6: (b): 收敛曲线对比

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( $\rho/\epsilon_0 = 1 \text{ V/m}^2$ ), 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 ( $\rho/\epsilon_0$ ): -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

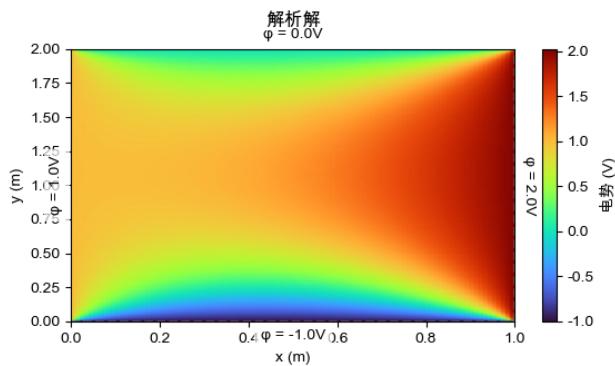
使用 jacobi 方法求解...
Jacobi方法达到最大迭代次数5000仍未收敛
最大偏差: 3.46e-01V
最大偏差位置: (x=0.505m, y=1.035m)
迭代次数: 5000
求解时间: 0.7881秒
2024-11-25 18:09:15.298 python[16107:377295]
2024-11-25 18:09:15.298 python[16107:377295]

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:  $\omega = 1.952$ 
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 ($\rho/\epsilon_0 = -1.0 \text{ V/m}^2$)



解析解公式:
特解 (源项):

$$\phi_p(x, y) = \sum_{n=1,3,5,\dots}^N \sum_{m=1,3,5,\dots}^M \frac{16\rho}{\epsilon_0\pi^2 nm(\frac{n\pi}{L_x})^2 + (\frac{m\pi}{L_y})^2} \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right)$$

特解使用的最大奇数项: $N = 11, M = 199$

齐次解 (边界条件):

$$\phi_h(x, y) = \sum_{i=1}^4 \frac{4V_i}{\pi} \sum_{n=1,3,5,\dots}^N \frac{1}{n} \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \frac{\sinh\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)}{\sinh\left(\frac{n\pi L_y}{L_x}\right)}$$

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

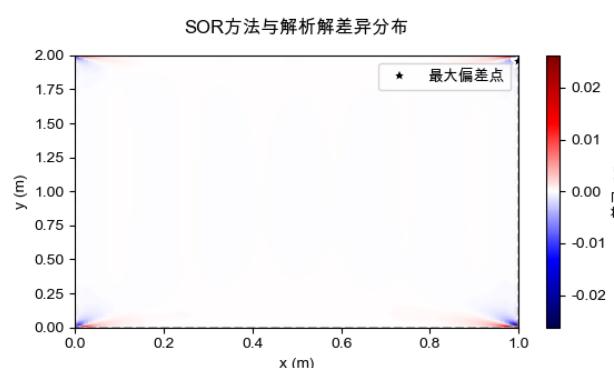
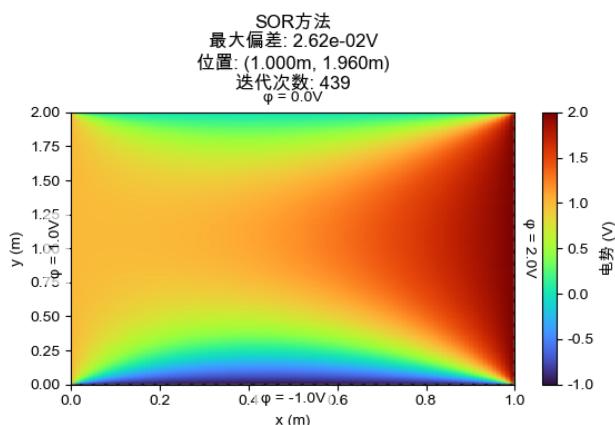
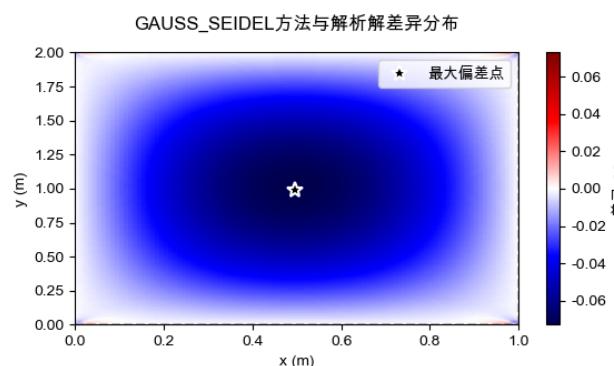
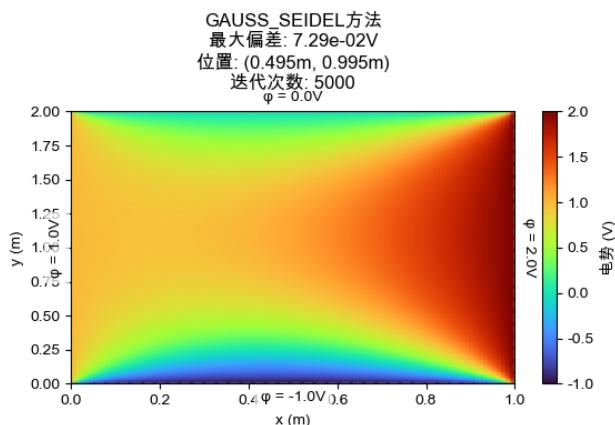
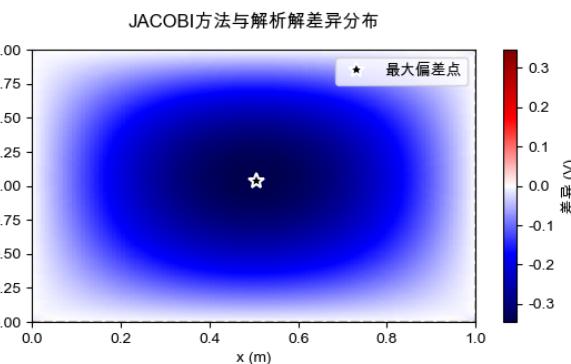
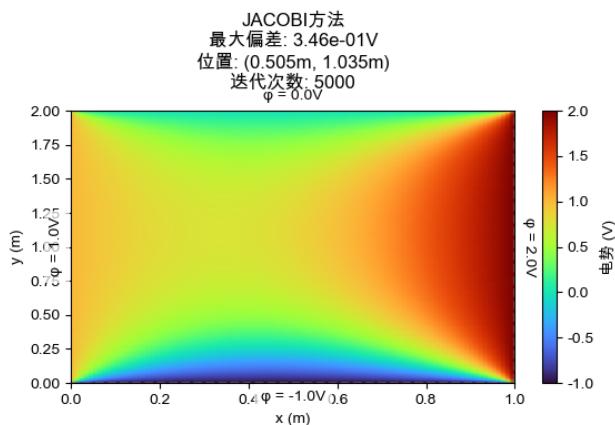


图 8: (c): 计算结果及对比

各方法的收敛曲线

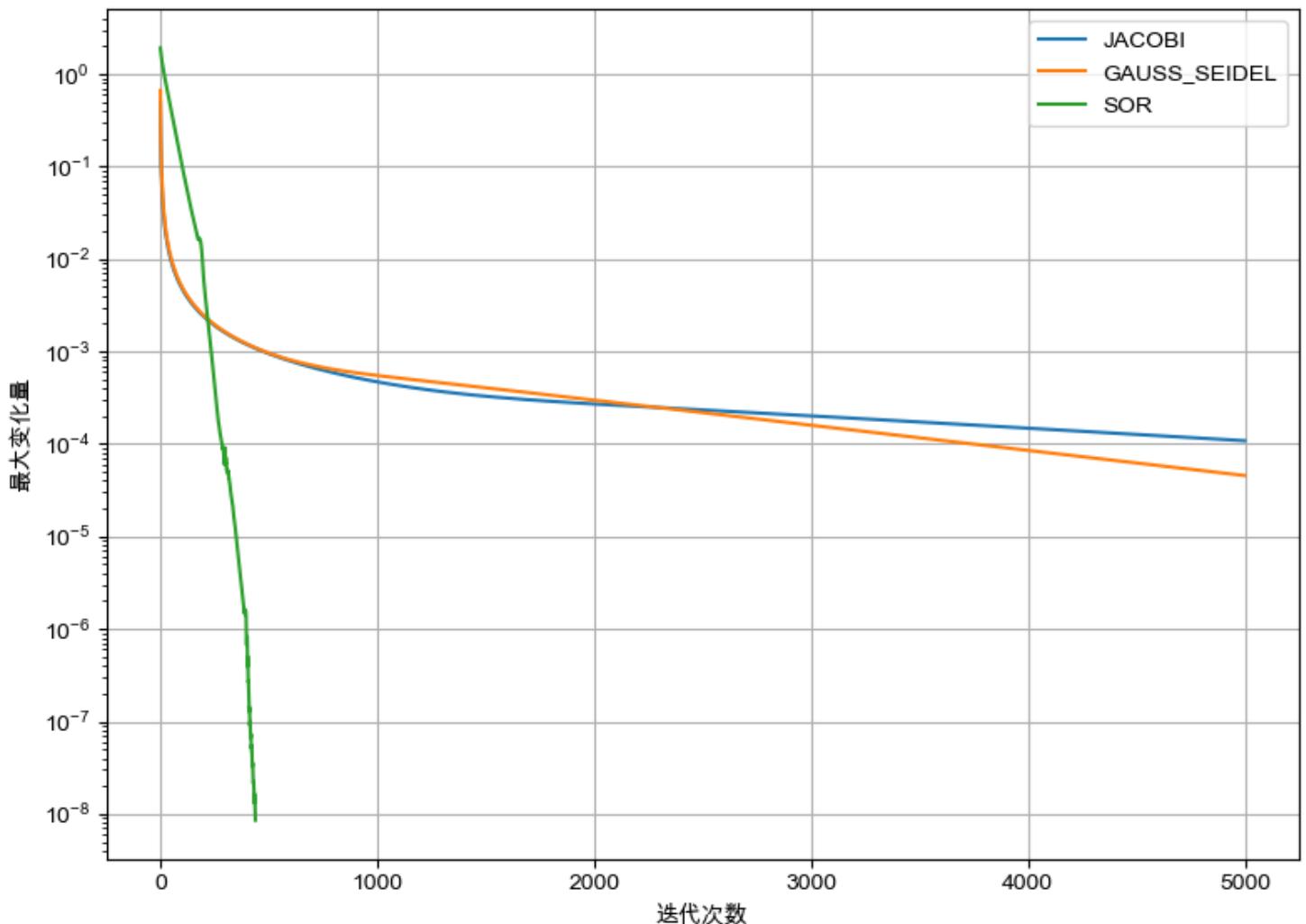


图 9: (c): 收敛曲线对比

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:

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \exp \left[ik_0 x - \frac{(x - \xi_0)^2}{2} \right].$$

2.2 程序描述

2.3 伪代码

2.4 结果示例

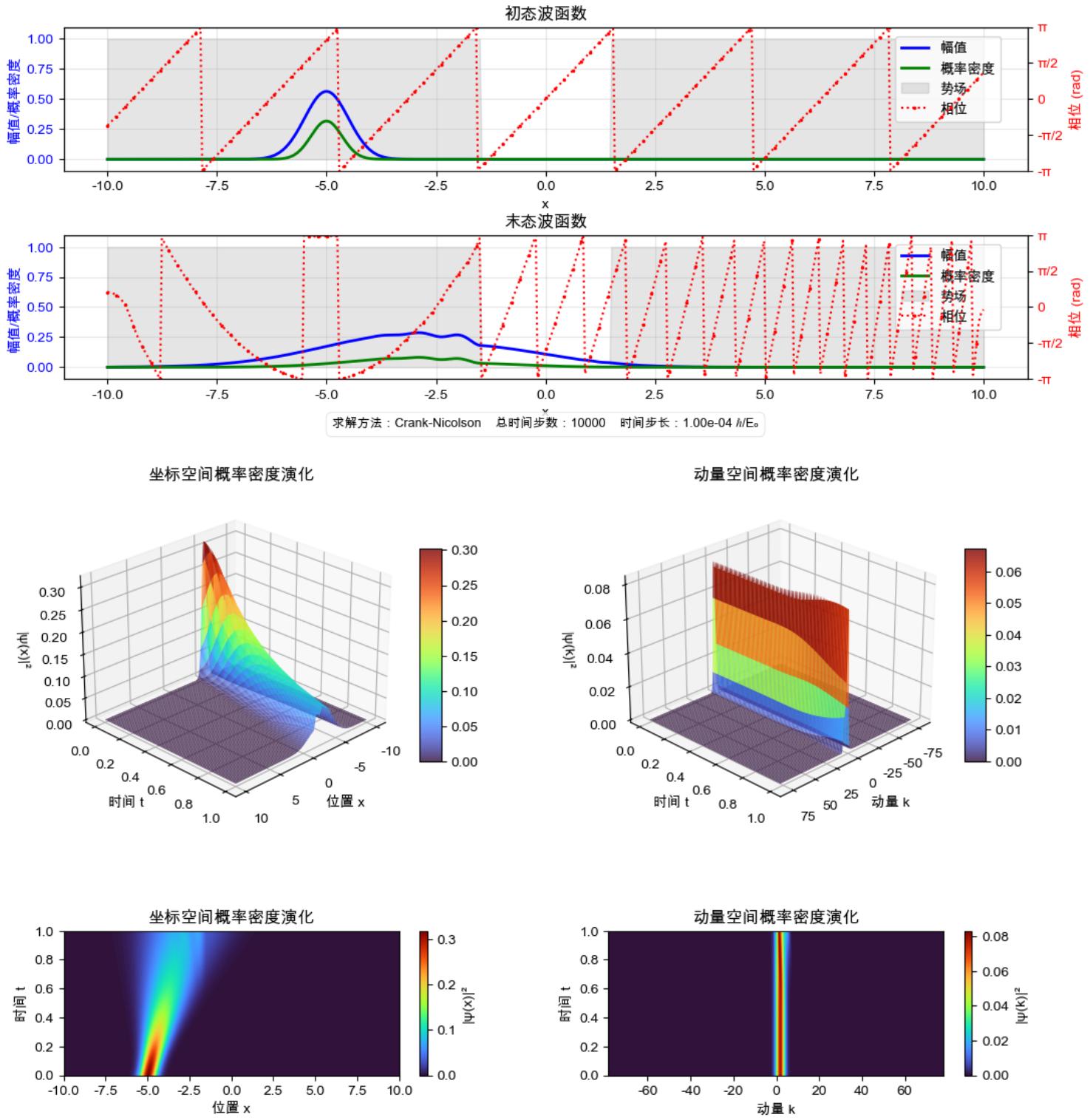


图 10: Crank–Nicolson 解法结果

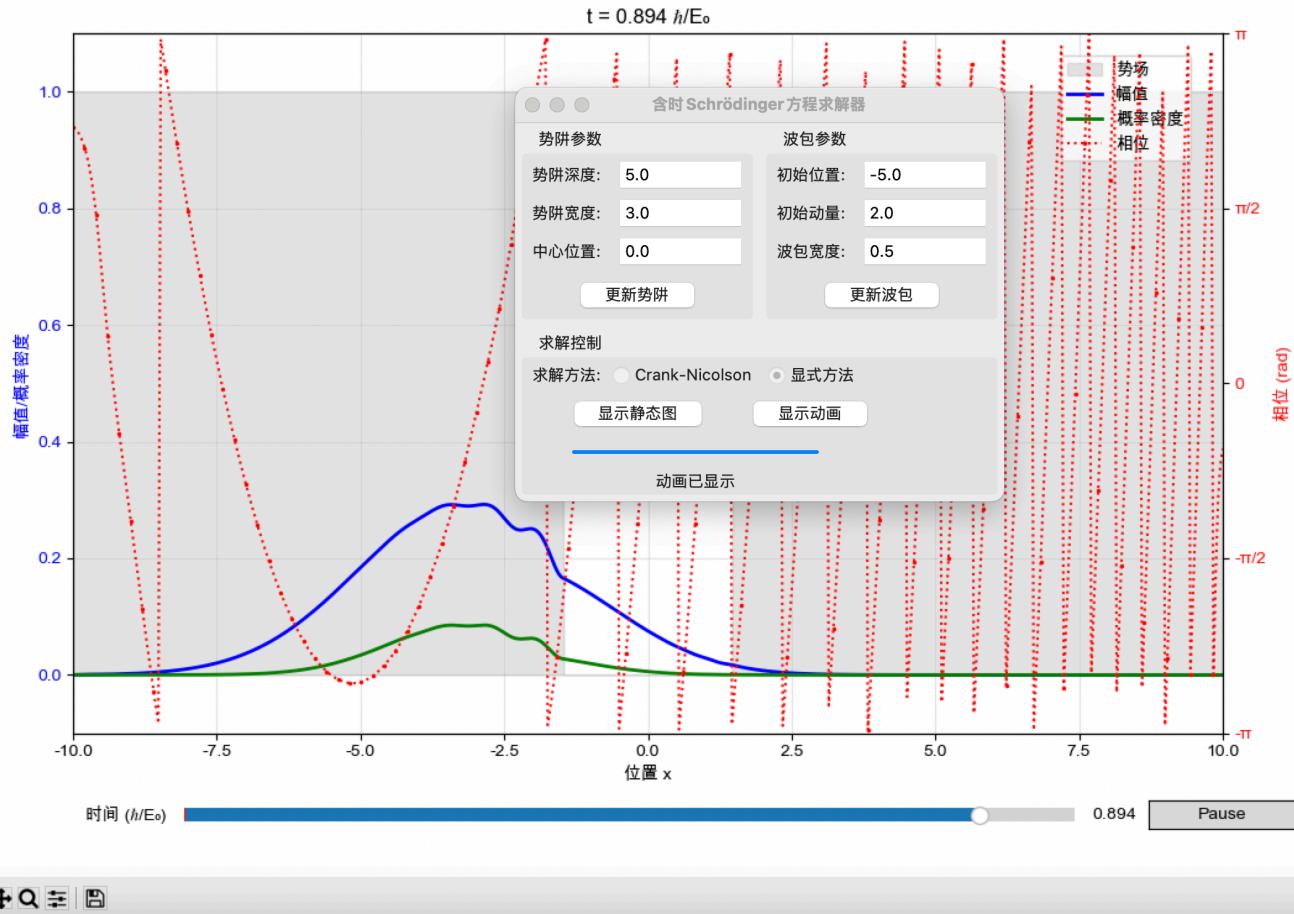
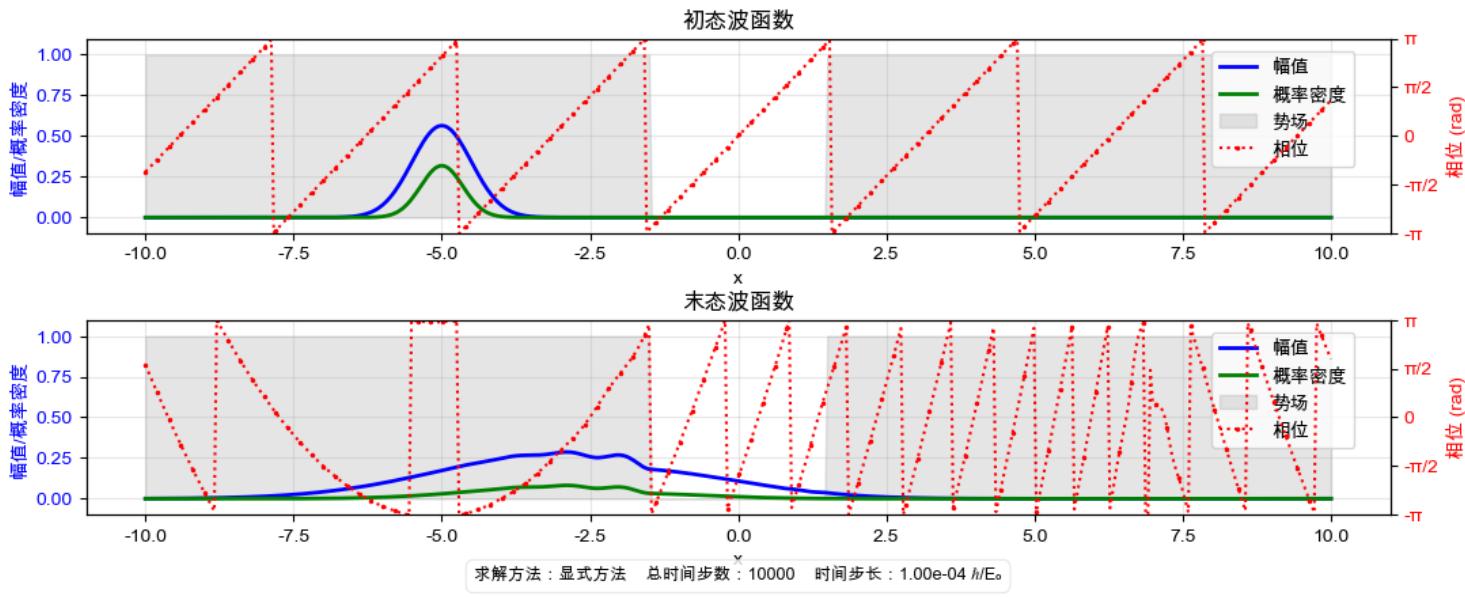
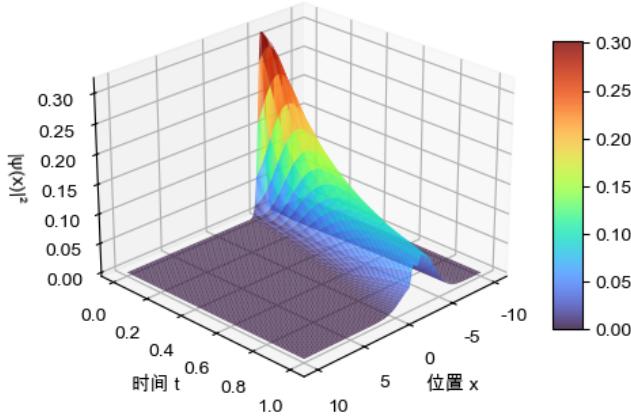


图 11: Crank-Nicolson 解法中间态 (动画截图)



坐标空间概率密度演化



动量空间概率密度演化

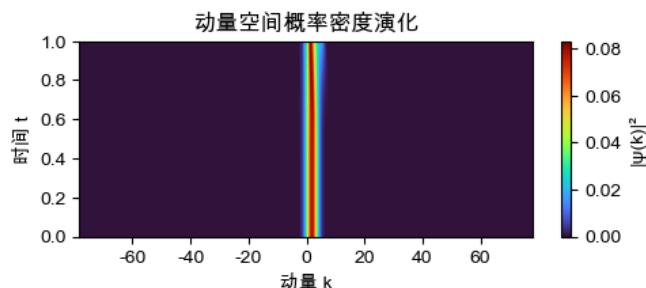
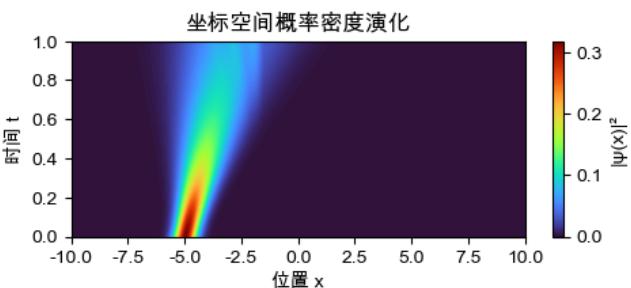
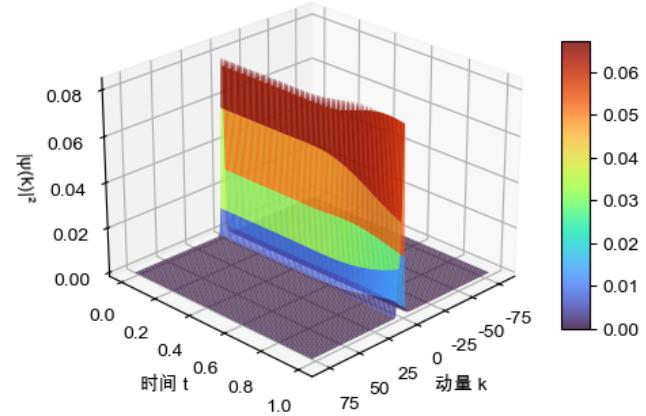


图 12: 显式解法结果

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