计算物理第一次作业

林祥 1120152685

1.1第 1 题

题 1：加农炮弹的运动可以由如下方程描述

$$m\frac{\mathrm{d}^2\vec{r}}{\mathrm{d}t^2}=\vec{F}_g+\vec{F}_{\mathrm{drag}}$$

其中，$\vec{F}_g$为重力，阻力考虑为 $\vec{F}_{\mathrm{drag}}=-B_2|v|\vec{v}$。炮弹初始位置为(0,0)，炮弹初始速率为 500m/s，$\mathrm{B_2/m}=2\times10^{-5}/m$

a) 通过计算，考察无阻力情况下炮弹在不同发射角下的轨迹，并通过解析解验证计算结果；
b) 计算考虑阻力情况下的炮弹轨迹，选定一个发射角，考察计算结果与时间步长的关系；
c) 在考虑阻力情况下，如果要击中坐标位于(15km, 3km)处的目标，如何选择发射角？

1.1.1 基本方案

考虑炮弹轨迹在 x-z 平面，可将动力学方程分解如下：

$$\begin{cases}\dfrac{d^2x}{dt^2}=-\dfrac{B_2|v|v_x}{m}\\ \dfrac{d^2z}{dt^2}=\text{-g-}\dfrac{B_2|v|v_z}{m}\end{cases}$$

对方程组进行降阶，变为一阶常微分方程组：

$$\begin{cases}\dfrac{dx}{dt}=v_x\\ \dfrac{dz}{dt}=v_z\\ \dfrac{dv_x}{dt}=-\dfrac{B_2|v|v_x}{m}\\ \dfrac{dv_z}{dt}=\text{-g-}\dfrac{B_2|v|v_z}{m}\end{cases}$$

初始条件为

$x_0=0;z_0=0;v_{x0}=v_0\cos\theta;v_{z0}=v_0\sin\theta$，$v_0$为初始速度$500m/s$，$\theta$为初始速度与x轴夹角

接下来采用改进欧拉法进行数值求解，显示欧拉法作为预测，并用梯形公式校正，基本公式为:

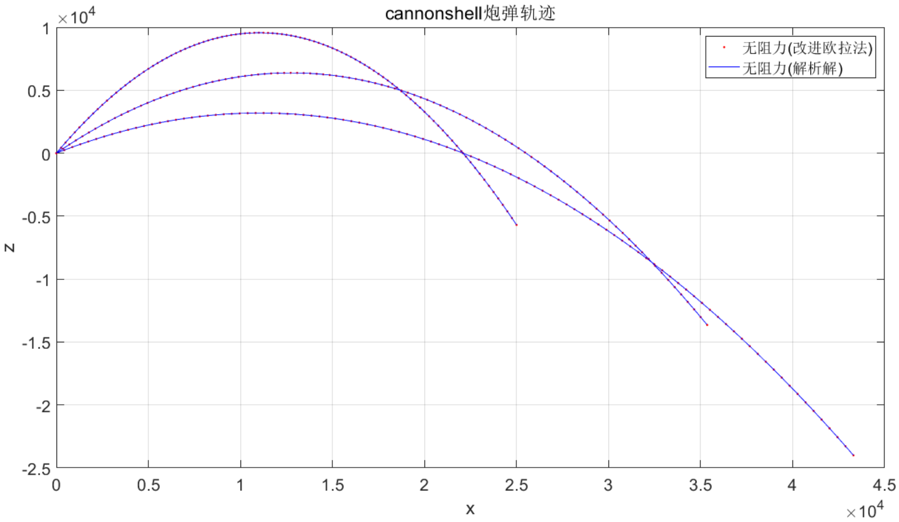
$$\begin{cases}p1(n+1)=x(n)+dt\cdot v_x(n)\\ p2(n+1)=z(n)+dt\cdot v_z(n)\\ p3(n+1)=v_x(n)-dt\cdot\dfrac{B_2|v|v_x(n)}{m}\\ p4(n+1)=v_z(n)-dt\cdot\left(g+\dfrac{B_2|v|v_z(n)}{m}\right)\end{cases}$$

$$
\begin{cases}
x(n+1)=x(n)+\dfrac{dt}{2}\cdot(v_x(n)+p3(n+1)) \\
z(n+1)=z(n)+\dfrac{dt}{2}\cdot(v_z(n)+p4(n+1)) \\
v_x(n+1)=v_x(n)-\dfrac{dt}{2}\cdot(\dfrac{B_2|v|v_x(n)}{m}+\dfrac{B_2|v|p3(n+1)}{m}) \\
v_z(n+1)=v_z(n)-\dfrac{dt}{2}\cdot(2g+\dfrac{B_2|v|v_z(n)}{m}+\dfrac{B_2|v|p4(n+1)}{m}) \\
|v|=\sqrt{(v_x{}^2(n+1)+v_z{}^2(n+1))}
\end{cases}
$$

通过带入初始条件，在所求时间内循环求解。

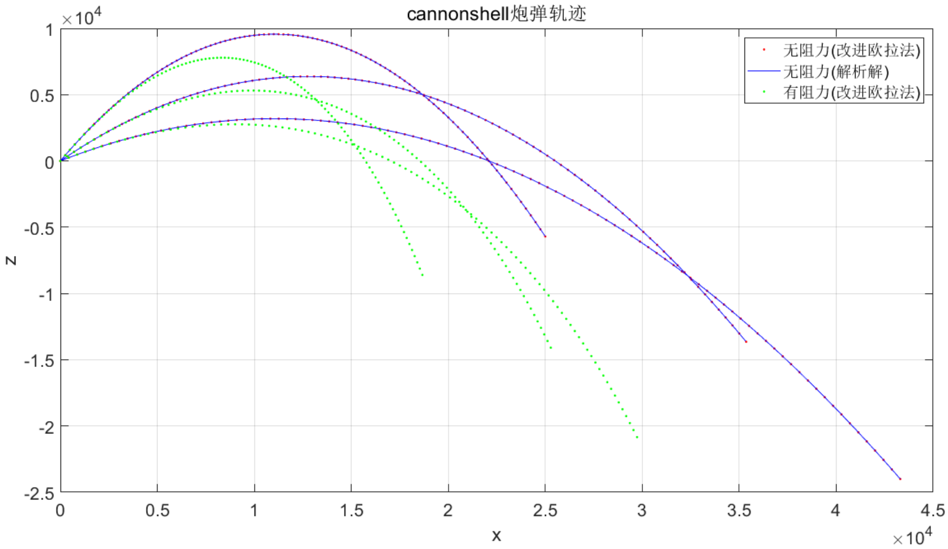
1.1.2 无阻力下炮弹轨迹

设置炮弹发射角为 30°，45°，60°，炮弹轨迹如下

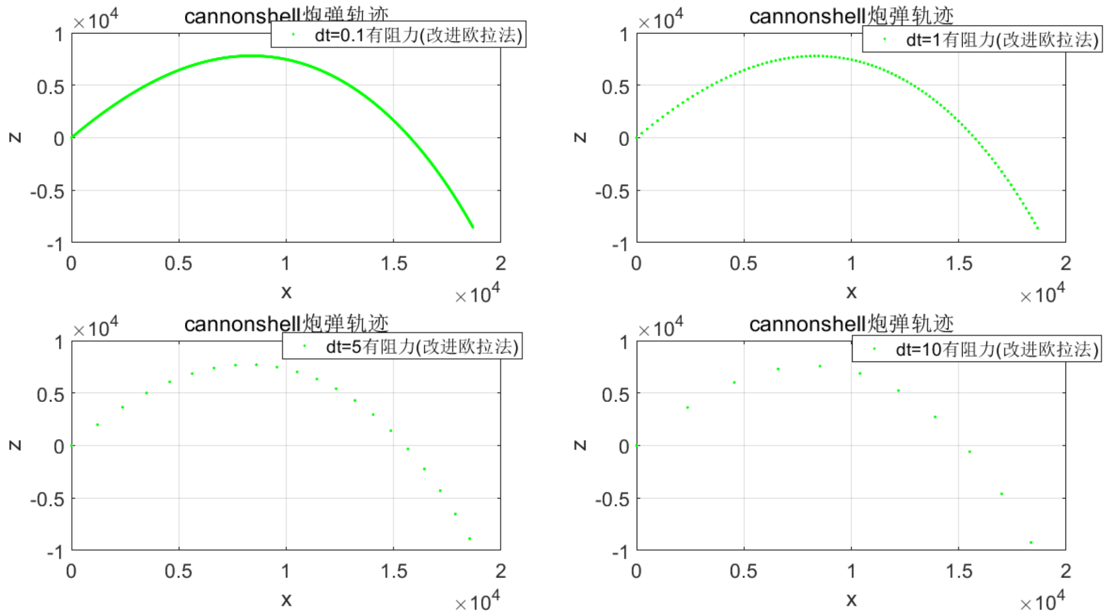


1.1.3 考虑阻力下的炮弹轨迹

首先比较一下 3 个发射角下有无阻力情况的炮弹轨迹



选择发射角为 60°，比较不同时间步长下的轨迹图，可以看出，步长越大，误差越大。

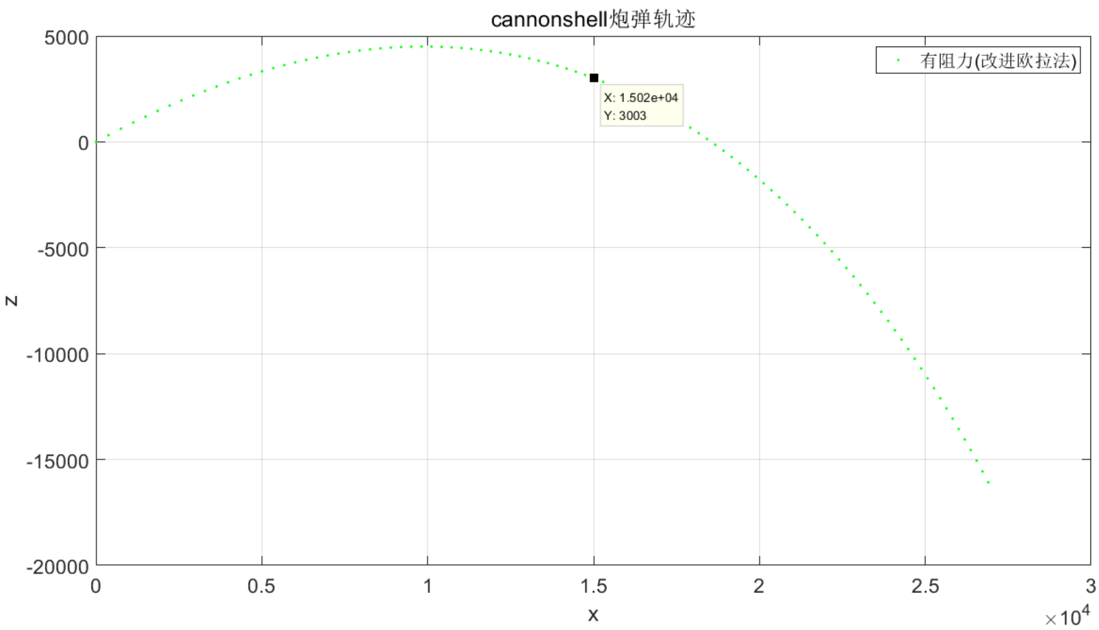


1.1.4 寻找可击中(15k,3k)的发射角

以 arctan(1/5)为初始发射角，通过打靶法，来寻找合适的发射角。

通过循环遍历寻找 x 最接近 15k 的时刻，判断该时刻 z 坐标，然后调整发射角，重新计算轨迹，直到发射角满足误差要求。计算结果如下，

'有阻力下要击中(15k,3k) ,发射角为 40.33 度，误差不超过 0.01 度,迭代次数为 35'



1.2第 2 题

题 2：存在空气阻力及驱动力情况下的单摆运动由如下简化方程描述

$$\frac{\mathrm{d}^2\theta}{\mathrm{d}t^2}+q\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t}+\sin\theta=b\cos\omega_0 t.$$

a) 采用欧拉法及二阶(或四阶)龙格-库塔法，计算无阻力、无驱动力情况下理想单摆的角度、角速度随时间的变化关系；

b) 选取不同时间步长，考察两种计算方法得到的单摆运动过程机械能守恒情况；

c) 计算存在阻力及驱动力下，单摆的角度、角速度随时间的变化关系；其中各参数分别选取 $q=0.5$， $b=0.9$， $\omega 0=2/3$，$q=0.5$， $b=1.15$， $\omega 0=2/3$

1.2.1 基本方案

对方程组进行降阶，变为一阶常微分方程组：

$$\begin{cases} \dfrac{d\theta}{dt}=w \\ \dfrac{dw}{dt}=b\cos\omega_0 t-qw-\sin\theta \end{cases}$$

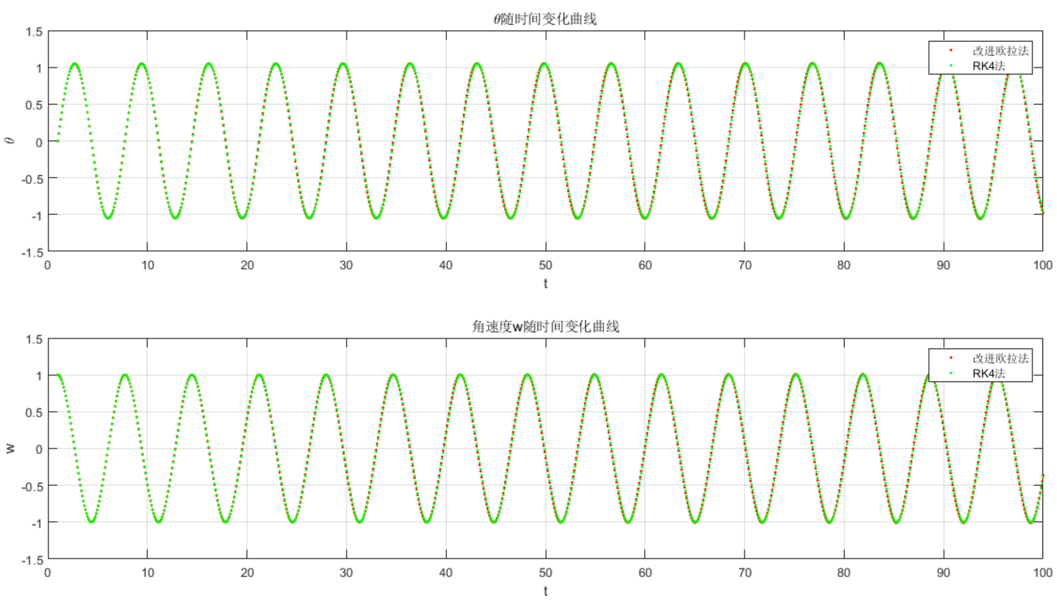
初始条件设为 $\theta_0=0, w_0=1$；　分别用欧拉法和 4 阶 RK 法来计算，欧拉法计算公式如下

$$\begin{cases} p1(i+1)=\theta(i)+h\cdot w(i) \\ p2(i+1)=w(i)+h\cdot\left(b\cos\left(\omega_0 t(i)\right)-qw(i)-\sin\theta(i)\right) \\ \theta(i+1)=\theta(i)+\dfrac{h}{2}\cdot\left(w(i)+p2(i+1)\right) \\ w(i+1)=w(i)+\dfrac{h}{2}\cdot\left(b\cos\left(\omega_0 t(i)\right)+b\cos\left(\omega_0 t(i+1)\right)-qw(i)-q\cdot p2(i+1)-\sin\theta(i)-\sin\left(p1(i+1)\right)\right) \end{cases}$$

4阶RK法计算公式如下

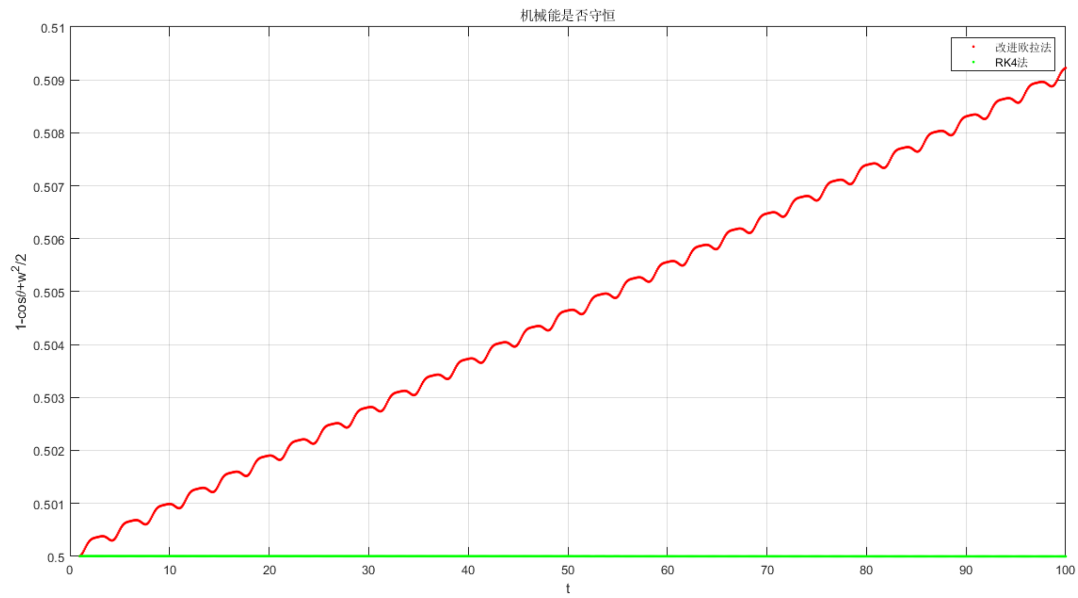
$$\begin{cases} k_1=f(t,y) \\ k_2=f(t+\dfrac{h}{2},y+\dfrac{h}{2}\cdot k_1) \\ k_3=f(t+\dfrac{h}{2},y+\dfrac{h}{2}\cdot k_2) \\ k_4=f(t+h,y+h\cdot k_3) \\ y=y+\dfrac{h}{6}\cdot\left(k_1+2k_2+2k_3+k_4\right) \end{cases}\qquad \begin{aligned} & y=\begin{bmatrix}\theta & w\end{bmatrix} \\ & f(t,y)=\begin{bmatrix}w & b\cos\omega_0 t-qw-\sin\theta\end{bmatrix} \end{aligned}$$

1.2.2 理想单摆速度和加速度随时间的变化

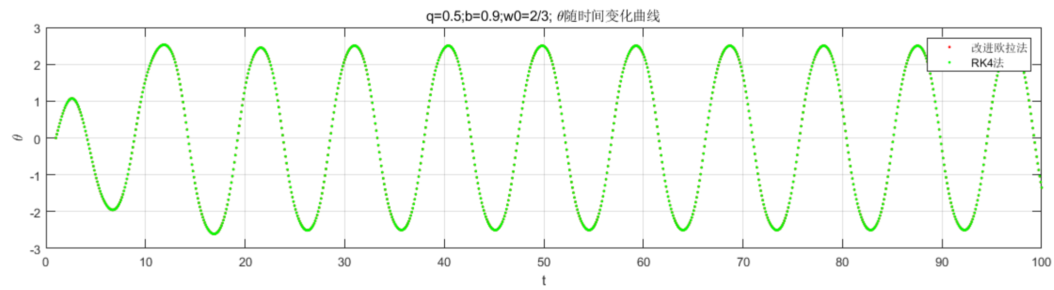


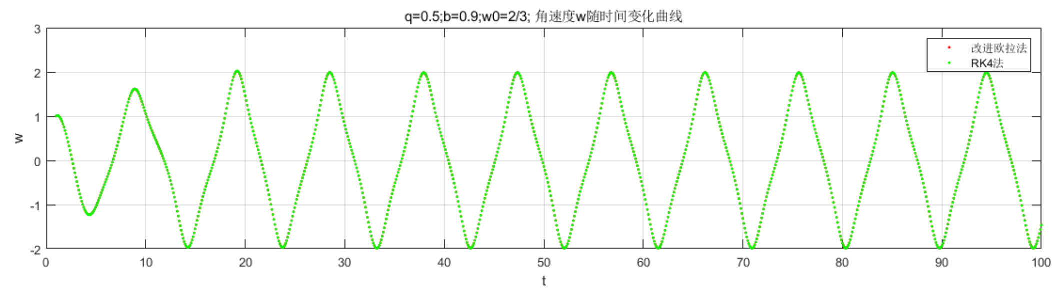
1.2.3 机械能是否守恒

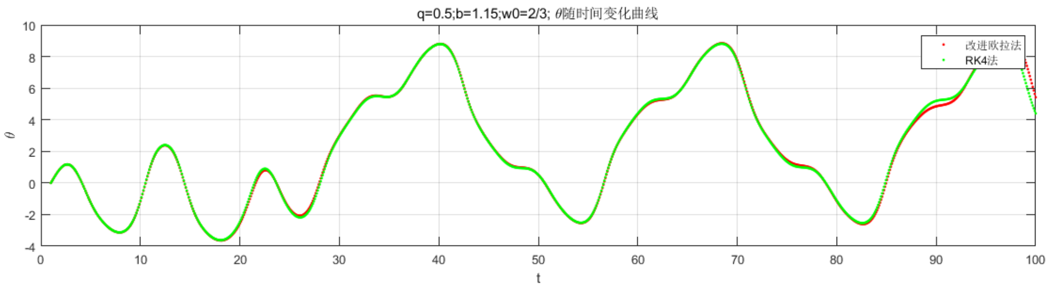
理想单摆动能为$\frac{1}{2}mw^2l^2$，势能为$mg(l-l\cos\theta)$，本题中$g=l$，故检验机械能是否守恒只需查看$1-\cos\theta+\frac{1}{2}w^2$是否守恒，结果如下，可以看到 4 阶 RK 法得到结果基本守恒，改进欧拉法结果较差，并且随着时间推移，误差越来越大。

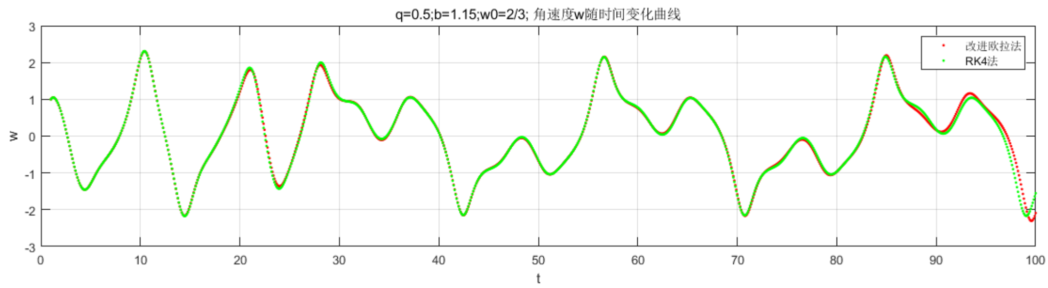


1.2.4 考虑空气阻力和驱动力下单摆的角度和角速度









1.3第 3 题

题 3: 一维稳态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_n(x)+V(x)\psi_n(x)=E_n\psi_n(x)$$

考虑取$s=\frac{x}{L}$，$\varepsilon_n=\frac{E_n}{E}$，$\bar{E}=\frac{\hbar^2}{mL^2}$，$v(s)=\frac{V(x)}{E}$得归一化方程

$$-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2}\varphi_n(s)+v(s)\varphi_n(s)=\varepsilon_n\varphi_n(s)$$

a) 取$v(s)=0,\ 0\le s\le 1$，及$v(s)=\infty,\ s<0\ \text{ or }\ s>1$. 采用 Numerov 方法结合打靶法计算其三个本征值及对应的本征函数

b) 取$v(s)=-\left(1-\frac{s^2}{2}\right)$. 计算其三个本征值及对应的本征函数

1.3.1 基本方案

Schrodinger 方程可写为 $y''+2(\varepsilon-v(s))y=0$

Numerov 公式 $\left(1+\frac{h^2}{12}k_{n+1}^2\right)y_{n+1}=2\left(1-\frac{5h^2}{12}k_n^2\right)y_n-\left(1+\frac{h^2}{12}k_{n-1}^2\right)y_{n-1}$

其中，$\mathrm{k}^2=2(\varepsilon-v(s))$

边值条件为 $y_0=0; y_n=0$

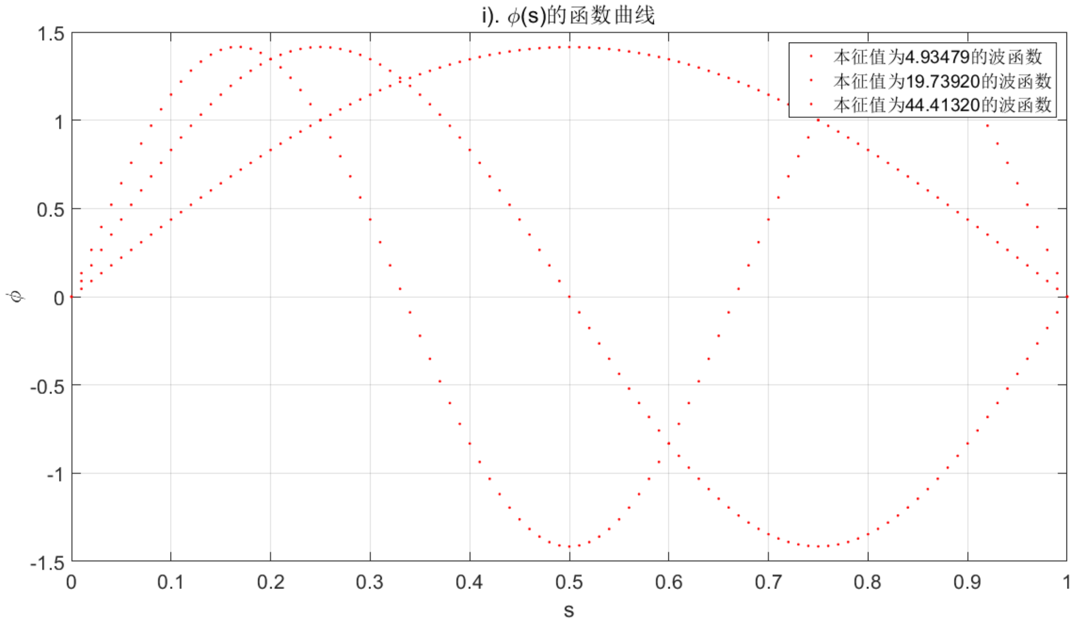
1.3.2 一维无限深势阱

设 y 在 x=0 处的导数为 delta，delta 取某一常数(ie.1)，得初始条件 y(1)=0,y(2)=delta*h

取初始本征值 en 的靶值为 0.01，初始步长为 0.01

利用初始条件，通过 Numerov 方法求出波函数，判断 y(n+1)与 y_n 的大小关系，调整本征值 en，重新求解波函数，直到 en 满足误差要求。之后通知数值积分，实现波函数的归一化。

求得第一个本征值为 4.93479，改变 en 初始靶值，继续求解，得到***本征值 19.73920，44.41320，满足 1:4:9:…n^2***,对应波函数如下：



1.3.3 一维线性谐振子势

由谐振子势知，能量本征值理论为 n-1/2;(n 为波函数节点数)

波函数 x 范围为[-inf,+inf]，满足边值条件 y(-inf)=y(+inf)=0;

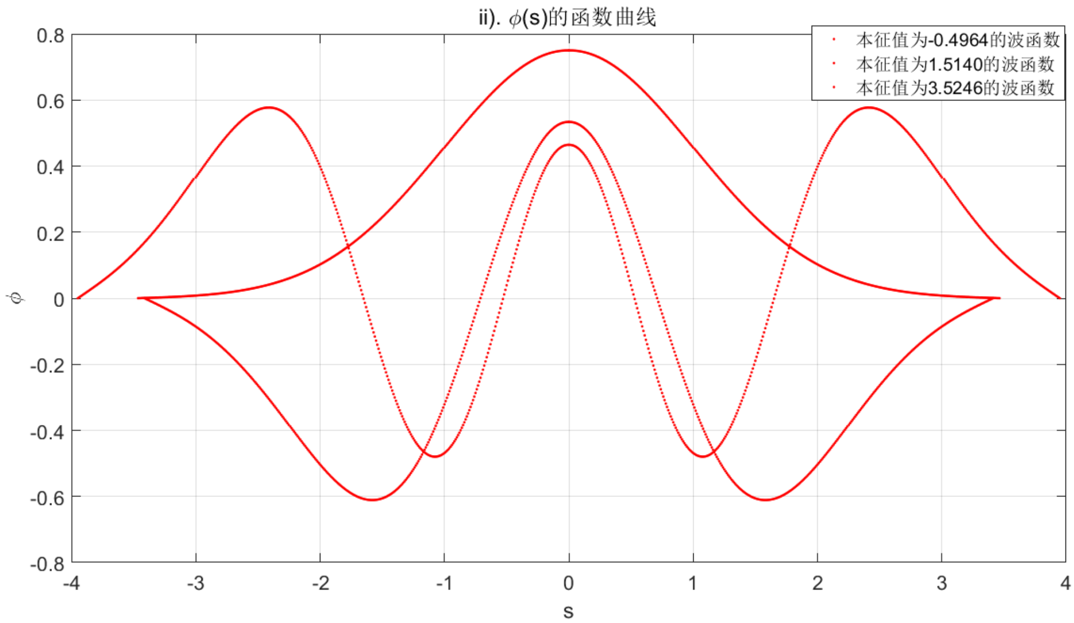
无法直接从-inf 或 inf 开始求解，考虑到**宇称**，只需要考虑半轴即可；另外，在 en>v(s),波函数**振荡**，而 en<v(s)时，波函数**指数衰减**;

奇宇称下，有 y(0)=0,设 y’(0)=delta，得到初始条件 y(0)=0,y(h)=h*delta;利用 Numerov 方法计算振荡区波函数，然后边求解衰减区，边判断波函数是否衰减，若不衰减，改变 en，重新求解，直到波函数可以衰减到 10^{-5}，即可得到能量本征值;（缺点：en 改变步长没法变，并且需要找到合适的步长才能保证找到所有本征值）;

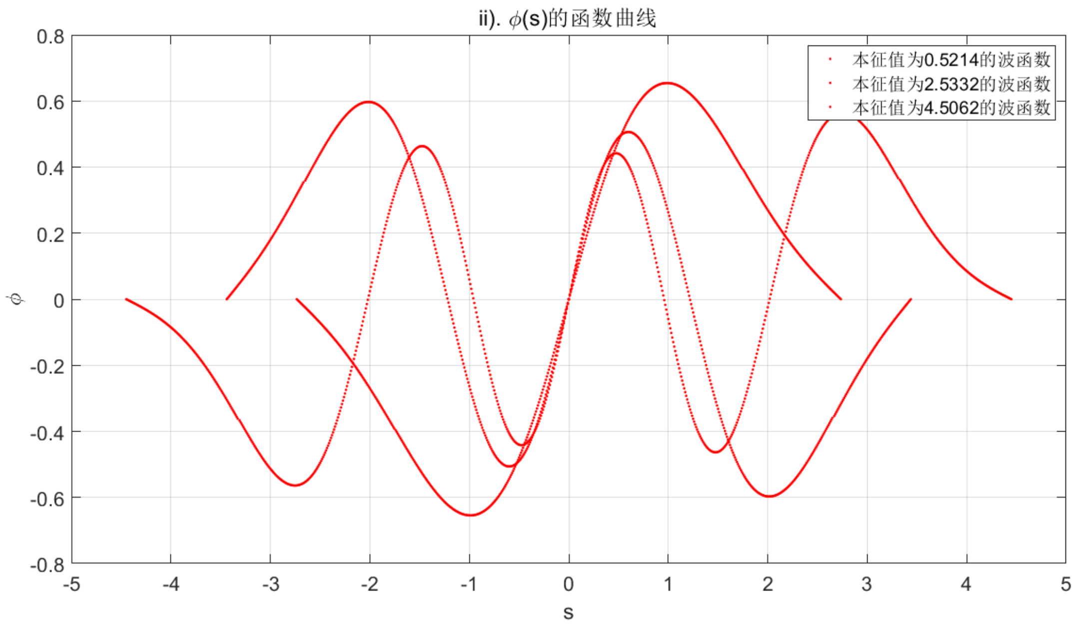
偶宇称下，有 y’(0)=0,设 y(0)=1,得到初始条件 y(0)=y(h)=1;同理即可得到偶宇称下本征值。

找到本征值后，对应波函数进行归一化。

计算结果如下，偶宇称下，能量本征值为-0.4964，1.5140，3.5246，5.5668，波函数如下



奇宇称下，能量本征值为 0.5214，2.5332，4.5062，6.5024，对应波函数如下



得到能量本征值为-0.4964，0.5214，1.5140，2.5332，3.5246，4.5062，5.5668，6.5024，基本满足n-1/2。（n 为波函数节点数）

附录 1

```
%cannonshell
%2018/10/30  林祥
clc;   clear; format long;
issue=3;              %是否考虑阻力，no[1]，yes[2],both[0],寻找击中(15k,3k)的发射角[3]
t0=0;     tn=100;     dt=1;    n=(tn-t0)/dt;
t=t0:dt:tn;
v0=500; %初始速度
g=9.8;     %重力加速度
b=2E-5;                       %B2/m
if(issue==3)
     thelta=atan(1/5);        %issue3的初始发射角
else
     thelta=60;   %初始发射角(以度为单位)
     thelta=thelta*pi/180;
end
%y1=x, y2=z, y3=vx, y4=vz;
y10=0; y20=0; y30=v0*cos(thelta); y40=v0*sin(thelta);    %初值

%%%%%%%%%%%求解%%%%%%%
[y11,y21,y31,y41]=eluer(n,dt,y10,y20,y30,y40,v0,0); %无阻力
[y12,y22,y32,y42]=eluer(n,dt,y10,y20,y30,y40,v0,b);    %有阻力

if(issue==3)
     dthelta=0.02; %寻找合适发射角时thelta的变化量0.02*180/pi=1.146度
     ETol=0.01*pi/180;   %寻找到的发射角最小误差不超过0.01度
     k=0;             %迭代次数
     while(abs(dthelta)>ETol && thelta<pi/2 && thelta>0 )
```

```
        k=k+1;
        thelta=thelta+dthelta;
        y10=0; y20=0; y30=v0*cos(thelta); y40=v0*sin(thelta);   %初值
        [y12,y22,y32,y42]=eluer(n,dt,y10,y20,y30,y40,v0,b);
        figure(1);
        plot(y12,y22,'g.');
        legend('有阻力(改进欧拉法)');
        for i=1:n
            if((y12(i)-15000)*(y12(i+1)-15000)<0)   %找到x=15000的点
                break;
            end
        end
        if((y12(i)+y12(i+1))/2<15000)     i=i+1;      %找到x=15000的点
        end
        if(y22(i)>3000)
            thelta=thelta-dthelta;
            dthelta=dthelta/2;
        end
    end
   sprintf('有阻力下要击中(15k,3k) ,发射角为%0.2f度，误差不超过0.01度,迭代次数
为%d',thelta*180/pi,k)
end

%%%%%%%%%%%画图%%%%%%%%%%%
figure(1);
set(gca,'Fontsize',16);
if(issue==0)
    plot(y11,y21,'r.');       hold on;
    plot(v0*cos(thelta).*t,v0*t*sin(thelta)-g/2.*t.^2,'b-');          hold on;
    plot(y12,y22,'g.');       hold on;
    legend('无阻力(改进欧拉法)','无阻力(解析解)','有阻力(改进欧拉法)');
elseif(issue==1)
    plot(y11,y21,'r.');       hold on;
    plot(v0*cos(thelta).*t,v0*t*sin(thelta)-g/2.*t.^2,'b-');          hold on;
    legend('无阻力(改进欧拉法)','无阻力(解析解)');
elseif(issue==2)
    plot(y12,y22,'g.');       hold on;
     legend('有阻力(改进欧拉法)');
end
xlabel('x'); ylabel('z');
title('cannonshell炮弹轨迹');
grid on;

%%%%%%%%%%%函数定义%%%%%%%%%%%%
function [y1,y2,y3,y4]=eluer(n,dt,y10,y20,y30,y40,v0,b)     %有阻力下改进欧拉方法
        p1(1)=y10;   p2(1)=y20;   p3(1)=y30;   p4(1)=y40;     v=v0;
        y1(1)=y10;     y2(1)=y20;    y3(1)=y30;    y4(1)=y40;
        g=9.8;     %重力加速度
```

```
        for i=1:n                               %有阻力
            p1(i+1)=y1(i)+dt*y3(i);         %显式格式，并作为预测
            p2(i+1)=y2(i)+dt*y4(i);
            p3(i+1)=y3(i)-dt*b*v*y3(i);
            p4(i+1)=y4(i)-dt*(g+b*v*y4(i));
            y1(i+1)=y1(i)+dt/2*(y3(i)+p3(i+1));       %用梯形公式校正
            y2(i+1)=y2(i)+dt/2*(y4(i)+p4(i+1));
            y3(i+1)=y3(i)-dt/2*(b*v*y3(i)+b*v*p3(i+1));
            y4(i+1)=y4(i)-dt/2*(2*g+b*v*y4(i)+b*v*p4(i+1));
            v=sqrt((y3(i+1))^2+(y4(i+1))^2);   %新的速度
        end
end
```

附录 2

```
%pendulum
%2018/10/31  林祥
%单摆(阻力&驱动力)   (thelta)''+q*(thelta)'+g/l*sin(thelta)=b*cos(w0*t)
%理想单摆  q=b=0; w0任意
clc;   clear; format long;
global q b w0 g l
%%----------理想单摆---------------
q=0.0; b=0.0; w0=2/3;
%%------ 有阻力及驱动力  ---------
%q=0.5;b=0.9;w0=2/3;
%q=0.5;b=1.15;w0=2/3;
l=9.8;     %单摆长度
g=9.8;     %重力加速度
tspan=[1,100];     n=1000;    %时间范围及  步数
y0=[0;1];    % theta, w初值

%%%%%%%%%%%求解%%%%%%%%
[t1,y1]=eluer(tspan,n,y0);
[t2,y2]=RK4(@dfun,tspan,n,y0);
%%%%%%%%%%%画图%%%%%%%%%%%
figure(1);
subplot(2,1,1); set(gca,'Fontsize',16);
plot(t1,y1(:,1),'r.');        hold on;
plot(t2,y2(:,1),'g.');        hold on;
xlabel('t'); ylabel('\theta');
legend('改进欧拉法','RK4法');
title('\theta随时间变化曲线');
grid on;
subplot(2,1,2);    set(gca,'Fontsize',16);
plot(t1,y1(:,2),'r.');        hold on;
plot(t2,y2(:,2),'g.');        hold on;
xlabel('t'); ylabel('w');
legend('改进欧拉法','RK4法');
```

```
title('角速度w随时间变化曲线');
grid on;
figure(2);   set(gca,'Fontsize',16);
plot(t1,1-cos(y1(:,1))+(y1(:,2)).^2/2,'r.');   hold on; %机械能是否守恒
plot(t2,1-cos(y2(:,1))+(y2(:,2)).^2/2,'g.');   hold on;%机械能是否守恒
xlabel('t'); ylabel('1-cos\theta+w^2/2');
legend('改进欧拉法','RK4法');
title('机械能是否守恒');
grid on;

%%%%%%%%%%函数定义%%%%%%%%%%%
function [tout,yout]=eluer(tspan,n,y0)
    global q b w0 g l
    t0=tspan(1); tn=tspan(2);   h=(tn-t0)/n;
    t=t0:h:tn;          tout=t';   %列向量
    y0=y0';             yout(1,:)=y0; p(1,:)=y0;   %m(=2)列n+1行
    for i=1:n
        p(i+1,1)=yout(i,1)+h*yout(i,2);        %显式格式，并作为预测
        p(i+1,2)=yout(i,2)+h*(b*cos(w0*t(i))-q*yout(i,2)-g/l*sin(yout(i,1)));
        yout(i+1,1)=yout(i,1)+h/2*(yout(i,2)+p(i+1,2));        %用梯形公式校正
        yout(i+1,2)=yout(i,2)+h/2*(b*cos(w0*t(i))+b*cos(w0*t(i+1))-q*yout(i,2)-q*p(i+1,2)-
g/l*sin(yout(i,1))-g/l*sin(p(i+1,1)));
    end
end
function [tout,yout]=RK4(fun,tspan,n,y0)
    t0=tspan(1); tn=tspan(2);   h=(tn-t0)/n;
    t=t0;   y=y0(:);     %y为当前步下的函数值(m维列向量)(m为方程组维数)
    tout=t;     yout=y.';
    while(t<tn)
        if t+h>tn, h=tn-t; end
        s1=feval(fun,t,y); s1=s1(:);
        s2=feval(fun,t+h/2,y+h*s1/2);   s2=s2(:);
        s3=feval(fun,t+h/2,y+h*s2/2);   s3=s3(:);
        s4=feval(fun,t+h,y+h*s3);   s4=s4(:);
        t=t+h;
        y=y+h*(s1+2*s2+2*s3+s4)/6;
        tout=[tout;t];
        yout=[yout;y.'];     %m(=2)列n+1行
    end
end
function dy=dfun(t,y)
    global q b w0 g l
    dy=[y(2) ; b*cos(w0*t)-q*y(2)-g/l*sin(y(1))];
end
```

附录 3

```
%Schrodinger_1D
%2018/11/1  林祥
```

```
%-1/2*phin(s)''+v(s)phin(s)=en*phin(s)
% i). v(s)=0,0<=s<=1; v(s)=inf.s<0 or s>1;
% ii). v(s)=-(1-s^2/2);
clc;   clear;   format long;
%%t=s; y=phi;
h=0.01;   n=1/h;    t=0:h:1;   %时间范围及 步数
y0=0; yn=0;   %边值
delta=1;   %归一化方程条件!?, delta可为任意值
en=0;   den=0.01;   %本征值的初始打靶值和初始步长
ETol=1E-5;
%----------------求解--------------
yn1=Numerov(n,h,y0,delta,en);   %tspan=[0,1]
while    abs(den)>ETol
    en=en+den;
    yn2=Numerov(n,h,y0,delta,en);
    if    (yn2(n+1))*(yn1(n+1))>0   %对en的搜索实现yn=0的边值条件
    else
        en=en-den;
        den=den/2;
    end
end
%---------------归一化---------------
sum1=0;
for i=1:n                %梯形积分公式
    sum1=sum1+h*((yn2(i)+yn2(i+1))/2)^2;
end
yn2=yn2./sqrt(sum1);
%----------------画图-----------------
figure(1);   set(gca,'Fontsize',16);
plot(t,yn2,'r.');    hold on;
xlabel('s');   ylabel('\phi');
legend(sprintf('本征值为%.5f的波函数',en));
title('i). \phi(s)的函数曲线');
grid on;
%-------函数定义--------
function y=Numerov(n,h,y0,delta,en)
    y(1)=y0; y(2)=h*delta;
    con=2*(1-5*h^2*en/6)/(1+h^2*en/6);
    for i=2:n
        y(i+1)=con*y(i)-y(i-1);
    end
end
```

附录 4

```
%Schrodinger_1D_2
%2018/11/1  林祥
%-1/2*phin(s)''+v(s)phin(s)=en*phin(s)
```

```matlab
% i). v(s)=0,0<=s<=1; v(s)=inf.s<0 or s>1;
% ii). v(s)=-(1-s^2/2);

%ii). 本征值理论为n-1/2;n=0,1,2,3...n为节点数
clc;   clear;   format long;
%%t=s; y=phi;
h=0.01;    %时间步长
y0=0;   delta=1;      parity=-1;      %奇宇称
%y0=0.3;   delta=0;        parity=1;   %偶宇称
en=1;   den=0.0002;   %本征值的初始打靶值和初始步长
ETol=1E-5;
%----------------求解--------------
[n,tn,t,yn]=Numerov2(h,y0,delta,en);   %振荡区
while abs(yn(n+1))>ETol   %指数衰减区验证
    tn=tn+h; n=n+1; t=[t,tn];
    yn(n+1)=2*(1-5*h^2/12*(2*en+2-(t(n))^2))*yn(n)-(1+h^2/12*(2*en+2-(t(n-1))^2))*yn(n-1);
    yn(n+1)=yn(n+1)/(1+h^2/12*(2*en+2-(t(n+1))^2));
    if abs(yn(n+1))>abs(yn(n))     %若不衰减，改变en,重新计算
        en=en+den;        [n,tn,t,yn]=Numerov2(h,y0,delta,en);
    end
end
%---------------归一化---------------
sum2=0;
for i=1:n                %梯形积分公式
    sum2=sum2+h*((yn(i)+yn(i+1))/2)^2;
end
sum2=2*sum2;     %加上负轴
yn=yn./sqrt(sum2);
%----------------画图-----------------
figure(1);   set(gca,'Fontsize',16);
plot(t,yn,'r.',-1.*t,parity.*yn,'r.');     hold on; %补全负轴
xlabel('s');   ylabel('\phi');
legend(sprintf('本征值为%.4f的波函数',en));
title('ii). \phi(s)的函数曲线');
grid on;
%---------函数定义----------
function [n,tn,t,y]=Numerov2(h,y0,delta,en)%震荡区波函数求解
    y(1)=y0; y(2)=y0+h*delta;
    tn=sqrt(2*en+2);      n=floor(tn/h);   t=0:h:tn;%振荡区
    for i=2:n
        y(i+1)=2*(1-5*h^2/12*(2*en+2-(t(i))^2))*y(i)-(1+h^2/12*(2*en+2-(t(i-1))^2))*y(i-1);
        y(i+1)=y(i+1)/(1+h^2/12*(2*en+2-(t(i+1))^2));
    end
end
```