Homework #9

Due: 2024-7-9 00:00 | 5 Questions, 100 Pts

Name: XXX

Question 1 (20') (常微分方程).

求解以下常微分方程：

a (5') $(y')^2 + y^2 = 1.$

b (5') $y'' - 2y' + 2y = e^x \sin x.$

c (5') $xy' = \sqrt{x^6 - y^2} + 3y.$

d (5')

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{y}}{\mathrm{d}x} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{y}.$$

◀

Question 2 (30') (辛积分器).

人们在求解常微分方程

$$y'(t) = f(t, y(t))$$

时，使用的最简单的方法便是根据已知量来计算对应的更新量

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \Delta t f(t_n, y_n),$$

这一方法被称为欧拉法。

对于粒子运动而言，我们使用其位置 x 与速度 v 来表示其状态。对应地，其上的欧拉法更新策略为

$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t,$$
$$v(t + \Delta t) = v(t) + a(x(t))\Delta t,$$

a (5') 请根据上述算法完成 `utils.py` 文件中的 `explicit_euler` 函数。你应当注意到，由于该方法仅有一阶精度，我们在 `ode.py` 中将每一时间步切分为了 100 个子时间步。

对于数值求解 Hamilton 方程

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p},$$

人们引入了辛积分器的概念。其中 H 为 Hamilton 量，位置和动量坐标的集合 $z = (q, p)$ 被称为正则坐标。Hamilton 方程随时间的演化构成了一个辛同态，即 2-形式 $\mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q$ 保持不变。如果数值积分方案能够保持这个 2-形式，就被称为辛积分器。

对于可分离的 Hamilton 量

$$H(p, q) = T(p) + V(q),$$

我们引入算符 $D_H(\cdot) = \{\cdot, H\}$ 来返回被作用量的泊松括号，则 Hamilton 方程可以被简化为

$$\dot{z} = D_H(z),$$

此时解为

$$z(\tau) = \exp(\tau(D_T + D_V))z(0).$$

一般而言，D_T 与 D_V 不对易，所以不能对其展开时任意合并算符，我们将解写为

$$\exp(\tau(D_T + D_V)) = \prod_{i=1}^{k} \exp(c_i \tau D_T) \exp(d_i \tau D_V) + \mathcal{O}\left(\tau^{k+1}\right).$$

其中，$\sum_{i=1}^{k} c_i = \sum_{i=1}^{k} d_i = 1$ 为实数系数，k 为积分器的阶。
应当注意到，对于所有的 z 而言，

$$D_T^2(z) = \{\{z, T\}, T\} = \{(\dot{q}, 0), T\} = (0, 0).$$

我们可将指数上的算符转换为线性算符。即，$\exp(c_i \tau D_T)$ 对应的映射为

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} q + \tau c_i \frac{\partial T}{\partial p}(p) \\ p \end{pmatrix},$$

$\exp(d_i \tau D_V)$ 对应的映射为

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} q \\ p - \tau d_i \frac{\partial V}{\partial q}(q) \end{pmatrix}.$$

b (10’) 请根据上述描述推导出一阶的辛欧拉积分格式。

c (10’) 请根据您所推导出的一阶辛欧拉积分格式完成 `utils.py` 文件中的 `symplectic_euler` 函数。

d (5’) 请推导出一些二阶与三阶的辛欧拉积分格式并进行测试。您可以思考这些格式所对应的精度阶数。

◀

Question 3 (20’) (分离变量法).
对于一个正方形区域 $[0, 1] \times [0, 1]$，其上的电势满足 Laplace 方程

$$\nabla^2 \phi = 0.$$

我们为该区域设置边界条件为

$$\phi\Big|_{x=0} = \phi\Big|_{x=1} = 1,$$

$$\phi\Big|_{y=0} = \phi\Big|_{y=1} = -1.$$

a (8’) 请使用分离变量法求解上述方程。

b (10’) 请使用 Jacobi 迭代算法数值求解上述方程，完成 `utils.py` 文件中的 `iter_jacobi` 函数。Jacobi 迭代算法的离散方案请参考 `README.md`.

c (2’) 请对比数值算法求解结果与解析解之间的差。

◀

Question 4 (20') (Green 恒等式).
设区域 V 内有连续可微的标量函数场 ϕ, ψ

a (5') 请证明 Green 第一恒等式

$$\int_V \left(\psi\nabla^2\phi + \boldsymbol{\nabla}\phi\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi\right)\mathrm{d}V = \oint_{\partial V}\psi\frac{\partial\phi}{\partial\boldsymbol{n}}\,\mathrm{d}A.$$

b (5') 请证明 Green 第二恒等式

$$\int_V \left(\psi\nabla^2\phi - \phi\nabla^2\psi\right)\mathrm{d}V = \oint_{\partial V}\left(\psi\frac{\partial\phi}{\partial\boldsymbol{n}} - \phi\frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{n}}\right)\mathrm{d}A.$$

c (5') 取 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_0)$ 为

$$\nabla^2 G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_0) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$$

的基本解，ψ 在区域内满足拉普拉斯方程。请证明 Green 第三恒等式

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int_{\partial V}\left(\psi(\boldsymbol{r}')\frac{\partial G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')}{\partial\boldsymbol{n}'} - G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}')}{\partial\boldsymbol{n}'}\right)\mathrm{d}A$$

d (5') 求斜半空间 $\{(x,y,z) : ax+by+cz>0\}$ 的 Green 函数。

◀

Question 5 (10') (从 ODE 到 PDE).
回忆一下随机过程，我们定义一个 Gaussian 过程 W_t，对于

$$\forall t_1,\ldots,t_k,\quad W_{t_1,\ldots,t_k} = (W_{t_1},\ldots,W_{t_k})$$

为多变量的高斯随机变量。其平均值 $m(t)=0$, 协方差 $K(s,t)=\min\{s,t\}$, 对于 $t_1<t_2$ 可以得到

$$W_{t_2} = W_{t_1} + \sqrt{t_2-t_1}N(0,1),$$

其中 $N(0,1)$ 为以 0 为期望，方差为 1 的正态分布。
我们在弱形式下可以得到关于该过程微分的定义。对于任意平方可积的函数 f，定义 Itô 积分

$$\int_0^T f(w,t)\,\mathrm{d}W_t = \lim_{n\to\infty}\sum_{i=0}^{n-1} f(w_i,t_i)(W_{t_{i+1}} - W_{t_i}).$$

a (4') 请证明上述积分满足性质

$$\mathbb{E}\left(\int_S^T f(w,t)\,\mathrm{d}W_t\right) = 0,\quad \mathbb{E}\left(\int_S^T f(w,t)\,\mathrm{d}W_t\right)^2 = \mathbb{E}\left(\int_S^T f^2(w,t)\,\mathrm{d}t\right).$$

b (2') 请计算如下积分

$$\int_0^t W_s\,\mathrm{d}W_s\,.$$

根据 b 问中的结果，我们可以形式化地认为有

$$(\mathrm{d}W_t)^2 = \mathrm{d}t\,.$$

c (2') 对于二阶可微的函数 f 考虑映射 $Y_t = f(X_t)$，其中 $\mathrm{d}X_t = b(w,t)\,\mathrm{d}t + \sigma(w,t)\,\mathrm{d}W_t$ 满足 $X_t\big|_{t=0} = X_0$. 请计算 $\mathrm{d}Y_t$ 的表达式。

对于一个 ODE 而言，将对应有一个一阶的 PDE 方程作为概率密度。即对于

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = b(x), \quad x\bigg|_{t=0} = x_0,$$

若是 x_0 满足一定分布 $p_0(x)$，那么该概率密度的演化满足

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(pb(x))}{\partial x} = 0.$$

d (2') 对于一个随机微分方程

$$\mathrm{d}X_t = b(w,t)\,\mathrm{d}t + \sigma(w,t)\,\mathrm{d}W_t\,,$$

按照同样的方式定义概率密度为

$$p(x,t)\,\mathrm{d}x = \Pr[X_t \in [x, x + \mathrm{d}x)].$$

请给出对应的概率密度的演化方程。

上述结果表明，类似于解一阶偏微分方程时使用的特征线法，对于二阶偏微分方程应当使用带有随机游走的特征线。

◀