计算物理期末总结

§0 选择填空

§0.0 Error

§0.0.0 the Classes of Error

1. Model error
2. Measurement error
3. **Truncation error**

连续过程离散化的误差，比如差分迭代公式。

4. Round-off error

计算机的浮点数截断（这个不叫truncation error真心抽象）。此外 Round off在低精度下远小于 Truncation error，一般不予考虑。

§0.0.1 误差计算

§0.0.1.0 误差定义，误差限。

- Error

$$Error = Z_{real} - Z_{measure}$$

- Absolute error

Because Z_{real} always cound not be precisely known, so we can only give a approximate range of Error:

$$|Error| \le \varepsilon$$

ε is absolute error, so we usually express Z_{real} as:

$$E_{real} = Error + Z_{measure} \in Z_{measure} \pm \varepsilon$$

- Relative error

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{|Z_{real}|} \approx \frac{\varepsilon}{|Z_{measure}|}$$

- Instance

事实上，她应该只会考绝对误差到相对误差的换算：

假设我们有一个 round off 舍入的浮点数 3.1415626, 我们不知道此舍入的误差是多少，但由于round off 方法，最大误差限：

$$\epsilon = 0.00000005$$

则相对误差：

$$\epsilon_r = \frac{|\epsilon|}{|3.1415626|}$$

§0.0.1.1 The compute of truncation error

- 传统有限差分法误差形式（单变量，常微分）

0. **The relation of local and overall**

$\partial_x y > 0$,则$OTE > \sum_i (LTE)_i$

1. Local Truncation Error

assume $u(t_i)$ is analytical solution,$y(t_i)$ is numerical solution.

we employ truncation route to secure $y(t_{i+1})$

$$LTE = y(t_{i+1}) - u(t_{i+1})$$

Viz. , LTE=analytical solution- numerical solution

2. Overall Truncation Error

Evidently if we only konw $u(t_0)$, then we secure numerical solution: $y(t_n)$

$$OTE = y(t_n) - u(t_n)$$

2. 误差的量级估计

Assume the length of step is h

$$\begin{cases} LTE = O(h^{p+1}) \\ OTE = O(h^p) \end{cases}$$

其中p为方程阶数（微分方程的个数）。

- 偏微分显式差分法误差形式

LTE一般和稳定条件阶数相同。

§0.1 Python Foundation

§0.1.0 导入文件模式分类

```
inuputfile=open("鸡你太美.txt",'w') #input #the mode to write
```

The core point is the modes:

- 'r': read
- 'w': write
- 'a': append
- 'b': bin
- '+': read/write

§0.1.1 matplotlib.pyplot

没什么，单纯我记不住这个库名字。

§0.2 分形图形

§0.2.0 Instance

0. julia 集：$Z_{n+1} = Z_{nm} + C_0$
1. 混沌吸引子轨道

§0.2.1 Properties

0. **Self-similarity**
1. Fractional Dimension

...

§0.2.2 Fractional Dimension Compute（豪斯道夫维数）

每个维度长增加两倍，体积增加量为 2^{dim}；例如Sierpinski, 维度长增加两倍，体积增加三倍，其维度为：

$$dim = log_2 3$$

§0.3 插值拟合

§0.3.0 插值分类

0. 多项式拟合插值 主要是拉格朗日插值（可以设置完全符合已知点）。缺点多个点拟合需要高阶多项式，会有过拟合现象。若分段使用拉格朗日插值又会有拟合函数不光滑（非完全拟合甚至不连续）的缺陷。
1. 分段样条插值 采用构造过某个点（包括导数也可过定点）的低阶多项式。例如三次样插值值可以做到一阶导数光滑，二阶导数连续。

§0.3.1 拟合目标

可以使用最小二乘法，选择合适的参数，使LTE的平方和最小：

$$\min \sum_i LTE^2$$

§0.4 数值积分

§0.4.0 积分公式分类

0. 矩形公式
1. 梯形公式
2. **辛普森1/3公式**

辛普森1/3公式适用于将积分区间分成偶数个小区间（一次计算两个子区间）。假设我们需要计算函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的定积分，可以将该区间分成 n 个等长小区间，其中 n 是偶数。

公式如下：

```
x = np.linspace(a, b, n+1) # 点数要是奇数
y = f(x)
V = 0
```

```
for i in range(1, n, 2):
    V += (1/3) * (y[i-1] + 4*y[i] + y[i+1]) * h
```

其中，$h = \frac{b-a}{n}$ 是每个小区间的长度。这种形式有点呆，但他考。注意循环范围（1,n,2），但是我们有n+1个端点。

In [ ]:
```
import numpy as np

# 定义
## 定义函数
def f(x):
    return np.sin(x)
## 定义变量
a = 0
b = np.pi
n = 6 #分成6个小区间
h = (b - a) / n
### x和y的取值
x = np.linspace(a, b, n+1) #端点比区间多一个。
y = f(x)

# 应用辛普森1/3公式形式计算
V = 0
for i in range(1, n, 2):
    V += (1/3) * (y[i-1] + 4*y[i] + y[i+1]) * h
print(f'Approximate integral: {V}')
```

```
Approximate integral: 2.0008631896735363
```

§0.4.1 Truncation error for simps

这里的p应该取4，Viz., $LTE = O(h^5), OTE = O(h^4)$

§0.5 求方程零点

§0.5.0 方法分类

1. 二分法

优点是异号端点区间一定可以找到一个零点的大致位置

缺点是收敛慢

2. 牛顿切线法
3. 弦割法

这俩优点是收敛快，缺点是可能收飞。

§0.5.1 General employment route.

先用二分法找到零点大致区间，然后用牛顿或弦割收敛。

§0.6 FFT

§0.6.0 采样点频率要求：

- 采样频率：原信号离散化程度，即一秒钟取多少个点。

- 采样定理：**实际保证采样频率为信号最高频率(要经验判断)的2.56～4倍**；当然按它的定理要求 **2** 倍，但是鬼知道原信号频率是多少。

§0.7 常微分方程

公共变量为t，我们可以发现，这套方法等于在对时间求积分。

§0.7.0 差分方法

假设u(t)是未知解析表达式，f(t)是已知的u(t)的一阶导函数，y(t)是数值解的表达式,h为时间步长。

$$\frac{du(t)}{dt} = f(t, u(t))$$

0. 欧拉法

后续差分方法均为改进平均斜率。

- primal

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + h * f(t_i, y(t_i))$$

- enhanced

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + \frac{h}{2}[f(t_i, y(t_i)) + f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))]$$

  可以发现，鬼知道 , $y(t_{i+1})$ 是多少，所以这个值是用primal算的。

1. **Fourth order Runge-Kutta method**

$$yt_{i+1} = y(t_i) + \frac{h}{6}(k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3)$$

   其中，所用斜率为：

$$\begin{cases} k_0 = f(t_i, y(t_i)) \\ k_1 = f(t_i + \frac{h}{2}, y(t_i) + k_0\frac{h}{2}) \\ k_2 = f(t_i + \frac{h}{2}, y(t_i) + k_1\frac{h}{2}) \\ k_3 = f(t_i + h, y(t_i) + k_2 h) \end{cases}$$

   时间步长是：1,1/2,1/2,1，权重是1,2,2,1。有点对称，但不多。

§0.7.1 误差分析

- primal 欧拉法: p=1
- enhanced 欧拉法: p=2
- Fourth order Runge kutta method: p=4
- **变步长Runge kutta method**： 其实就是选择满足精度要求 ε 的最大步长。看它的样子是用LTE。

§0.8 混沌系统

§0.8.0 基本特征

1. 对初始条件敏感
2. 奇异吸引子

3. 在不同标度下有分形结构：倍周期分岔

§0.8.1 不动点分类

§0.8.1.0 Introduction

又称奇点，指 $\frac{dy}{dt}=0$ 和 $\frac{dx}{dt}=0$ 的时候,相点不动（这不是废话吗）。

微扰 $\delta x, \delta y...$ 的解一般是 $e^{\lambda_i t}$ **的线性叠加**,记作 $e^{\mu+i\sigma}$，显然：

1. $\sigma=0$ 微扰单调扩大或减小
2. $\mu=0$ 运动 $Ci\sin\theta$ 震荡
3. 一般情况，啥都有。

§0.8.1.1 Overall Classes

$\mu=0$ 即震荡的情况是微扰是稳定的（其实显然微扰减小更好），叫 **椭圆不动点**； 其余都是 **双曲不动点**

§0.8.1.2 Local

这明明是针对特定方程才成立，而且书上大概写错了。她考的话很神经。

$\Delta=\gamma^2-4c$ ，微扰解有两项 $C_1e^{\lambda_1 t}+C_2e^{\lambda_2 t}$

0. $\Delta\geq 0$ 这显然 λ 为实数，微扰单纯大小变化。

- 稳定**结点**，根都大于0
- 不稳定节点，根都小于0
- **鞍点** ,一大一小。她说有一个“方向稳定”，其实应该是特征方向，不是空间自由度。

1. $\Delta<0$ 两个解为 $\lambda_{1,2}=-\gamma/2\pm i\sqrt{-\Delta}/2$，但不动点还是关注实部，即:

- 稳定**焦点** $-\gamma<0$
- 不稳定**焦点** $-\gamma>0$
- **中心点**： $-\gamma=0$

§0.8.2 混沌吸引子特征

只有耗散系统中的混沌才会产生奇异吸引子。

- **稳定性：抗初值干扰能力（指的是局限的相空间区域）。**
- **对初值敏感（bushi）：指的是轨道不稳定。**
- **低维性：相空间自由度低，但轨道无限嵌套，自相似性。**
- **非周期性：轨道不相交**

§0.8.3 洛伦茨方程与奇怪吸引子

判断条件：$r>r_c\approx 24.74$,C_1,C_2 成为了鞍-焦点，系统出现了复杂的分岔序列

§0.9 偏微分方程

§0.9.0 分类

0. 椭圆型 $-\nabla^2\varphi=S$
1. 抛物型 $[\partial_t-\lambda\nabla^2]\varphi=S$

2. 双曲型 $[\partial_t^2 - \lambda\nabla^2]\varphi = S$

$\S 0.9.1$ 初始条件和边界条件要求

- 边界条件

和具体什么方法无关，都需要。和空间自由度有关，一个dim两个边界条件。

分类就是1,2,3类边界条件，注意导数他叫**法向导数**。

- 初始条件

抛物要一个，双曲要两个。

$\S 0.9.1$ 稳定条件

- 拉普拉斯

0. 显式

$$r = \frac{h_y^2}{h_x^2} \in (0,1)$$

1. 隐式

恒稳定。

- 热传导

$$r = \frac{\tau}{h^2}\lambda \in (0, \frac{1}{2})$$

- 弦振动

$$r = \frac{\tau^2}{h^2}\lambda \in (0,1)$$

$\S 0.9.2$ 截断误差

和r中步长的阶数相同，LET注意不同于常规常微分判断。

$\S 0.9.3$ 松弛法

对于椭圆形偏微分方程，如果在差分公式中，随时将上一步 算得的各点的新值替代旧值，并且每次计算新值也替换成新值与旧值的“组合”, 则得到下列松弛法的计算公式，**其中0<ω<2。当 ω<1 称为“低松弛”,ω>1称为“超松弛”。**

$\S 0.10$ MC Method

$\S 0.10.0$ The concept of math

- 正态分布

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

- Weak Law of Large Numbers, WLLN

设 $X_1, X_2, \ldots, X_n$ 是一列 **独立同分布** 的随机变量，每个随机变量的期望值为 $\mathbb{E}[X_i] = \mu$，那么对于任意的正数 $\epsilon > 0$，有：

$$\lim_{n\to\infty} \Pr\left(\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i - \mu\right| \geq \epsilon\right) = 0$$

- Central Limit Theorem,CLT

设 $X_1, X_2, \ldots, X_n$ 是一列**独立同分布**的随机变量。$\mathbb{E}[X_i] = \mu, \mathbb{D}(X_i) = \sigma^2$

$$\overline{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \xrightarrow{d} \mathcal{N}(\mu, \frac{\sigma^2}{n})$$

其中 $\xrightarrow{d}$ 代表收敛于分布。

§0.10.1 生成随机数的方法

0. 线性同余
1. 反函数
2. 舍选法

均为对0-1伪随机数组进行变换。

§0.10.2 定积分计算方法

§0.10.2.0 投点法

§0.10.2.1 平均类计算

§0.10.2.1.0 Input:平均值估计

- 概率分布为p(x),f(x)理论期望求法。

$$\langle f(x)\rangle_x = \int_a^b f(x)p(x)dx$$

- 如果是用采样集估计平均值，那我们只要保证采样集的概率分布也是 $p(x)$（从数据库均匀采样），那么直接对采样点算术平均即可，因为 $p(x)$ 已经包含在 $f(x_i)$ 频数分布/N。

$$\langle f(x)\rangle_x \approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

  你应该发现其优势了，只要可以模拟采样，不需要只要 $p(x)$ 形式即可计算平均。
- 如果做MC,那产生随机数分布要按照 $p(x)$， 然后对采样点求算术平均即可。

就是说我们不想按数据库按照 $p(x)$ 均匀采样。

$$\langle f(x)\rangle_x = \int_a^b f(x)p(x)dx = \int_a^b \pi(x)\frac{p(x)}{\pi(x)}f(x)dx$$

然后按 $\pi(x)$ 采样,显然要用权重弥补以下。

$$\langle f(x)\rangle_x \approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \frac{p(x_i)}{\pi(x_i)}f(x_i)$$

§0.10.2.1.1 平均值法

平均值乘区间长度

§0.10.2.1.2 重要性抽样

平均值乘区间长度

§1.0 大题

§1.0.0 平均值法积分

这个天才有np库不用，这是很抽象的。

```
random.seed(None)
np.random.uniform(0,xm,size=(N,))
```

In [ ]:
```
# -*- coding: utf-8 -*-
import numpy as np
import random
N = 1000000 #积分
xm = 50.0
random.seed(None)
A = []

#---------------------------------
## 随机参数
kesi = np.random.uniform(0,xm,size=(N,))
## 表达式计算
A=kesi**(7/3)*np.exp(-kesi)
## 求和
integral = xm/N*np.sum(A)
#----------------------------------

print(integral)
```

```
2.790748852949794
```

§1.0.1 拉格朗日插值

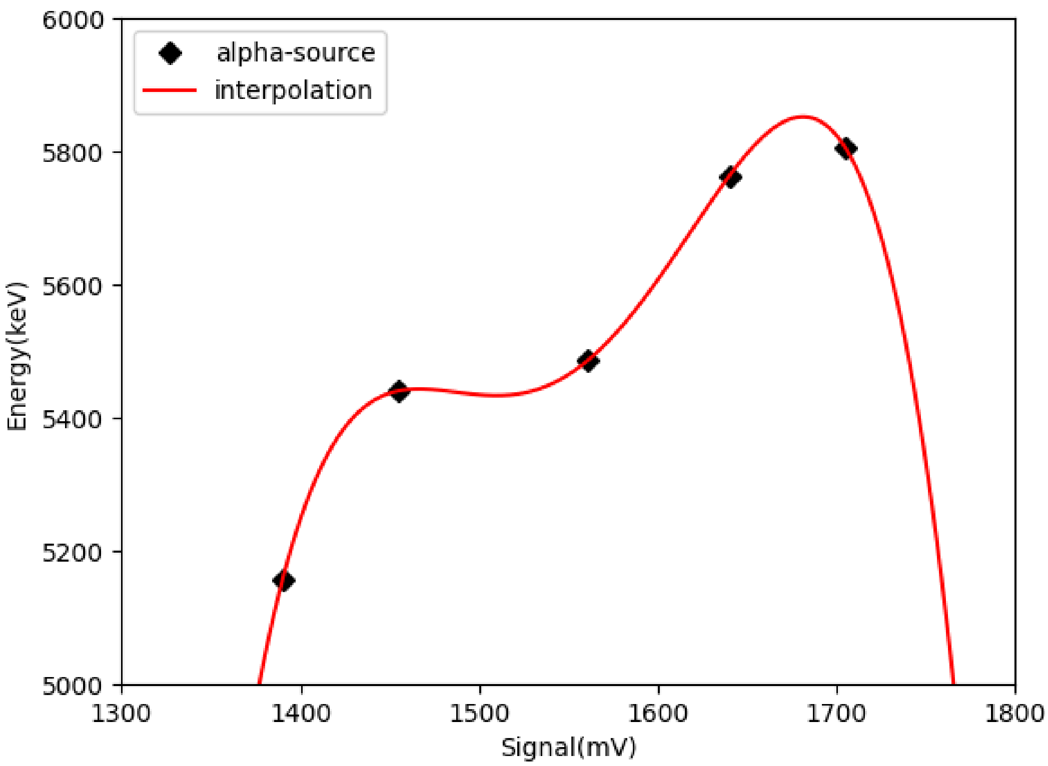
这天才又用循环列表，抽象plus

```
from scipy import interpolate
data=np.loadtxt('calibrate.dat')

#调用 scipy 程序库中的 interpolate 模块
poly = interpolate.lagrange(signal_alpha_source, energy_alpha_source) #
from scipy
#调用函数 poly，计算出拉格朗日插值函数在(1300, 1800)区间的数值。
signal=np.arange(1300,1800,1)
energy=poly(signal)
```

In [ ]:
```
# -*- coding: utf-8 -*-
import numpy as np
import matplotlib.pylab as pl
from scipy import interpolate

#读取数据'calibrate.dat'
#data=np.loadtxt('calibrate.dat')
energy_alpha_source=[5156,5440,5486,5763,5805]#data[:,0]
```

```
signal_alpha_source=[1390,1455,1561,1640,1705]#data[:,1]

#---------------------------------------------------------
#调用 scipy 程序库中的 interpolate 模块
poly = interpolate.lagrange(signal_alpha_source, energy_alpha_source) # from scipy
#调用函数 poly，计算出拉格朗日插值函数在(1300, 1800)区间的数值。
signal=np.arange(1300,1800,1)
energy=poly(signal)
#----------------------------------------------------------

#调用函数poly，计算出信号幅度为1588mV的待测粒子能量。
print('enegy of particle:%8.3fkeV'%poly(1588))

# 将结果用图形表现出来
pl.plot(signal_alpha_source,energy_alpha_source,'kD',label='alpha-source')
pl.plot(signal,energy,'r-',label='interpolation')
pl.xlabel('Signal(mV)')
pl.ylabel('Energy(keV)')
pl.xlim(1300,1800)
pl.ylim(5000,6000)
pl.legend(loc='upper left')
pl.show()
```

```
enegy of particle:5563.485keV
```



§1.0.2 热传导

注意理论：此为抛物型偏微分方差，需要一个初始条件。由于是一维两个boundary conditions 即可。

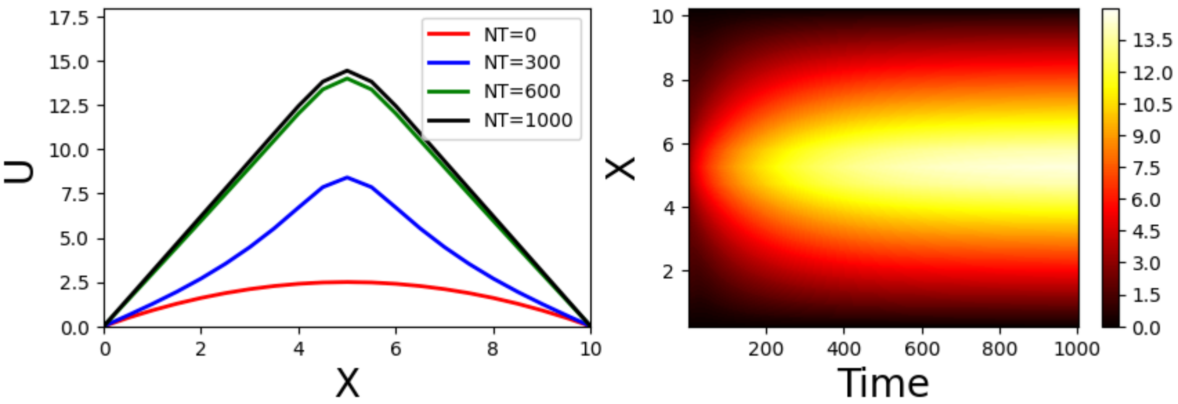
稳定条件是 $\lambda\frac{\tau}{h^2} < 0.5$

这里初始条件为 $0.1 * x * (10.0 - x)$,边界条件为0。

In [ ]:

```
# -*- coding: utf-8 -*-
import numpy as np
import pylab as pl
tau = 0.05 #时间步长
```

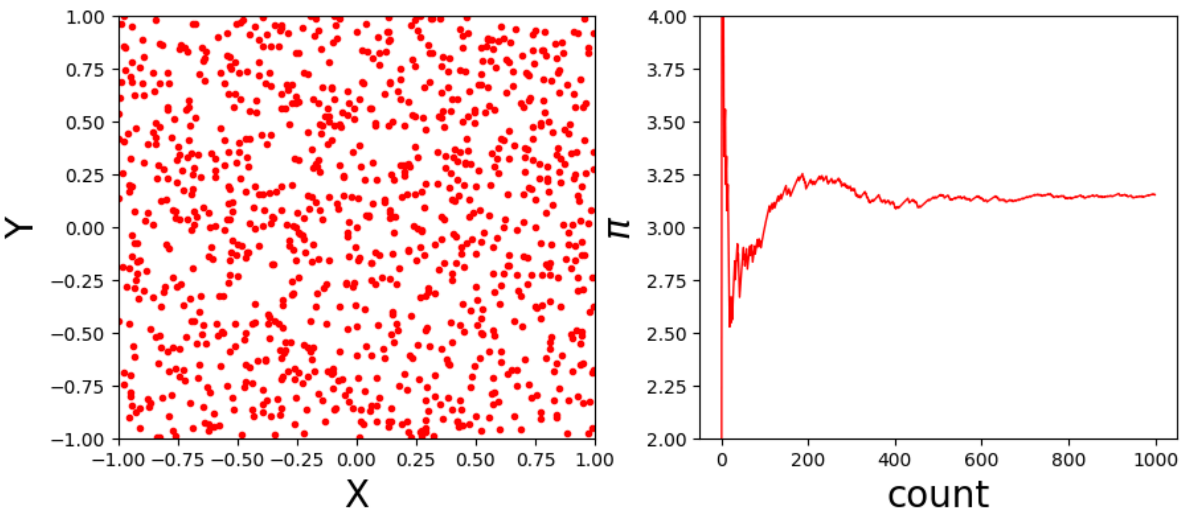
```
h = 0.5 #空间步长
lamda = 1.
A = lamda*tau/h**2
l = 10. #杆长
#-------------------------------------------------------
NX = int(l/h) #空间节点数
NT = 1000 #时间步数
#--------------------------------------------------------
U = np.zeros([NX+1,NT+1])  #温度 # 她都多定义了一个步长。
x = np.arange(0,(NX+1)*h,h) #坐标  #注意这里x到 NX*h
## 这里原先边界条件只有安慰作用;
## 初始条件
U[:,0]=0.1*x*(10.0-x)
## 迭代公式
for k in range(NT):
    for i in range(1,NX):  #左右两个端点没有动，符合boundary
        U[i,k+1]=A*U[i+1,k]+(1-2*A)*U[i,k]+A*U[i-1,k] + \
                 tau*5.0*np.exp(-2.0*(i*h-5.0)**2)
#-----------------------------------------------------------
fig = pl.figure(figsize=(10,3))
ax1 =fig.add_subplot(1,2,1)
ax2 =fig.add_subplot(1,2,2)

ax1.plot(x,U[:,0], 'r-', label='NT=0',linewidth=2.0)
ax1.plot(x,U[:,100], 'b-', label='NT=300',linewidth=2.0)
ax1.plot(x,U[:,600], 'g-', label='NT=600',linewidth=2.0)
ax1.plot(x,U[:,1000], 'k-', label='NT=1000',linewidth=2.0)
ax1.set_ylabel(r'U', fontsize=20)
ax1.set_xlabel(r'X', fontsize=20)
ax1.set_xlim(0,10)
ax1.set_ylim(0,18)
ax1.legend(loc='upper right')

extent = [0,NT+1,0,(NX+1)*h]
levels = np.arange(0.0,15.0,0.01)
cs = ax2.contourf(U,levels,origin='lower',extent=extent,cmap=pl.cm.hot)
cbar = fig.colorbar(cs)
ax2.set_ylabel(r'X', fontsize=20)
ax2.set_xlabel(r'Time', fontsize=20)
pl.show()
```



§1.0.3 求pi面积

In [ ]:
```
# -*- coding: utf-8 -*-
import numpy as np
import pylab as pl
import random

n = 1000   # 飞镖数
r0 = 1.0   #圆半径
```

```
seed = 135971 #随机数种子
xr = np.zeros(n)
yr = np.zeros(n)
pi = np.zeros(n)
count = np.zeros(n)
random.seed(seed)  #设定随机数种子
m = 0 #圆内飞镖数

#---------------------------------------------------
for i in range(1,n):
    xr[i] = random.uniform(-1,1) #飞镖位置
    yr[i] = random.uniform(-1,1)
    r2 = xr[i]**2 + yr[i]**2 #飞镖距离圆心距离平方
    if(r2 < r0**2):  #是否落入圆内
       m = m + 1
    pi[i] = 4.0*m/i  #投i个飞镖后估算出的pi值
    count[i] = i
#-----------------------------------------------

fig = pl.figure(figsize=(10,4))
ax1 =fig.add_subplot(1,2,1)
ax2 =fig.add_subplot(1,2,2)
ax1.plot(xr, yr, 'r.')
ax2.plot(count,pi, 'r-',linewidth=1.0)
ax1.set_ylabel(r'Y', fontsize=20)
ax1.set_xlabel(r'X', fontsize=20)
ax1.set_xlim(-1,1)
ax1.set_ylim(-1,1)
ax2.set_ylim(2,4)
ax2.set_ylabel(r'$\pi$', fontsize=20)
ax2.set_xlabel(r'count', fontsize=20)
pl.subplots_adjust(left=0.15,bottom=0.1,top=0.9,right=0.95, \
                   hspace=0.25,wspace=0.22)
pl.show()
```

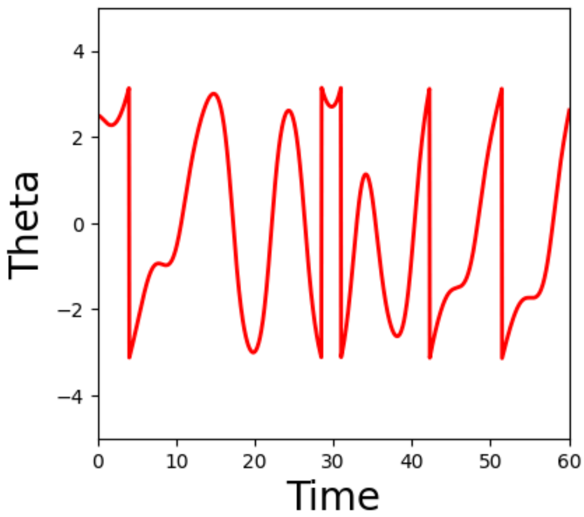


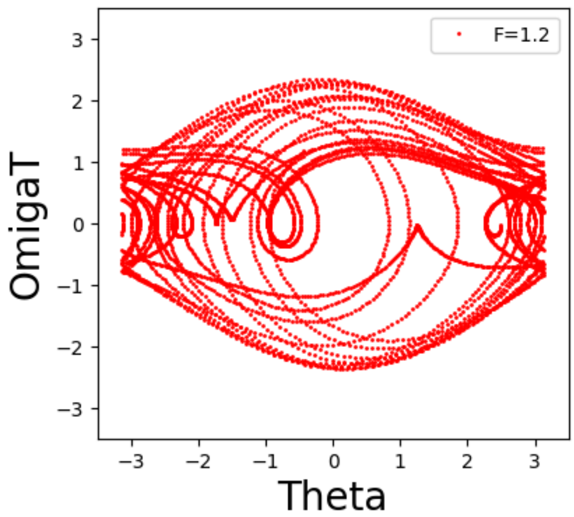
§1.0.4 单摆混沌系统。

$$\begin{cases} \frac{dw}{dt} = -\frac{g}{l}\sin\theta - qw + F\sin(wt) \\ w = \frac{d\theta}{dt} \end{cases}$$

In [ ]:
```
# -*- coding: utf-8 -*-
import numpy as np
import pylab as pl

# peremeter
```

```
## constant
g=9.8
xl=9.8
q = 0.5
F=1.2
W=2.0/3.0
twopi = 2*np.pi
## step strength
dt=0.04

#------------------------------------------------------
## 初值
theta=2.5
omiga=0.
n = 5000
t = 0.0
ThetaT0 = []
OmigaT0 = []
Time0 = []

#-----------------------------------------------------
for i in range(n):
    # 迭代
    xk1=-(g/xl)*np.sin(theta)-q*omiga+F*np.sin(W*t)
    xl1=omiga
    xk2=-(g/xl)*np.sin(theta+dt/2.*xl1)-q*(omiga+dt/2.*xk1)+F*np.sin(W*(t+dt/2))
    xl2=omiga+dt/2.*xk1
    xk3=-(g/xl)*np.sin(theta+dt/2.*xl2)-q*(omiga+dt/2.*xk2)+F*np.sin(W*(t+dt/2))
    xl3=omiga+dt/2.*xk2
    xk4=-(g/xl)*np.sin(theta+dt*xl3)-q*(omiga+dt*xk3)+F*np.sin(W*(t+dt))
    xl4=omiga+dt*xk3
    omiga=omiga+dt/6.*(xk1+2*xk2+2*xk3+xk4)
    theta=theta+dt/6.*(xl1+2*xl2+2*xl3+xl4)
    # 限定范围于-pi,pi
    theta=(theta+twopi/2)%twopi-twopi/2

    t=t+dt
    ThetaT0.append(theta)
    OmigaT0.append(omiga)
    Time0.append(t)
#--------------------------------------------------------

fig = pl.figure(figsize=(10,4))
ax1 =fig.add_subplot(1,2,1)
ax2 =fig.add_subplot(1,2,2)
ax1.plot(Time0, ThetaT0, 'r-', label='F=1.2',linewidth=2.0)
ax2.plot(ThetaT0, OmigaT0, 'r.', label='F=1.2',ms=2.0)

pl.subplots_adjust(hspace=0.35,wspace=0.3)
ax1.set_ylabel(r'Theta', fontsize=20)
ax1.set_xlabel(r'Time', fontsize=20)
ax1.set_xlim(0,60)
ax1.set_ylim(-5.0,5.0)
ax2.set_xlabel(r'Theta', fontsize=20)
ax2.set_ylabel(r'OmigaT', fontsize=20)
ax2.set_xlim(-3.5,3.5)
ax2.set_ylim(-3.5,3.5)
pl.legend(loc='upper right')
pl.show()
```


Theta
Time


F=1.2
OmigaT
Theta