

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»



СБОРНИК программ и заданий

**Физтех-школа аэрокосмических технологий
(ФАКТ)**

**для студентов 3 курса
на весенний семестр
2022–2023 учебного года**

МОСКВА
МФТИ
2023

Сборник программ и заданий для студентов 3 курса на весенний семестр 2022–2023 учебного года. Физтех-школа аэрокосмических технологий (ФАКТ). – Москва : МФТИ, 2023. – 40 с.

Учебное издание

**СБОРНИК
программ и заданий**

**Физтех-школа аэрокосмических технологий
(ФАКТ)**

**для студентов 3 курса
на весенний семестр
2022–2023 учебного года**

Редакторы и корректоры: *И.А. Волкова, В.А. Дружинина*
Компьютерная верстка *В.А. Дружининой*

Подписано в печать 17.01.2023. Формат 60 × 84 ¹/₁₆. Усл. печ. л. 2,5. Тираж 135 экз.
Заказ № 31.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»
141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9
Тел. (495) 408-58-22, e-mail: rio@mipt.ru

Отдел оперативной полиграфии «Физтех-полиграф»
141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9
Тел. (495) 408-84-30, e-mail: polygraph@mipt.ru

© Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», 2023

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе
А. А. Воронов
17 января 2023 г.

ПРОГРАММА

по дисциплине: **Уравнения математической физики**
по направлению подготовки: **03.03.01 «Прикладная математика и физика»**
физтех-школа: **ФАКТ**
кафедра: **высшей математики**
курс: **3**
семестр: **6**

лекции — 45 часов
практические (семинарские)
занятия — 30 часов
лабораторные занятия — нет

Экзамен — 6 семестр

ВСЕГО АУДИТОРНЫХ ЧАСОВ — 75

Самостоятельная работа:
теор. курс — 120 часов

Программу составил

к. ф.-м. н., доцент В. В. Шаньков

Программа принята на заседании кафедры
высшей математики 17 ноября 2022 г.

Заведующий кафедрой
д. ф.-м. н., профессор

Г. Е. Иванов

1. Интегральные уравнения с вырожденным ядром. Теоремы Фредгольма.
2. Теорема о разрешимости интегрального уравнения с малым непрерывным ядром.
3. Лемма об эквивалентности интегрального уравнения с непрерывным ядром интегральному уравнению с вырожденным ядром. Теоремы Фредгольма.
4. Свойства собственных значений и собственных функций интегрального уравнения с вещественным симметричным ядром. Теорема Гильберта–Шмидта.
5. Задача Штурма–Лиувилля. Функция Грина задачи Штурма–Лиувилля. Её свойства. Сведение задачи Штурма–Лиувилля к интегральному уравнению.
6. Свойства собственных значений и собственных функций задачи Штурма–Лиувилля. Теорема Стеклова. Полнота системы собственных функций задачи Штурма–Лиувилля.
7. Уравнение Бесселя. Представление функций Бесселя в виде степенного ряда. Интегральные представления функций Бесселя. Рекуррентные соотношения.
8. Свойство ортогональности и свойства нулей функций Бесселя. Асимптотическое поведение функций Бесселя.
9. Построение формального решения смешанной задачи о колебаниях круглой мембраны, закрепленной по краю.
10. Гармонические функции в \mathbb{R}^3 . Основная интегральная теорема. Теорема о среднем. Принцип максимума (строгий).
11. Основные краевые задачи для уравнения Лапласа. Единственность решения задачи Дирихле.
12. Правильная нормальная производная. Условия разрешимости внутренней задачи Неймана. Неединственность решения. Внешняя задача Неймана.
13. Функция Грина задачи Дирихле. Решение задачи Дирихле с помощью функции Грина. Решение задачи Дирихле для шара, формула Пуассона.
14. Сферические функции. Полиномы Лежандра. Производящая функция. Присоединенные функции Лежандра. Решение задачи Дирихле для шара.
15. Объемный потенциал, его свойства. Поверхности Ляпунова. Потенциал простого слоя, его свойства. Разрыв нормальной производной простого слоя.

16. Потенциал двойного слоя, непрерывность на поверхности. Разрыв потенциала двойного слоя.
17. Сведение краевых задач Дирихле и Неймана к интегральным уравнениям. Разрешимость краевых задач.

Литература

Основная

1. *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. — 5-е изд. — Москва : Наука, 1988.
2. *Владимиров В. С., Жаринов В. В.* Уравнения математической физики. — Москва : Физматлит, 2000
3. *Михайлов В. П.* Дифференциальные уравнения в частных производных. — 2-е изд. — Москва : Наука, 1988.
4. *Михайлов В. П.* Лекции по уравнениям математической физики. — Москва : Физматлит, 2001.
5. *Соболев С. Л.* Уравнения математической физики. — 7-е изд. — Москва : Наука, 1992.
6. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. — Москва : Наука, 1997.
7. *Уровев В. М.* Уравнения математической физики. — Москва : ИФ Язуа, 1998.
8. *Масленникова В. Н.* Дифференциальные уравнения в частных производных. — Москва : Изд-во РУДН, 1997.
9. *Шубин М. А.* Лекции об уравнениях математической физики. — Москва : МЦНМО, 2001.
10. *Олейник О. А.* Лекции об уравнениях математической физики. — 2-е изд. — Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005.

ЗАДАНИЯ

Все номера задач указаны по книге: *Владимиров В. С., Ваширин А. А., Каримова Х. Х., Михайлов В. П., Сидоров Ю. В., Шабунин М. И.* Сборник задач по уравнениям математической физики. — 4-е изд., исправл. и доп. — Москва : Физматлит, 2016.

Замечания

1. Задачи с подчёркнутыми номерами рекомендовано разобрать на семинарских занятиях.
2. Задачи, отмеченные *, являются необязательными для всех студентов.

ПЕРВОЕ ЗАДАНИЕ

(срок сдачи 15–21 марта)

I. Функции Бесселя и их применение при решении задач для круглой мембраны. Метод Фурье

20.23(2); 20.38; 20.60(2).

1. Найти формальное решение смешанных задач, считая, что $f(r)$ и $g(r)$ — гладкие функции на рассматриваемых отрезках, (r, φ) — полярные координаты (x, y) :

а) $u_t = \Delta u - 8u + 4tf(r) \cos \varphi, \quad 0 < r < 6, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad t > 0,$

$$u|_{t=0} = g(r) \cos 3\varphi, \quad 0 < r < 6, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi,$$

$$|u|_{r=0} < \infty, \quad u|_{r=6} = 0, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad t > 0;$$

б) $4u_{tt} = \Delta u + f(r) \sin^2 2\varphi, \quad 0 < r < 1, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad t > 0,$

$$u|_{t=0} = g(r) \cos 2\varphi, \quad u_t|_{t=0} = J_0(\mu_{0,3}r), \quad 0 < r < 1, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi,$$

$$|u|_{r=0} < \infty, \quad u|_{r=1} = 0, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad t > 0,$$

где μ_{kj} — j -й по порядку положительный нуль функции Бесселя J_k , $k \in \overline{0, \infty}$, $j \in \mathbb{N}$.

2. Найти формальное решение смешанной задачи для круга

$$u_{tt} = \Delta u + \sin \mu_{0,1}t, \quad r < 1, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad t > 0;$$

$$u|_{t=0} = J_0(\mu_{0,1}r), \quad u_t|_{t=0} = 0, \quad r < 1, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi;$$

$$u|_{r=1} = 0, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad t > 0;$$

где μ_{01} — первый положительный нуль функции Бесселя.

3. Решить смешанную задачу для круга:

$$u_t = \Delta u + y + e^{-\mu_{0,2}^2 t} J_0(\mu_{0,2}r), \quad x^2 + y^2 < 1, \quad t > 0;$$

$$u|_{t=0} = J_2(\mu_{2,3}r) \cos(2\varphi - \frac{\pi}{6}), \quad x^2 + y^2 < 1;$$

$$u|_{r=1} = ty, \quad x^2 + y^2 = 1, \quad t > 0;$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ и $\varphi = \varphi(x, y)$ — полярные координаты точки (x, y) , $\varphi(0, 0) = 0$, $\mu_{n,i}$ — i -й положительный нуль функции Бесселя $J_n(\rho)$.

II. Интегральные уравнения

(5.22); 5.23(5); 5.24(2); 5.25(2).

4. Найти решение уравнения

$$\varphi(x) = \lambda \int_{-1}^1 \left(x e^{x^2} \cos^3 t + \frac{1 - \cos x}{x} e^{t^2} \right) \varphi(t) dt + f(x).$$

При каких $f(x) \in C[-1; 1]$ и λ решение существует? Каково множество характеристических чисел сопряженного ядра?

5. Найти характеристические числа, собственные функции, а также то значение параметра α , при котором интегральное уравнение

$$\varphi(x) = \lambda \int_{|y| < 1} (6|x|^2 - 2|y|^2) \varphi(y) dy + |x|^2 + \alpha,$$

$$|x| < 1, \quad x = (x_1, x_2), \quad y = (y_1, y_2)$$

разрешимо для любых λ . Найти решения при этом значении α .

5.34; 5.41(2); 5.44*.

ВТОРОЕ ЗАДАНИЕ

(срок сдачи 10–16 мая)

I. Задача Штурма–Лиувилля

15.4(8); 15.15(6,7); 15.17.

1. Свести к интегральному виду задачи:

а) $e^{2x}(y'' - 4y' + 3y) = \lambda y, \quad 0 < x < \ln 2, \quad y'(0) - y(0) = 0, \quad y'(\ln 2) = 0;$

б) $-(x+1)^2 y'' - 3(x+1)y' = \lambda y + f(x), \quad 0 < x < 1, \quad y'(0) = \alpha y(0), \quad y'(1) = 0,$
где $\alpha \geq 0$, f — непрерывная на отрезке $[0; 1]$ функция;

в) $x^2 u_{xx} - 2u = \lambda x \sqrt{x} u, \quad 0 < x < 2,$
 $u(x) = O(\sqrt{x})$ при $x \rightarrow +0, \quad u(2-0) = 0$, где параметр $\lambda \neq 0$.

II. Уравнения Лапласа и Пуассона в круговых областях. Метод Фурье

16.1(3).

2. Решить краевые задачи:

а) $\Delta u = 12x, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad 1 < r < 2,$

$$u|_{r=1} = 2 \cos^3 \varphi + 1 - \sin \varphi \cos \varphi,$$

$$u|_{r=2} = 16 \cos^3 \varphi - 4 \sin \varphi \cos \varphi;$$

б) $\Delta u = 4 \frac{(x-y)^2}{x^2 + y^2}, \quad 1 < r < 2, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2},$

$$(2u - u_r)|_{r=1} = \frac{2xy}{x^2 + y^2}, \quad u_r|_{r=2} = \frac{8x^2}{x^2 + y^2}.$$

3. а) Решить внутреннюю задачу Неймана для круга:

$$\Delta u = x^2 + y^2, \quad x^2 + y^2 < 1, \quad \frac{\partial u}{\partial \bar{n}} \Big|_{x^2 + y^2 = 1} = y + \alpha, \quad x^2 + y^2 = 1,$$

для каждого значения параметра $\alpha \in \mathbb{R}$ (или доказать, что решений нет).

б) Решить краевую задачу:

$$\Delta u = \frac{3(x^2 - y^2) + y}{(x^2 + y^2)^{5/2}}, \quad r > 1, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi;$$

$$u_r|_{r=1} = -2 \sin \varphi + 4 \sin 2\varphi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi.$$

III. Сферические функции

16.26(2); 16.28(2); 16.30(7); 16.24; 16.25.

4. Для шара $D : x^2 + y^2 + z^2 < 4$ найти все функции $u \in C^2(D) \cap C^1(\bar{D})$, удовлетворяющие уравнению $\Delta u = 0$, $(x, y, z) \in D$ и граничному условию $\left(u + \frac{\partial u}{\partial \bar{n}}\right)\Big|_{x^2+y^2+z^2=1} = xz^2$, $x^2 + y^2 + z^2 < 4$, где \bar{n} – внешняя нормаль к границе области D .

5. Для сферического слоя $D : 1 < x^2 + y^2 + z^2 < 4$ найти все функции $u \in C^2(D) \cap C^1(\bar{D})$, удовлетворяющие уравнению $\Delta u = 0$, $(x, y, z) \in D$, и граничному условию $\left(u + \frac{\partial u}{\partial \bar{n}}\right)\Big|_{x^2+y^2+z^2=1} = y$, $x^2 + y^2 + z^2 = 1$, $\frac{\partial u}{\partial \bar{n}}\Big|_{x^2+y^2+z^2=4} = 0$, $x^2 + y^2 + z^2 = 4$, где \bar{n} – внешняя нормаль к границе области D .

IV. Функция Грина задачи Дирихле

17.1(1,2); 17.2(2); 17.4(1); 17.12(3); 17.15(4).

V. Потенциалы

18.6(1); 18.16; 18.18(4); 18.19(1); 18.20; 18.22(3); 18.43*.

Задания составили:

к. ф.-м. н., доцент В. В. Шаньков
ст. преподаватель С. И. Колесникова

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе
А. А. Воронов
17 января 2023 г.

ПРОГРАММА

по дисциплине: **Вычислительная математика**
по направлению подготовки: 03.03.01 «Системный анализ и управление»
физтех-школа: **ФАКТ**
кафедра: **вычислительной физики**
курс: 3
семестр: 6
лекции: – 30 часов Экзамен – нет
практические (семинарские)
занятия – нет Диф. зачет – 6 семестр
лабораторные занятия – 30 часов Самостоятельная работа – 75 часов

ВСЕГО ЧАСОВ – 60

Программу и задание составила

ассистент Т. Ю. Салихова

Программа принята на заседании кафедры
вычислительной физики
22 ноября 2022 года.

Заведующий кафедрой
к.ф.-м.н., доцент

С. С. Симаков

В программу данного курса включены основные разделы вычислительной математики: теория погрешностей, теория аппроксимации функций, численные методы решения линейных и нелинейных систем уравнений, численное интегрирование, численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений и разностных уравнений.

В ходе изучения курса студент будет обладать следующими компетенциями:

- знания основных вычислительных методов, применяемых для аппроксимации функций, решения линейных и нелинейных систем уравнений, дифференциальных уравнений, численного интегрирования и дифференцирования;
- умение применять численные методы для решения конкретных вычислительных задач;
- умение исследовать вычислительные методы на сходимость, аппроксимацию, устойчивость;
- умение строить вычислительные алгоритмы для решения конкретных задач с помощью компьютера;
- умение решать корректно поставленные задачи с помощью компьютера;
- умение анализировать полученные численные решения;
- умение работать с учебными онлайн ресурсами.

Все указанные компетенции реализуются и проверяются в ходе учебного процесса с использованием лекций, семинаров, лабораторных работ, заданий, контрольных работ, зачетов, онлайн-ресурсов.

Тематический план учебной дисциплины

*) Далее «звёздочкой» отмечены пункты программы, которые (по усмотрению преподавателя) можно опустить из рассмотрения.

I) Численное дифференцирование. Построение формул для приближённого вычисления производных для функций, заданных таблицей своих значений:

- а) на основе предварительного интерполирования функций,
- б) методом неопределённых коэффициентов.

Анализ погрешности формул численного дифференцирования. Неустойчивость формул численного дифференцирования. Разделённые разности. Связь их с формулами численного дифференцирования.

II) Численное интегрирование. Квадратурные формулы Ньютона–Котеса. Простейшие квадратурные формулы: прямоугольников, трапеций, Симпсона. Оценка погрешности квадратурных формул. Об устойчивости

квадратурных формул. Вычисление несобственных интегралов.
*) Квадратурные формулы Гаусса.

III) Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Простейшие методы решения задачи Коши для одного ОДУ 1-го порядка, разрешённого относительно производной. Явный и неявный методы Эйлера. Представление о рассматриваемых методах как о разностных схемах, аппроксимирующих исходную задачу. Модифицированный метод Эйлера. Метод Эйлера с пересчётом. Варианты методов Рунге–Кутты. Многоточечные методы. Варианты методов Адамса.

IV) Численное решение краевых задач. Линейный случай: непосредственная аппроксимация исходной задачи, сведение её к решению последовательности задач Коши. Нелинейные задачи (на примере уравнения 2-го порядка): а) прогонка с итерациями, б) метод «пристрелки». Разностные схемы для ОДУ. Аппроксимация, устойчивость, сходимость. Теорема о сходимости численного решения к решению исходной задачи.

V) Элементы теории разностных уравнений. Примеры аналитических решений разностных задач. Примеры сравнения точного решения исходной задачи для ОДУ с аналитическим решением соответствующей разностной задачи, аппроксимирующей исходную.

Литература

Основная

1. *Косарев В.И.* 12 лекций по вычислительной математике. – 2-е изд. – Москва : Изд-во МФТИ, 2000. – 224 с.
2. *Аристова Е.Н., Завьялова Н.А., Лобанов А.И.* Практические занятия по вычислительной математике. Часть I. – Москва : Изд-во МФТИ, 2014. – 242 с.
3. *Аристова Е.Н., Завьялова Н.А., Лобанов А.И.* Практические занятия по вычислительной математике в МФТИ. Часть II. – Москва : МФТИ, 2015. 310 с.
4. *Барabanщиков А.В., Гамилов Т.М., Демченко В.В. [и др.].* Упражнения и задачи контрольных работ по вычислительной математике : учеб. пособие / Барabanщиков А.В., Гамилов Т.М., Демченко В.В. [и др.] ; под ред. Демченко В.В. В двух частях. Ч. I. - Изд. 2-е, перераб. и доп. – Москва : МФТИ, 2017. – 204 с.

Дополнительная

1. *Рябенский В.С.* Введение в вычислительную математику. – Москва : Наука–Физматлит, 1994. 335 с.; 3-е изд. – Москва : Физматлит, 2008. – 288 с.
2. *Лобанов А.И., Петров И.Б.* Лекции по вычислительной математике. – Москва : Интернет-Университет информационных технологий, 2006. – 522 с.
3. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. – Москва : Наука, 1978. – 512 с.

4. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – Москва : Наука, Главная редакция физ.-мат. литературы, 1989.
5. Иванов В.Д., Косарев В.И., Лобанов А.И., Петров И.Б., Пирогов В.Б., Рябенский В.С., Старожилова Т.К., Тормасов А.Г., Утюжников С.В., Холодов А.С. Лабораторный практикум «Основы вычислительной математики». – 2-е изд., испр. и доп. – Москва : МЗ-пресс, 2003. – 196 с.

ЗАДАНИЯ

Задачи по темам программных пунктов I), II).

1-е ЗАДАНИЕ (срок сдачи – последняя декада марта)

Задачи даны по [1] основного списка литературы: Лекция 6: 2, 3, 5, 8.

Задачи даны по [2] основного списка литературы: Глава VII: 8.16, 8.20, 8.24 а), б), 9.3, 9.4.

Задачи по темам программных пунктов III) – V).

2-е ЗАДАНИЕ (срок сдачи — первая декада мая)

Задачи даны по [1] основного списка литературы: Лекция 7: 1, 2, 4.

Задачи даны по [3] основного списка литературы: Глава IX: 7.3 3), 4); 7.4 2); 7.8 4); 7.9; 7.13 4), 5). Глава XI: 8.1 б); 8.3 а); 8.7; 9.3 а).

Задачи для практического решения

раздаются преподавателем.

Примеры задач для контрольной работы

1. Выписать расчетные формулы метода Эйлера с пересчётом для решения системы ОДУ при заданных начальных условиях:
 $dv/dx = v^4 + w^2$, $dw/dx = v^3w$, $1 \leq x \leq 2$, $v(1) = 2$, $w(1) = 9$.
2. С каким порядком на сетке $D_h = \{x_l: x_l = lh, l = 0 \div L, h = 1/L\}$ разностная схема а) аппроксимирует дифференциальную задачу б) на решении у:
 а) $(3y_{l+1} - 2y_l + y_{l-1})/h^2 - y_l = 0$, $l = 1 \div L - 1$, $y_0 = 1$, $y_1 = 1 + h + h^2/2$;
 б) $y'' - y = 0$, $0 \leq x \leq 1$, $y(0) = 1$, $y'_x(0) = 1$?
3. Методом стрельбы решить краевую задачу $y'' = 6y' + 3x$, $y(0) = 1$, $y(1) = 4$, $0 \leq x \leq 1$ на сетке $D_h = \{x_n: x_n = nh, n = 0 \div N, h = 1/3\}$.
4. Найти общее решение разностного уравнения:
 $3y_n - 4y_{n-1} + y_{n-2} = 2anh^2$, $a, h = \text{const} \neq 0$.

Контрольная работа 1 – первая декада марта.

Контрольная работа 2 – последняя декада апреля.

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе
А. А. Воронов
17 января 2023 г.

ПРОГРАММА

по дисциплине: **Вычислительная математика**
по направлению подготовки: 03.03.01 «Прикладные математика и физика»
физтех-школа: **ФАКТ**
кафедра: **вычислительной физики**
курс: 3
семестр: 6
лекции – 30 часов Экзамен – нет
практические (семинарские)
занятия – нет Диф. зачет – 6 семестр
лабораторные занятия – 30 часов
Самостоятельная работа – 75 часов.
ВСЕГО ЧАСОВ – 60

Программу и задание составила к.ф.-м.н. Н. А. Завьялова

Программа принята на заседании кафедры
вычислительной физики
22 ноября 2022 года.

Заведующий кафедрой
к.ф.-м.н., доцент

С.С. Симаков

1. Уравнения гиперболического типа

Методы построения аппроксимирующих разностных уравнений для уравнений в частных производных (на примере волнового уравнения и уравнения переноса). Аппроксимация, устойчивость, сходимость. Приемы исследования разностных задач на устойчивость. Принцип максимума, спектральный признак устойчивости, принцип замороженных коэффициентов.

Теорема Годунова о связи порядка аппроксимации и монотонности для линейных разностных схем.

Корректная постановка краевых условий для системы уравнений с частными производными гиперболического типа. Характеристики, инварианты Римана. Разностные схемы для характеристической формы записи системы. Уравнения акустики.

Нелинейное уравнение Хопфа.

Уравнения акустики и газовой динамики*.

2. Уравнения параболического типа и решение неявных задач на их примере

Квазилинейное уравнение теплопроводности и его автомодельное решение. Разностные схемы для решения многомерных уравнений теплопроводности. Понятие о методах расщепления. Метод переменных направлений. Метод дробных шагов.

Техника переноса граничных условий с границы на расчетную ячейку.

Нормы в конечномерных пространствах. Обусловленность системы линейных алгебраических уравнений. Метод простых итераций. Необходимое, достаточное условие сходимости метода простых итераций.

Применение итерационных методов решения СЛАУ, после линеаризации уравнений, полученных с использованием неявных методов.

***Чебышёвское ускорение итераций*.**

Метод Ньютона для систем уравнений.

Вариационные методы решения СЛАУ: обобщенный метод минимальных невязок (GMRes), стабилизированный метод бисопряженных градиентов (BiCGStab).

Понятие о *предобуславливании*: предобуславливатель Якоби, неполное LU-разложение (ILU(0)).

Уравнения однофазной фильтрации*.

3. Численное решение уравнений эллиптического типа

Численные методы решения уравнений в частных производных эллиптического типа. Разностная схема «крест» для численного решения уравнений Лапласа, Пуассона. Компактная схема 4-го порядка точности «крест на крест».

Схемы на неструктурированных сетках, представления о построении треугольных сеток в областях сложной формы.

Интегро-интерполяционный метод построения разностных схем. Конечно-объемные методы. МКЭ*.

Использование многосеточных методов (MultiGrid).

*- вариативная часть программы.

Литература

Основная

1. *Аристова Е.Н., Лобанов А.И.* Практические занятия по вычислительной математике в МФТИ : учеб. пособие. Часть II. – Москва : МФТИ, 2015. – 310 с.
2. *Барабаничиков А.В., Гамилов Т.М., Демченко В.В., Пастушков Р.С., Симаков С.С.* Упражнения и задачи контрольных работ по вычислительной математике. Часть II: – Москва : МФТИ, 2014. – 182 с.
3. *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. – Москва : Наука, 1966. – 688 с.
4. *Басниев К.С., Кочина И.Н., Максимов В.М.* Подземная гидромеханика : учебник для вузов. – Москва : Недра, 1993. – 416 с.

Дополнительная

1. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. – Санкт-Петербург.: БХВ-Петербург, 2011 – 592 с.
2. *Самарский А.А., Гулин А.В.,* Численные методы. – Москва : Наука, 1989.

ЗАДАНИЯ

Задачи в заданиях из п. 1 основной литературы

1-е задание (срок сдачи 25–30 марта)

Теоретические задачи:

*Аппроксимация, сходимост*ь: XII.7.2; XII.7.4 (см. [2], стр. 79, сравнить с результатом построения методом неопределенных коэффициентов); XII.7.15 (п. в) – исследовать на устойчивость по спектральному признаку); XII.7.19. ГСУ: XIV.8.5; XIV.9.2 (пп. а) – ж), так же исследовать на аппроксимацию и устойчивость); XIV.9.6; XIV.9.8 (построить схему и исследовать на сходимость); XIV.9.11 (п. а)); XIV.9.14 (п. б)).

Практические задачи

1. Задача XIV.10.2 из [1]

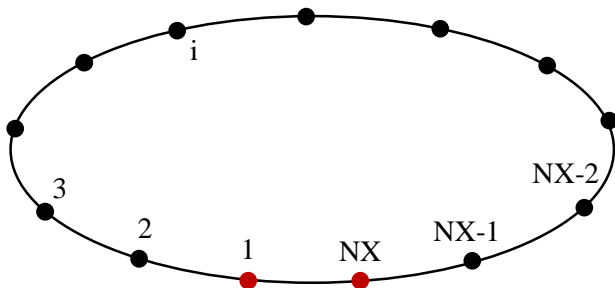
Здесь необходимо реализовать схему уголок (п. а)), а также схему Лакса–Вендрофа (п. б)) с начальными и граничными условиями, указанными в задачнике. Сетка равномерная:

$$x_i = (i - 1)h, \quad i = 1, \dots, NX, \quad h = \frac{L}{NX - 1}, \quad x_1 = 0, \quad x_{NX} = L.$$

Основную трудность здесь представляет реализация периодических граничных условий для п. б) (значение в последнем узле сетки (индекс NX) должно совпадать со значением в первом узле сетки (индекс 1), т.е. $y_{NX}^{n+1} = y_1^{n+1}$).

Обе схемы явные. Так, для схемы уголок $y_i^{n+1} = f(y_{i-1}^n, y_i^n)$, поэтому реализация проста: для $i = 2, \dots, NX$ (индекс $i = 1$ мы не можем здесь использовать, т.к. значения $y_{i-1}^n = y_0^n$ у нас нет на сетке) считаем соответствующие значения y_i^{n+1} . Затем для учета граничного условия делаем переприсваивание $y_1^{n+1} = y_{NX}^{n+1}$. После этого переходим к следующему временному слою.

Для схемы Лакса–Вендрофа $y_i^{n+1} = f(y_{i-1}^n, y_i^n, y_{i+1}^n)$. Поэтому расчет решения на следующем временном слое проводится для $i = 2, \dots, NX-1$. Для учета кольцевых граничных условий можно применить следующий трюк: $y_{NX}^{n+1} = f(y_{NX-1}^n, y_{NX}^n, y_1^n)$, $y_1^{n+1} = f(y_{NX}^n, y_1^n, y_2^n)$, где в качестве f используется та же расчетная формула, что и при расчете решения во внутренних узлах сетки. Это легко можно понять, если представить расчетную область в форме замкнутой кривой:



Здесь черные точки соответствуют внутренним узлам, красные – граничным.

В качестве входных данных использовать следующие параметры: размер области L равен 20 (переменные в этой задаче безразмерные), время расчета $T = 18$. Шаг по пространству h принять равным 0.5, шаг по времени τ взять из числа Куранта CFL по формуле

$$\tau = CFL * h.$$

Поэтому в качестве входных параметров здесь используются числа Куранта. Расчеты необходимо провести для следующих значений CFL: 0.6; 1; 1.01.

В качестве результата необходимо построить распределения решения по пространственной координате $y(x_i)$ в различные моменты времени (например, $T = 0; 5; 10; 15; 18$ или выводить результаты через постоянное время `dt_out_results`).

Таким образом, примерная схема реализации программы имеет вид:

1. Задание начальных данных.
2. Генерация сетки.
3. Цикл по времени, в котором
 - а) проводится расчет y_i^{n+1} для $i = 2, \dots, NX$ в соответствии с используемым численным методом;
 - б) рассчитывается значение y_1^{n+1} (учет граничных условий);
 - в) инкрементирование времени $t += \tau$;
 - г) если $t \geq \text{time_next_output}$, сохраняем рассчитанное распределение y_i , $\text{time_next_output} += \text{dt_out_results}$ (запись результатов).

Что необходимо знать по теории: аппроксимация, устойчивость, сходимость, монотонность разностной схемы. Метод неопределенных коэффициентов для составления разностной схемы (уметь решать задачи), исследование разностной схемы на аппроксимацию (уметь решать задачи), исследование на устойчивость по спектральному признаку (уметь решать задачи, а также понимать, для каких уравнений он применяется), принцип замороженных коэффициентов.

2. Задача Римана о распаде разрыва

Рассматривается одномерная область $x \in [-L, L]$, $L = 10$ м, заполненная идеальным газом (показатель адиабаты равен 5/3). По середине области (при $x = 0$) располагается тонкая перегородка, по обе стороны от которой газ имеет различные термодинамические параметры. В частности, параметры газа слева от перегородки $v_L = 0, \rho_L = 13 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, P_L = 10$ атм, пара-

метры газа справа от перегородки $v_R = 0, \rho_R = 1.3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, P_R = 1 \text{ атм}$. В момент времени $t = 0$ перегородку убирают. С помощью схемы Куранта–Изаксона–Риса (КИР) получить численное решение задачи о распаде разрыва до момента времени 0.02 с. Сопоставить полученный результат с аналитическим решением (стр. 51–53 в [3]; [4]).

Система уравнений одномерной газовой динамики, дополненная уравнением состояния идеального газа, имеет вид

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(P + \rho u^2) = 0, \\ \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u e) + P \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \\ P = (\gamma - 1)\rho e \end{cases}$$

Подставив вместо давления его значение из последнего уравнения, приходим к системе (см. [2], стр. 107, уравнения 11.2.2 – 11.2.3):

$$\frac{\partial \vec{w}}{\partial t} + \mathbf{A} \frac{\partial \vec{w}}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

где \vec{w} – вектор консервативных переменных:

$$\vec{w} = \{\rho, \rho u, \rho e\}^T.$$

Для решения системы уравнений (1) предлагается использовать разложение матрицы \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = (\mathbf{\Omega}^T)^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Omega}^T,$$

а также схему КИР:

$$\begin{aligned} (\mathbf{\Omega}^T)_l^n \frac{\vec{w}_l^{n+1} - \vec{w}_l^n}{\tau} + ((\mathbf{\Lambda} + |\mathbf{\Lambda}|)\mathbf{\Omega}^T)_l^n \frac{\vec{w}_l^n - \vec{w}_{l-1}^n}{2h} \\ + ((\mathbf{\Lambda} - |\mathbf{\Lambda}|)\mathbf{\Omega}^T)_l^n \frac{\vec{w}_{l+1}^n - \vec{w}_l^n}{2h} = 0. \end{aligned}$$

В задачнике [2] допущена опечатка в формуле для матрицы $\mathbf{\Omega}^T$. Матрица $\mathbf{\Omega}^T$ должна иметь следующий вид:

$$\mathbf{\Omega}^T = \begin{pmatrix} -uc & c & \gamma - 1 \\ -c^2 & 0 & \gamma - 1 \\ uc & -c & \gamma - 1 \end{pmatrix}.$$

После перегруппировки подобных слагаемых и умножения на матрицу $((\mathbf{\Omega}^T)^{-1})_l^n$ получаем расчетную формулу для вектора консервативных переменных на следующем временном слое:

$$\begin{aligned} \vec{w}_l^{n+1} = \vec{w}_l^n - \tau \mathbf{A}_l^n \frac{\vec{w}_{l+1}^n - \vec{w}_{l-1}^n}{2h} \\ + \tau ((\mathbf{\Omega}^T)^{-1} |\mathbf{\Lambda}| \mathbf{\Omega}^T)_l^n \frac{\vec{w}_{l+1}^n - 2\vec{w}_l^n + \vec{w}_{l-1}^n}{2h}. \end{aligned} \quad (2)$$

Стоит обратить внимание на условие устойчивости для задачи с постоянными коэффициентами:

$$CFL \equiv \frac{\tau \max_i |\lambda_i|}{h} \leq 1. \quad (3)$$

Поэтому в процессе решения необходимо на каждом временном слое контролировать выполнение условия устойчивости (3). Иными словами, если при текущем шаге по времени условие устойчивости (3) нарушается, необходимо уменьшить шаг по времени, а затем определять неизвестные на следующем временном слое по (2). Так как задача нелинейная, то разностная схема (2) может быть устойчивой при числах Куранта, гораздо меньших 1. У себя в расчетах я использовала числа Куранта, меньшие 0.01.

Граничные условия – нулевой градиент всех переменных, что позволяет газу покидать область через границы. Для вектора исходных (примитивных/физических) переменных граничные условия имеют вид:

$$\vec{v}_1 = \vec{v}_2, \quad \vec{v}_{NX} = \vec{v}_{NX-1}.$$

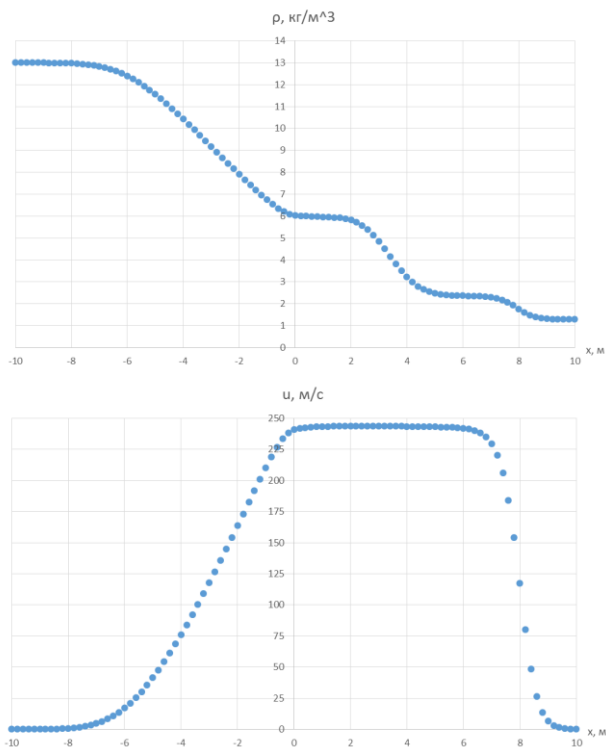
Примерный порядок действий при решении задачи:

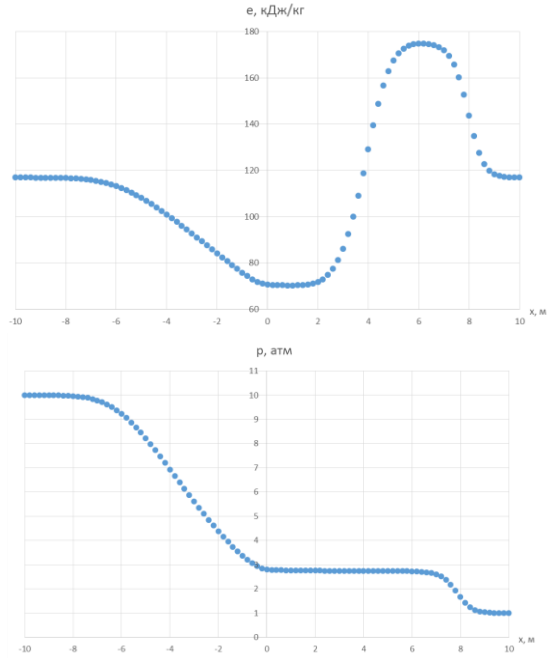
1. Задание начальных данных (параметры газа слева и справа от перегородки, шаг по пространству, шаг по времени, максимальное CFL и т.д.).
2. Генерация расчетной сетки (x_i) .
3. Цикл по времени, в котором
 - а) рассчитываются матрицы $(\mathbf{\Omega}^T)_l^n$, $((\mathbf{\Omega}^T)^{-1})_l^n$, $|\mathbf{\Lambda}|_l^n$, \mathbf{A}_l^n ;
 - б) проверяется выполнение условия устойчивости (3);
 - в) расчет вектора консервативных переменных по (2);

- г) переход от консервативных переменных к примитивным ($\vec{v} = \{\rho, u, e\}^T$);
- д) учет граничных условий ($i = 1$ и $i = NX$) на примитивные переменные;
- е) расчет давления $P = (\gamma - 1)\rho e$;
- ж) инкрементирование времени ($t = t + \tau$), шага по времени ($\tau = \max(\tau, \tau_{init})$), запись результатов (при необходимости).

Получаемые распределения неизвестных

($NX = 100$, $\tau = 10^{-7}$ с, $CFL_{\max} = 0.01$) в момент времени 0.015 с:



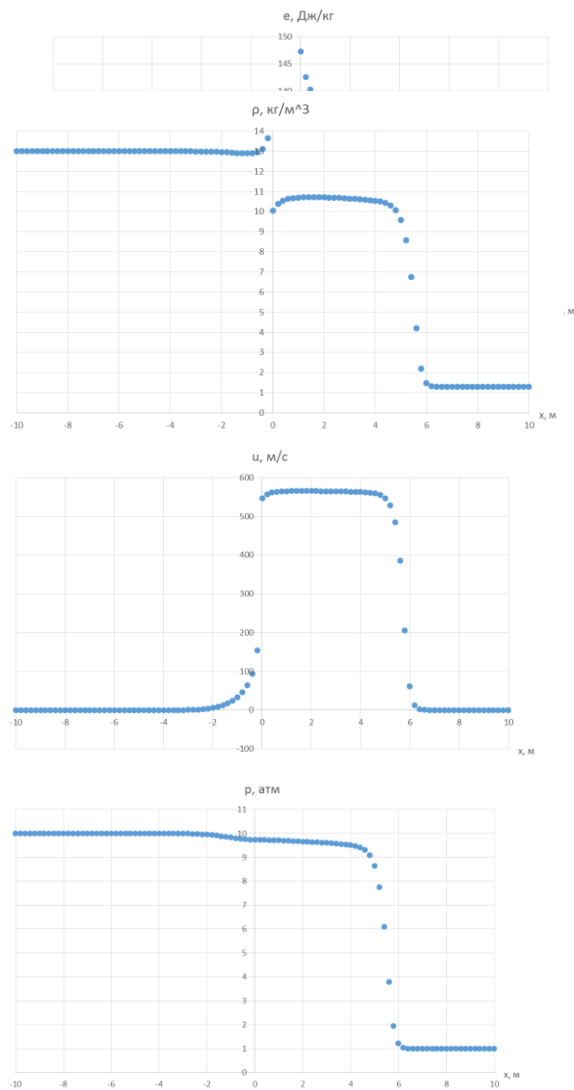


При отладке программы полезно проверять размерности переменных, а также провести тестирование с постоянными начальными условиями (значения переменных слева и справа от перегородки совпадают между собой). В этом случае решение в любой момент времени соответствует начальному распределению неизвестных.

Использование подхода с переходом к инвариантам Римана вместо разностной схемы (2) приведет к **другой схеме**:

$$\begin{aligned}
 (\Omega^T)_l^n \vec{w}_l^{n+1} = & (\Omega^T)_l^n \vec{w}_l^n \\
 & - \tau(\Lambda \\
 & + |\Lambda|)_l^n \frac{(\Omega^T)_l^n \vec{w}_l^n - (\Omega^T)_{l-1}^n \vec{w}_{l-1}^n}{2h} \\
 & - \tau(\Lambda \\
 & - |\Lambda|)_l^n \frac{(\Omega^T)_{l+1}^n \vec{w}_{l+1}^n - (\Omega^T)_l^n \vec{w}_l^n}{2h}.
 \end{aligned} \tag{4}$$

в результате чего получается нефизическое распределение неизвестных:



Нужно получить распределения неизвестных (ρ, u, e, P) в любой момент времени (≤ 0.02 с), аналогичные представленным ранее.

Что необходимо знать по теории: определение гиперболических систем уравнений (ГСУ), характеристики, инварианты Римана, уметь исследовать на устойчивость по спектральному признаку ГСУ, корректная постановка граничных условий для ГСУ.

2-е ЗАДАНИЕ (срок сдачи 13–18 мая)

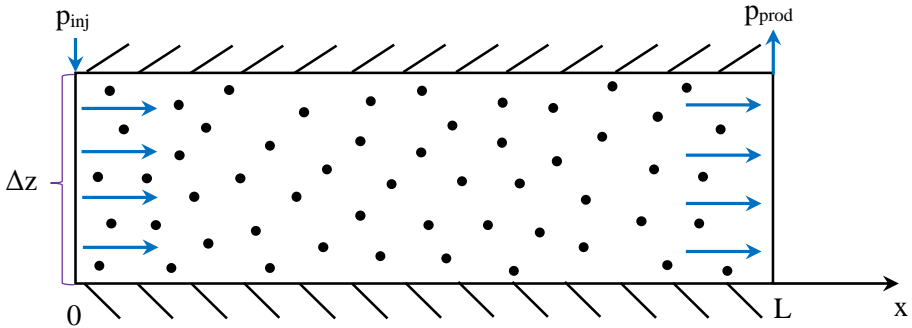
Теоретические задачи

Уравнения параболического типа: XII.7.6; XIII.7.3; XIII.9.3; XIII.9.8; XIII.9.9; XIII.9.17.

Уравнения эллиптического типа: XV.7.1; XV.7.4; XII.7.8; XII.7; XII.7.27; 8.6.6 (задача взята из [2], пример решения – там же на стр. 50–51).

3. Плоскопараллельная однофазная фильтрация вязкоупругой жидкости

Рассматривается горизонтальный пласт постоянной толщины ($\Delta z = 10$ м) и ширины ($B = 50$ м), длина пласта L равна 500 м. Начальное пластовое давление (p_0) всюду постоянно и равно 100 атм. Пласт вскрыт галереей нагнетательных ($x = 0$) и добывающих ($x = L$) скважин, давление которых (соответственно $p_{inj} = 150$ атм и $p_{prod} = 50$ атм) поддерживается постоянным:



В пласте образуется неустановившийся прямолинейно-параллельный поток упругой жидкости. Давление (p) в любой точке потока определяется из уравнения упругого режима фильтрации:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k\rho}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \right) = \varphi c_f \rho_0 \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (1)$$

Здесь k – проницаемость пласта ($10 \text{ мД} \approx 10^{-14} \text{ м}^2$), μ – вязкость жидкости ($1 \text{ сПз} \approx 10^{-3} \text{ Па} \cdot \text{с}$), ϕ – пористость пласта (0.2), ρ – плотность жидкости, которая предполагается зависящей от давления:

$$\rho = \rho_0 (1 + c_f(p - p^0)), \quad (2)$$

где c_f – сжимаемость жидкости (10^{-4} атм^{-1}), $\rho_0 = 1000 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ – плотность жидкости при опорном давлении p^0 (120 атм). Последнее давление p^0 соответствует давлению при проведении эксперимента по определению плотности (не путать с начальным пластовым давлением).

Аппроксимация уравнения (1) на равномерной сетке (шаг $h = \text{const}$) приводит к системе уравнений с трехдиагональной матрицей. i -е уравнение системы имеет следующий вид:

$$c_i p_{i-1}^{n+1} + a_i p_i^{n+1} + b_i p_{i+1}^{n+1} = d_i, \quad (3)$$

где коэффициенты a_i , b_i , c_i , d_i вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{k \rho_{i-1/2}^n}{\mu h^2}, \\ b_i &= \frac{k \rho_{i+1/2}^n}{\mu h^2}, \\ a_i &= \left(-c_i - b_i - \frac{\phi c_f \rho_0}{\tau} \right), \\ d_i &= -\frac{\phi c_f \rho_0}{\tau} p_i^n. \end{aligned} \quad (4)$$

Стоит обратить внимание, что задача нелинейная, т.к. плотность является функцией решения (давления p). Так как сжимаемость жидкости достаточно мала, то для вычисления плотности $\rho_{i\pm 1/2}$ на границах сеточного блока используется явный метод (вычисляется по давлению на предыдущем временном слое) со взвешиванием «против потока», т.е.:

$$\begin{aligned} \rho_{i+1/2}^n &= \begin{cases} \rho(p_i^n), & \text{если } p_i^n \geq p_{i+1}^n \\ \rho(p_{i+1}^n), & \text{если } p_i^n < p_{i+1}^n \end{cases} \\ \rho_{i-1/2}^n &= \begin{cases} \rho(p_{i-1}^n), & \text{если } p_{i-1}^n \geq p_i^n \\ \rho(p_i^n), & \text{если } p_{i-1}^n < p_i^n \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, зная распределение давления с предыдущего временного слоя, можно из (4–5) определить коэффициенты в уравнении (3). Проведение итераций не требуется, в результате чего представленный метод учета

нелинейностей прост в реализации. Для представленной задачи шага по времени, равного 1 сутки, должно быть достаточно для получения устойчивого решения. Но лучше взять шаг по времени меньший, чтобы получить более детальную картину распространения давления от времени.

Остановимся на алгоритме учета граничных условий. Для сетки с распределенными узлами учет граничных условий приведет к системе уравнений следующего вида:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & & & & & & & \\ c_2 & a_2 & b_2 & & & & & & \\ & c_3 & a_3 & b_3 & & & & & \\ & & \dots & \dots & \dots & & & & \\ & & & c_i & a_i & b_i & & & \\ & & & & \dots & \dots & & & \\ & & & & & c_{NX-2} & a_{NX-2} & b_{NX-2} & \\ & & & & & & c_{NX-1} & a_{NX-1} & b_{NX-1} \\ & & & & & & & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1^{n+1} \\ p_2^{n+1} \\ p_3^{n+1} \\ \dots \\ p_i^{n+1} \\ \dots \\ p_{NX-2}^{n+1} \\ p_{NX-1}^{n+1} \\ p_{NX}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{inj} \\ d_2 \\ d_3 \\ \dots \\ d_i \\ \dots \\ d_{NX-2} \\ d_{NX-1} \\ p_{prod} \end{pmatrix} \quad (6)$$

Таким образом $a_1 = 1$, $b_1 = 0$, $a_{NX} = 1$, $c_{NX} = 0$.

Для блочно-центрированной сетки учет граничных коэффициентов осуществляется путем добавления фиктивного узла (по одному с каждой границы), аппроксимации граничного самого условия и преобразования коэффициентов a_1 , b_1 , a_{NX} , c_{NX} с учетом разностного уравнения (подробнее см. лекцию 1).

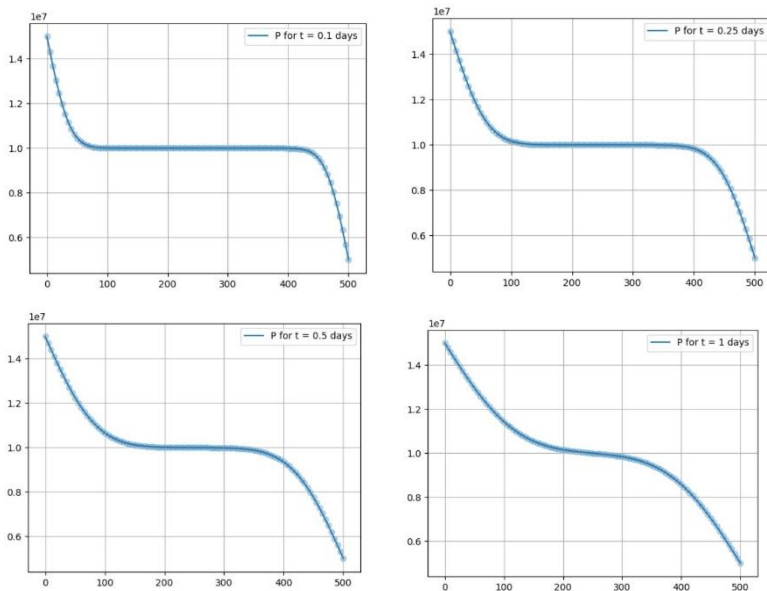
Нужно реализовать программу, которая позволяет определить распределение давления в пласте в различные моменты времени ($T_{\max} = 10$ дней).

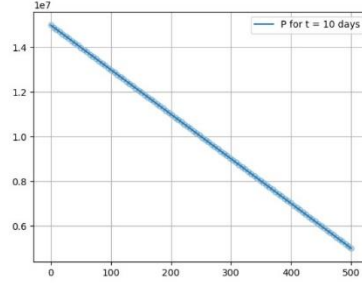
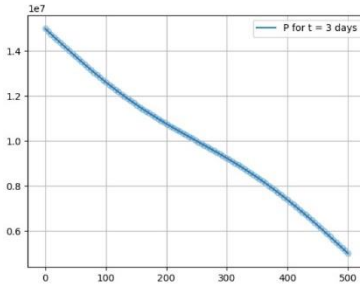
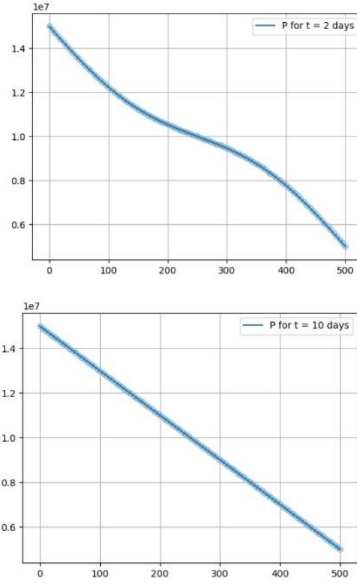
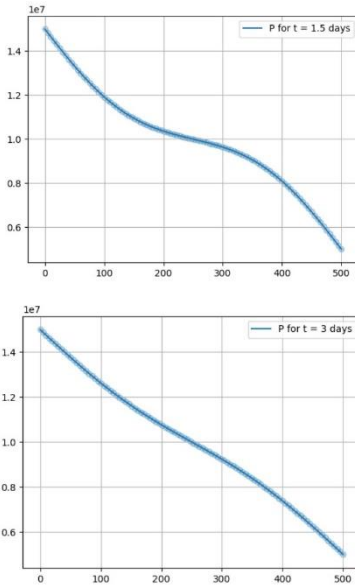
Примерная схема реализации программы:

1. Задание начальных данных (для первого шага по времени – p^0 , для последующих шагов – p^n).

2. Генерация сетки (использовать сетку с распределенными узлами, около 100 узлов, шаг по времени взять примерно 1 час).
3. Цикл по времени, в котором
 - а) рассчитываются коэффициенты матрицы (6) системы линейных уравнений и правая часть. При расчете плотности не забывать анализировать направление потока;
 - б) методом прогонки находится решение системы уравнений (6) $\rightarrow p_i^{n+1}$;
 - в) инкрементирование времени $t += \tau$;
 - г) если $t \geq \text{time_next_output}$, сохраняем рассчитанное распределение p_i , $\text{time_next_output} += \text{dt_out_results}$ (запись результатов примерно через 0.1 день).

Получаемые распределения давления (правда, в Паскалях вместо атмосфер) в различные моменты времени (не забываем подписывать оси):





Что необходимо знать по теории: типы сеток (блочнo-центрированная и сетка с распределенными узлами), уметь аппроксимировать уравнения теплопроводности (также при наличии нелинейностей в коэффициентах) и граничные условия на различных типах сеток; метод прогонки (для каких матриц применяется, условие устойчивости); уравнения, описывающие многофазную фильтрацию + сопутствующие определения; методы аппроксимации нелинейных коэффициентов в уравнении теплопроводности (взвешивание «по» и «против потока»); метод Ньютона для учета нелинейности (и его модификации).

4. Двумерное уравнение теплопроводности

Рассматривается следующая задача:

$$25\lambda \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad x, y, t \in [0,1],$$

$$\varphi(x, y, 0) = \cos(\pi x) \sin(5\pi y),$$

$$\varphi(x, 0, t) = \varphi(x, 1, t) = 0, \quad x, t \in [0,1]$$
(1)

$$\begin{aligned}\varphi(0, y, t) &= \sin(5\pi y)e^{-50\pi^2\lambda t}, \varphi(1, y, t) \\ &= -\sin(5\pi y)e^{-50\pi^2\lambda t}, \quad y, t \in [0, 1].\end{aligned}$$

В качестве λ используется значение 10^{-4} .

Задача (1) допускает аналитическое решение:

$$\varphi(x, y, t) = \cos(\pi x)\sin(5\pi y)e^{-50\pi^2\lambda t}. \quad (2)$$

Необходимо численно решить задачу (1) полностью неявным методом. Использовать сетку с распределенными узлами (шаг постоянен). Для решения получаемой в результате дискретизации системы уравнений с пятидиагональной матрицей использовать полинейный метод Гаусса–Зейделя. Полученные результаты моделирования сопоставить с аналитическим решением (2), а именно нужно построить график зависимости $\|\varphi_{numerical}(x_i, y_j) - \varphi_{analytical}(x_i, y_j)\|$ от шага по пространству при фиксированном моменте времени. Для этого необходимо провести расчеты со следующим числом ячеек ($NX = NY$): 10, 20, 50, 100, 200, 500, 1000. Сравнить полученный порядок сходимости по пространству с теоретическим.

Примерная схема реализации программы:

1. Задание начальных данных.
2. Генерация сетки.
3. Цикл по времени, в котором:
 - 3.1. Рассчитываются коэффициенты матрицы системы линейных уравнений и правая часть.
 - 3.2. Полинейным методом Гаусса–Зейделя находится φ_i^{n+1} .
 - 3.3. Инкрементирование времени $t += \tau$;
 - 3.4. Если $t \geq \text{time_next_output}$, сохраняем рассчитанное распределение p_i , $\text{time_next_output} += \text{dt_out_results}$ (запись результатов примерно через 0.01).

Что необходимо знать по теории: дискретизация уравнений параболического типа на двумерной сетке, методы упорядочения; методы простой итерации, Якоби и Зейделя для решения СЛАУ (а также критерии и достаточные условия сходимости МПИ, Якоби и Зейделя); модификации метода Гаусса–Зейделя для решения двумерных задач; методы релаксации; неявный метод переменных направлений; методы неполной факторизации.

1-я контрольная работа – третья декада марта

2-я контрольная работа – вторая декада мая

УТВЕРЖДЕНО
Проректор по учебной работе
А. А. Воронов
17 января 2023 года

ПРОГРАММА

по дисциплине: Квантовая механика

по направлению подготовки:

03.03.01 «Прикладные математика и физика»

физтех-школа: ФАКТ

кафедра: теоретической физики

курс: 3

семестр: 6

лекции – 30 часов

Дифф. зачет – 6 семестр

практические (семинарские)

занятия – 30 часов

ВСЕГО АУДИТОРНЫХ ЧАСОВ – 60 Самостоятельная работа
– 30 часов

Программу и задание составил к.ф.-м.н., доцент
А.А. Зябловский

Программа принята на заседании
кафедры теоретической физики
24 декабря 2022 года

Заведующий кафедрой
д.ф.-м.н.

Э. Т. Ахмедов

Принципы квантовой механики. Одночастичные системы

1. Постулаты квантовой механики. Векторная (дираковская) формулировка

Состояние и пространство состояний, физические величины (наблюдаемые) и операторы, принцип суперпозиции, полнота описания квантовой системы, уравнение Шредингера. Понятие представления, координатное и импульсное представление, волновая функция, матричные элементы операторов. Задача на собственные значения. Эрмитовское сопряжение и эрмитовы операторы, свойства их собственных векторов.

2. Гамильтониан и другие основные операторы

Гамильтоновы системы, классический и квантовый гамильтонианы. Эволюция физических величин во времени, скобки Пуассона. Квантовые скобки Пуассона – коммутаторы. Соответствие между физическими величинами и операторами. Соотношения неопределенностей для квантовых систем. Постулат коммутационного соотношения между операторами координаты и импульса. Представление операторов координаты и импульса в координатном и импульсном представлении. Функция от оператора, уравнение Шредингера в координатном и импульсном представлении.

3. Некоторые свойства операторов

Эволюция состояния во времени, оператор эволюции. Интегралы движения. Условия одновременной измеримости физических величин. Интегралы движения и полный набор физических величин. Вырождение спектра и неоднозначность выбора представления (способа описания) состояния квантовой системы. Понятие симметрии.

4. Волновая функция

Волновая функция как координатное представление состояния. Физический смысл и свойства волновой функции. Граничные условия для связанных состояний и инфинитного движения. Уравнение непрерывности. Плотность вероятности и плотность потока вероятности. Теоремы Эренфеста. Общие свойства одномерного движения. Невырожденность дискретного спектра, осцилляционная теорема.

5. Гармонический осциллятор как одна из точно решаемых моделей

Гамильтониан, трехмерный и одномерный гармонические осцилляторы. Осцилляторные единицы энергии, длины и импульса. Повышающий \hat{a}^+ и понижающий \hat{a} операторы и запись с их помощью гамильтониана. Решение задачи в энергетическом представлении, энергетический спектр осциллятора и состояния. Соотношение неопределенностей для координаты и импульса в осцилляторе и его минимизация в основном состоянии. Понятие когерентного состояния. Состояния осциллятора в координатном и импульсном представлении.

6. Момент импульса

Изотропия пространства и момент импульса. Оператор поворота и его связь с оператором импульса. Коммутационные соотношения для проекций оператора импульса. Собственные состояния системы, обладающей определенным значением импульса. Значения, которые может принимать момент импульса. Координатное представление оператора момента, собственные функции. Полуцелые значения и понятие спина.

7. Центральное поле и атом водорода

Задача двух тел в классической и квантовой механике. Гамильтониан системы в случае центрального взаимодействия. Разделение радиальных и угловых переменных в сферической системе координат. Угловая часть волной функции и собственная функция оператора момента импульса. Вырождение энергетического спектра частицы в центральном поле. Кулоновское поле и атом водорода. Кулоновская и атомная система единиц. Энергетические спектр и состояния атома водорода, вырождение спектра водородоподобного атома. Классификация состояний атома водорода и частицы в произвольном центральном поле.

Приближенные методы квантовой механики

1. Квазиклассическое приближение

Действие в классической механике и уравнение Гамильтона–Якоби. Волновая функция стационарного состояния и ее выражение через квантовое действие. Уравнение для квантового действия, квазиклассическое разложение по степеням \hbar . Критерии применимости квазиклассического приближения, классически разре-

шенные и запрещенные области, вид волновой функции. Правила квантования Бора–Зоммерфельда и проникновение через потенциальный барьер. Понятие квазистационарных состояний, описание распада в квантовой механике.

2. Стационарная теория возмущений

Постановка задачи теории возмущений, стационарный случай. Функция Грина стационарного уравнения Шредингера и ряд стационарной теории возмущений. Поправки к состояниям и уровням энергии дискретного спектра. Случай вырожденного энергетического спектра. Непрерывный спектр.

Литература

Основная

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – Москва : Физматлит, 2010.
2. *Белоусов Ю.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – Москва : МФТИ, 2006.
3. *Белоусов Ю.М.* Методы теоретической физики. Часть 1. – Москва: МФТИ, 2010.
4. *Белоусов Ю.М., Бурмистров С.Н., Тернов А.И.* Задачи по теоретической физики. – Долгопрудный : ИД “Интеллект”, 2013.
5. *Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И.* Задачи по квантовой механике. – Москва : Наука, 1981.

Дополнительная

1. *Мессиа А.* Квантовая механика. – Москва : Наука; Т. 1, 1978; Т. 2, 1979.
2. *Киселев В.В.* Квантовая механика. – Москва : МЦНМО, 2009.
3. *Белоусов Ю.М., Кузнецов В.П., Смилга В.П.* Катехизис. Руководство по математике для начинающих изучать теоретическую физику. – Москва : МФТИ, 2005; Практическая математика. Руководство для начинающих изучать теоретическую физику. – Долгопрудный : ИД “Интеллект”, 2009.
4. *Давыдов А.С.* Квантовая механика. — Москва : Наука, 1973.

ЗАДАНИЕ 1

Упражнения

1. Найдите операторы, эрмитово сопряженные и обратные по отношению к операторам: а) инверсии \hat{I} и б) трансляции \hat{T}_a .
- 2.^C Найдите собственные значения и собственные состояния оператора инверсии \hat{I} .
- 3.^C Найдите собственные значения и собственные состояния оператора трансляции \hat{T}_a .
4. Найдите явный вид оператора $e^{i\varphi\hat{I}}$.
5. Убедитесь в справедливости следующих соотношений:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}, \quad [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}.$$

- 6.^C Докажите следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{x}_\alpha, F(\hat{\mathbf{p}})] = i\hbar \frac{\partial F(\hat{\mathbf{p}})}{\partial \hat{p}_\alpha};$$

$$[\hat{p}_\alpha, G(\hat{\mathbf{r}})] = -i\hbar \frac{\partial G(\hat{\mathbf{r}})}{\partial \hat{x}_\alpha}$$

7. Пусть $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$. Покажите, что в этом случае они удовлетворяют соотношению неопределенности

$$\langle \Delta \hat{A}^2 \rangle \langle \Delta \hat{B}^2 \rangle \leq \frac{1}{4} \langle \hat{C} \rangle,$$

где $\Delta \hat{A} = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$.

8. Используя “табличный” коммутатор операторов импульса и координаты и результаты упражнений 5 и 6, раскройте следующие коммутаторы:

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{\mathbf{p}}^2], \quad [U(\mathbf{r}), \hat{\mathbf{p}}], \quad [U(r), \hat{\mathbf{p}}^2],$$

9. Используя свойства оператора трансляции и результаты упражнений 6 и 8, преобразуйте операторное выражение

$$e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \hat{\mathbf{p}}} U(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{a} \hat{\mathbf{p}}}.$$

10. Эрмитов оператор с дискретным спектром $\hat{f}(\lambda)$ зависит от параметра λ . Собственные значения $f_n(\lambda)$ и собственные векторы $|n(\lambda)\rangle$ этого оператора также зависят от λ . Докажите теорему Гельмана–Фейнмана:

$$\frac{\partial f_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \left\langle n(\lambda) \left| \frac{\partial \hat{f}(\lambda)}{\partial \lambda} \right| n(\lambda) \right\rangle.$$

11. Постройте оператор, соответствующий физической величине $\varphi = (\mathbf{r}\mathbf{p})$, где \mathbf{r} и \mathbf{p} – соответственно радиус-вектор и импульс частицы.
12. Воспользовавшись повышающим и понижающим операторами \hat{a}^+ и \hat{a} , найдите средние значения операторов \hat{x}^2 , \hat{x}^4 и \hat{x}^{2k+1} в n -м стационарном состоянии линейного гармонического осциллятора.
13. Раскройте коммутаторы:

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta \hat{p}_\gamma], \quad [\hat{p}_\alpha, \hat{x}_\beta \hat{p}_\gamma], \quad [\hat{x}_\alpha \hat{p}_\beta, \hat{x}_\gamma, \hat{p}_\nu].$$

14. Раскройте следующие коммутаторы:

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{x}_\beta], \quad [\hat{l}_\alpha, \hat{p}_\beta], \quad [\hat{l}_\alpha, \hat{\mathbf{r}}^2], \quad [\hat{l}_\alpha, (\hat{\mathbf{r}}\mathbf{p})],$$

$$[\hat{l}_\alpha, f(r)], \quad [\hat{l}_z, f(\rho)], \quad \rho = \sqrt{x^2 + y^2}.$$

ЗАДАЧИ

1. Частица массы m совершает финитное движение в одномерной “прямоугольной” потенциальной яме конечной глубины:

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

Найдите уровни энергии E_n и волновые функции $\psi_n(x)$ стационарных состояний. Исследуйте, существуют ли связанные состояния в “прямоугольной” потенциальной яме фиксированной ширины $2a$, если $U_0 \rightarrow 0$? Сопоставляется ли результат с соотношением неопределенностей? Проиллюстрируйте результаты с помощью одной из стандартных компьютерных программ. Для предельного случая $U_0 \rightarrow \infty$ определите фазовую площадь, приходящуюся на одно состояние.

Воспользуйтесь полученными результатами для оценки числа уровней электрона в металлическом образце (глубина потенциала $U_0 = 10$ эВ примерно равна работе выхода), если а) $a = 0.1$ нм (“атом”); б) $a = 10$ нм (“наночастица”); в) $a = 1$ см (“макроскопический образец”).

2. Найдите уровни энергии и волновые функции стационарных состояний для частицы массы m в одномерной потенциальной яме следующего вида:

$$U(x) = \begin{cases} +\infty, & x < 0, \\ -U_0, & 0 < x < a, \\ 0, & x > a. \end{cases}$$

Что здесь можно сказать о связанных состояниях при фиксированном a и $U_0 \rightarrow 0$?

3. Частица массы m свободно движется вдоль оси x с энергией E и в области $x > 0$ попадает в область действия потенциала, который имеет вид: а) прямоугольной потенциальной ямы ширины a и глубины U_0 , б) прямоугольного потенциального барьера ширины a и высоты U_0 . Найдите коэффициенты прохождения $T(E)$ и отражения $R(E)$ частицы от указанных потенциалов. *Постройте графики с помощью одной из стандартных компьютерных программ.* Определите значения энергии, при которых ямы и барьеры полностью прозрачны для падающих частиц. Чем определяются эти энергии?

В случае потенциальной ямы предложите способ оценки энергии E_0 , выше которой квантовые ответы практически совпадают с классическими. Какова эта энергия при прохождении электрона сквозь наноскопический слой металла: $a = 10$ нм и $U_0 = 10$ эВ?

- 4.^C Частица массы m совершает финитное движение в одномерной модельной потенциальной яме, вид которой может быть представлен δ -функцией:

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa_0}{m} \delta(x),$$

где κ_0 – параметр ямы. Покажите, что в этой яме имеется только одно связанное состояние и найдите энергию и волновую функцию частицы связанного состояния в координатном представлении. Вычислите $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ и $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ в этом состоянии.

5.* Получите стационарное уравнение Шредингера в задаче 4 в импульсном представлении. Найдите решение этого уравнения, описывающее связанное состояние частицы. Преобразуйте найденную волновую функцию частицы в импульсном представлении в волновую функцию в координатном представлении и удостоверьтесь в правильности ответа.

6.^C Частица массы m совершает финитное движение в одномерном потенциальном поле вида

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa_0}{m} (\delta(x+a) + \delta(x-a)),$$

где κ_0 – параметр потенциала. Найдите энергии уровней и волновые функции стационарных состояний. Как зависит число связанных состояний от параметров a и κ_0 ?

Рассматривая эту задачу как модель молекулярного иона водорода H_2 , исследуйте зависимость энергий уровней от a при фиксированном κ_0 .

Покажите, что в случае $\kappa_0 a \gg 1$ связанные состояния представляют собой дублет близко расположенных уровней. Обсудите связь со структурой низколежащих уровней молекулы аммиака NH_3 . В этом же пределе $\kappa_0 a \gg 1$ найдите вероятность нахождения частицы в момент t в правой яме ($x = a$), если при $t = 0$ она находилась в левой яме ($x = -a$).

7.^C Частица массы m движется в одномерном периодическом поле вида

$$U(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa_0}{m} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} \delta(x - na),$$

где κ_0 и a – параметры потенциала. Исследуйте, при каких отрицательных и положительных энергиях E частицы такое движение возможно. Покажите, что имеются зоны “разрешенных” и “запрещенных” энергий.

Исследуйте, что происходит с шириной зон в предельных случаях $\kappa_0 a \gg 1$ (сильная связь) и $\kappa_0 a \ll 1$ (слабая связь).

8.* В условиях предыдущей задачи постройте графики зависимости энергии от квазиимпульса для первых трех разрешенных зон энергии, используя одну из стандартных компьютерных программ. Выберите три значения параметра $\kappa_0 a$, при которых реализуются предельные случаи слабой, промежуточной и сильной связи.

9. Частица массы m свободно движется вдоль оси x с энергией E и попадает в область действия δ -потенциала (см. задачу 4). Найдите коэффициенты прохождения $T(E)$ и отражения $R(E)$ частицы; *постройте* графики.
- 10.^C Частица массы m находится в связанном состоянии в δ -потенциале (см. задачу 4). В момент $t = 0$ происходит мгновенное изменение параметра ямы от \varkappa_0 до \varkappa_1 . Найдите вероятность “ионизации”. Обсудите эволюцию волновой функции частицы сразу после ионизации в случае, когда $\varkappa_1 = 0$.

ЗАДАНИЕ 2

Упражнения

1. Постройте матрицы операторов углового момента \hat{j}_x , \hat{j}_y , \hat{j}_z , а также \hat{j}^2 , \hat{j}_+ и \hat{j}_- для квантовой системы с угловым моментом $j = 1$. Как выглядят собственные векторы операторов \hat{j}^2 и \hat{j}_z ?
- 2.^C Докажите справедливость следующих соотношений для операторов Паули:

$$\sigma_k \sigma_l = \delta_{kl} + i \epsilon_{klm} \sigma_m,$$

$$(\sigma \mathbf{a})(\sigma \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \mathbf{b}) + i(\sigma [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]),$$

где \mathbf{a} и \mathbf{b} – произвольные векторы.

- 3.^C Найдите явный вид оператора $e^{i\alpha(\sigma \mathbf{n})}$.
- 4.^C Найдите собственные значения и собственные векторы спинового оператора $\hat{\sigma}_n = (\hat{\sigma} \mathbf{n})$, где \mathbf{n} – единичный вектор с составляющими:

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta).$$

Обсудите случаи, когда вектор \mathbf{n} направлен вдоль осей x , y и z . Упражнение решить двумя способами.

5. Пусть электрон находится в состоянии с проекцией спина на ось z , равной $1/2$. Найдите вероятность того, что проекция спина этого электрона на направление \mathbf{n} равна $1/2$ (или $-1/2$).

ЗАДАЧИ

1.^C Атом водорода находится в стационарном состоянии с главным квантовым числом $n = 2$. Вычислите все три проекции дипольного момента атома $\mathbf{d} = \langle \psi | e \mathbf{r} | \psi \rangle$. В каком состоянии электрический дипольный момент имеет максимальное значение?

2.^C Отрицательно заряженный мюон находится в связанном стационарном состоянии. В момент времени $t = 0$, когда “включается” магнитное поле \mathbf{H} , направленное по оси x , спиновое состояние мюона определяется вектором состояния с положительной проекцией спина на ось z . Определите спиновое состояние мюона $|\chi(t)\rangle$ во все последующие моменты времени в представлении Шредингера. Как выглядит оператор спина мюона $\hat{\mathbf{s}}(t)$ в представлении Гейзенберга?

Найдите вектор поляризации спина мюона $\mathbf{P}(t) = 2\langle \chi | \hat{\mathbf{s}} | \chi \rangle$ как функцию времени, пользуясь представлениями Шредингера и Гейзенберга. Какое движение совершает в пространстве вектор $\mathbf{P}(t)$? Меняется ли во времени длина вектора поляризации $|\mathbf{P}(t)|$?

3. Потенциальная энергия взаимодействия двух частиц с массами m_1 и m_2 , $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ зависит только от расстояния между частицами. Запишите стационарное уравнение Шредингера, определяющее волновую функцию состояния этих частиц с определенной энергией E . Покажите, что для решения этого уравнения удобно воспользоваться следующими переменными:

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

Какой вид имеет волновая функция $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ в “новых” переменных?

4. Частица массы m движется в трехмерной потенциальной яме с “плоским” дном и бесконечно высокими стенками:

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < a, \\ \infty, & r > a. \end{cases}$$

Найдите уровни энергии и волновые функции s -состояний. Чему равна $\psi_{ns}(0)$?

5.* Частица массы m движется в мелкой двумерной потенциальной яме с “плоским” дном:

$$U(\rho) = \begin{cases} -U_0, & \rho < a, \\ 0, & \rho > a. \end{cases}$$

Покажите, что при сколь угодно малом U_0 существует связанное стационарное состояние частицы в этом потенциале. Найдите энергию этого состояния.

6. Получите стационарное уравнение Шредингера для атома водорода в импульсном представлении. Как выглядит решение этого уравнения, отвечающее минимальной энергии (волновая функция основного состояния атома водорода в импульсном представлении)?

- 7.* Частица массы m движется в потенциале трехмерного изотропного осциллятора:

$$U(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}.$$

Найдите энергии уровней, кратности их вырождения, а также волновые функции стационарных состояний, разделяя переменные: а) в декартовых координатах, б) в сферических координатах. Обсудите связь задачи с моделью ядерных оболочек и получите первые магические числа: 2, 8, 20.

Определите четности стационарных состояний. Может ли осциллятор, находящийся в состоянии с определенной энергией, обладать отличным от нуля электрическим дипольным моментом (см. задачу 1)?

- 8.^C Частица массы m совершает финитное движение в одномерном потенциале $U(x)$. Воспользовавшись квазиклассическим приближением, найдите уровни энергии и волновые функции связанных состояний для случаев

$$\begin{aligned} \text{а)} \quad & U(x) = m\omega^2 x^2/2, \\ \text{б)} \quad & U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ m\omega^2 x^2/2, & x > 0. \end{cases} \end{aligned}$$

В случае а) (одномерный гармонический осциллятор) приведите волновые функции в квазиклассическом приближении к такому виду, чтобы было ясно, что они обладают нужной четностью. Используя одну из стандартных компьютерных программ, *постройте* для первых трех состояний графики волновых функций, найденных в квазиклассическом приближении, и сравните их с графиками точных волновых функций.

9. Частица массы m с энергией E “заперта” в области $r < r_0$, где $U(r) = -U_0$, высоким потенциальным барьером:

$$U(r) = 2Ze^2/r, \quad r > r_0; \quad E \ll 2Ze^2/r_0.$$

Воспользовавшись квазиклассическим приближением, найдите коэффициент прохождения сквозь барьер.

Обсудите связь этой задачи с элементарной теорией α -распада и получите закон Гейгера–Неттола.

10. Частица совершает финитное движение в одномерном потенциале $U(x)$; E_n – энергии стационарных состояний. Воспользовавшись квазиклассическим приближением, найдите изменения δE_n энергий стационарных состояний при малом изменении потенциала $U(x) \rightarrow U(x) + \delta U(x)$.

- 11.^C Используя стационарную теорию возмущений, найдите поправки к уровням энергии линейного гармонического осциллятора под действием следующих возмущений:

$$a) \hat{V} = \alpha x, \quad б) \hat{V} = Ax^3 + Bx^4.$$

В случае *a)* вычислите среднее значение координаты в основном состоянии. Объясните полученный результат.

- 12.^C Определите расщепление уровня энергии атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ в однородном электрическом поле (эффект Штарка). Найдите правильные волновые функции нулевого приближения и изобразите графически зависимость энергии расщепления от напряженности поля.

- 13.* В результате β -распада ядра атома трития образуется ион ${}^3\text{He}^+$. Вычислите вероятности того, что этот ион окажется: *a)* в основном состоянии; *б)* на первом возбужденном уровне. Каково отношение этих вероятностей?

Срок сдачи первого задания 20–25 марта 2023 г.

Срок сдачи второго задания 15–20 мая 2023 г.