计算物理作业 8

杨远青 22300190015 CompPhys 24

2024 年 11 月 26 日

正面迎击 *ddl* 军团!

1 题目 1：松弛法求解泊松方程

1.1 题目描述

Consider the Poisson equation:

$$\nabla^2\varphi(x,y) = -\frac{\rho(x,y)}{\varepsilon_0}$$

from electrostatics on a rectangular geometry with $x \in [0, L_x]$ and $y \in [0, L_y]$. Write a program that solves this equation using the relaxation method and test your program with the following cases:
(a) $\rho(x,y) = 0$, $\varphi(0,y) = \varphi(L_x,y) = \varphi(x,0) = 0$, $\varphi(x,L_y) = 1\,\mathrm{V}$, $L_x = 1\,\mathrm{m}$, and $L_y = 1.5\,\mathrm{m}$;
(b) $\frac{\rho(x,y)}{\varepsilon_0} = 1\,\mathrm{V/m^2}$, $\varphi(0,y) = \varphi(L_x,y) = \varphi(x,0) = \varphi(x,L_y) = 0$, and $L_x = L_y = 1\,\mathrm{m}$.

1.2 程序描述

本程序支持在题示两种案例与自定义案例（指定矩形区域大小、求解参数、均匀源项与第一类边界条件，即四周电势）下的求解，并内置了解析解的计算，以便于对比。其中对于案例 (a)，即无源电荷，三边接地，齐次解为：

$$\phi_h(x,y) = \frac{4V_0}{\pi}\sum_{n=1,3,5,\dots}^{N}\frac{1}{n}\sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right)\frac{\sinh\left(\frac{n\pi y}{L_x}\right)}{\sinh\left(\frac{n\pi L_y}{L_x}\right)}$$

考虑到 $sinh$ 函数在 $\approx \exp(700)$ 会数值溢出，在 N 达到 N_{approx} 时进行指数近似

$$\frac{\sinh\left(\frac{n\pi y}{L_x}\right)}{\sinh\left(\frac{n\pi L_y}{L_x}\right)} \approx \exp\left(\frac{n\pi(y-L_y)}{L_x}\right)$$

对于案例 (b)，即均匀源电荷，四边接地，满足接地条件与均匀源项的特解为：

$$\phi_p(x,y) = \sum_{n=1,3,5,\dots}^{N}\sum_{m=1,3,5,\dots}^{M}\frac{16\rho}{\varepsilon_0\pi^2 nm\left(\left(\frac{n\pi}{L_x}\right)^2+\left(\frac{m\pi}{L_y}\right)^2\right)}\sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right)$$

理论上这个级数不是绝对收敛的，且只能计算到一定的阶数，应当采用黎曼求和的对角线求和次序，但在最初的代码中偷懒直接使用了内外 for 循环，结果是解析解与误差图中 x,y 方向不对称。但在测试中发现，这种不对称的周期正好与截断项数 N, M 可以对应，因此保留了这个小 bug，恰可以增加一重误差图的物理含义检验。对于自定义案例，

根据用户指定的边界条件，相应的解析解只需计算四个边界条件（需要改变自变量进行旋转）对应的齐次解 $\phi_h^i(x,y)$ 进行叠加，再加上均匀源项的接地特解 $\phi_p(x,y)$ 即可

$$\phi(x,y) = \sum_{i=1}^{4} \phi_h^i(x,y) + \phi_p(x,y)$$

在求解器 `PoissonSolver` 类中，内置了 Jacobi, Gauss-Seidel, SOR 三种迭代方法，用户可以通过 `method` 参数选择。它们的算法细节将在伪代码中详细介绍。其中 SOR 的松弛因子 ω 根据输入参数由 `get_optimal_omega` 方法自动计算，采用的公式来自 *Numeric Recipes*（2nd ed.）的第 19.5 节，即

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho_{\text{Jacobi}}^2}}$$

其中 ρ_{Jacobi} 为 Jacobi 方法的谱半径

$$\rho_{\text{Jacobi}} = \frac{\cos\frac{\pi}{N_x} + \left(\frac{\Delta x}{\Delta y}\right)^2 \cos\frac{\pi}{N_y}}{1 + \left(\frac{\Delta x}{\Delta y}\right)^2}$$

在等间距正方形大网格中化为课件中的近似表达式 $\omega \simeq \frac{2}{1+\pi/L}$ 实际测试表明该因子选取大幅加快收敛速度，赞！

请在 `Problem_1/src` 目录下运行`python -u poisson.py`,需安装辅助计算的 `numpy` 库与绘图用的 `matplotlib` 库。程序从用户输入获取求解案例及参数之后，将首先输出三种方法的迭代动画（步数过多时抽取最多 100 帧进行展示），随后绘制三者的收敛曲线，即每步最大变化量随步数的变化。最后输出计算结果及与解析解的对比图，以及计算误差图，详见下文的结果示例。

1.3 伪代码

Powered by LaTeX pseudocode generator

Algorithm 1: Jacobi Method for Solving Poisson's Equation

Input: ϕ (potential matrix), `tolerance`, `max_iter`

Output: ϕ (updated potential matrix)

$dx^2 \leftarrow dx^2,\ dy^2 \leftarrow dy^2,\ \text{denom} \leftarrow 2 \times (dx^2 + dy^2)$; `// Precompute constants`
for $it \leftarrow 1$ **to** *max_iter* **do**
  $\phi_{\text{new}} \leftarrow \phi$; `// Create a copy for new updates`
  for $i \leftarrow 1$ **to** $N_x - 2$ **do**
    for $j \leftarrow 1$ **to** $N_y - 2$ **do**
      $\phi_{\text{new}}[i,j] \leftarrow \frac{(\phi[i+1,j]+\phi[i-1,j])\times dy^2+(\phi[i,j+1]+\phi[i,j-1])\times dx^2+dx^2\times dy^2\times \rho_{\epsilon_0}[i,j]}{\text{denom}}$; `// Jacobi update`
    end
  end
  $\text{max\_change} \leftarrow \max(|\phi_{\text{new}} - \phi|)$;
  if max_change $<$ *tolerance* **then**
    return ϕ_{new} ; `// Convergence reached`
  end
  $\phi \leftarrow \phi_{\text{new}}$; `// Update for next iteration`
end
return ϕ ; `// Return after max iterations`

Algorithm 2: Gauss-Seidel Method for Solving Poisson's Equation

Input: ϕ (potential matrix), `tolerance`, `max_iter`

Output: ϕ (updated potential matrix)

$dx^2 \leftarrow dx^2,\ dy^2 \leftarrow dy^2,\ \mathsf{denom} \leftarrow 2 \times (dx^2 + dy^2)$; `// Precompute constants`
for $it \leftarrow 1$ **to** *max_iter* **do**
  max_change $\leftarrow 0$; `// Reset max change for this iteration`
  for $i \leftarrow 1$ **to** $N_x - 2$ **do**
    for $j \leftarrow 1$ **to** $N_y - 2$ **do**
      $\phi_{\text{old}} \leftarrow \phi[i,j]$;
      $\phi[i,j] \leftarrow \frac{(\phi[i+1,j]+\phi[i-1,j])\times dy^2+(\phi[i,j+1]+\phi[i,j-1])\times dx^2+dx^2\times dy^2\times \rho_{\epsilon_0}[i,j]}{\mathsf{denom}}$; `// Gauss-Seidel update`
      max_change $\leftarrow \max(\text{max\_change}, |\phi[i,j] - \phi_{\text{old}}|)$; `// Track max change`
    end
  end
  if max_change $<$ *tolerance* **then**
    return ϕ ; `// Convergence reached`
  end
end
return ϕ ; `// Return after max iterations`

Algorithm 3: SOR Method for Solving Poisson's Equation

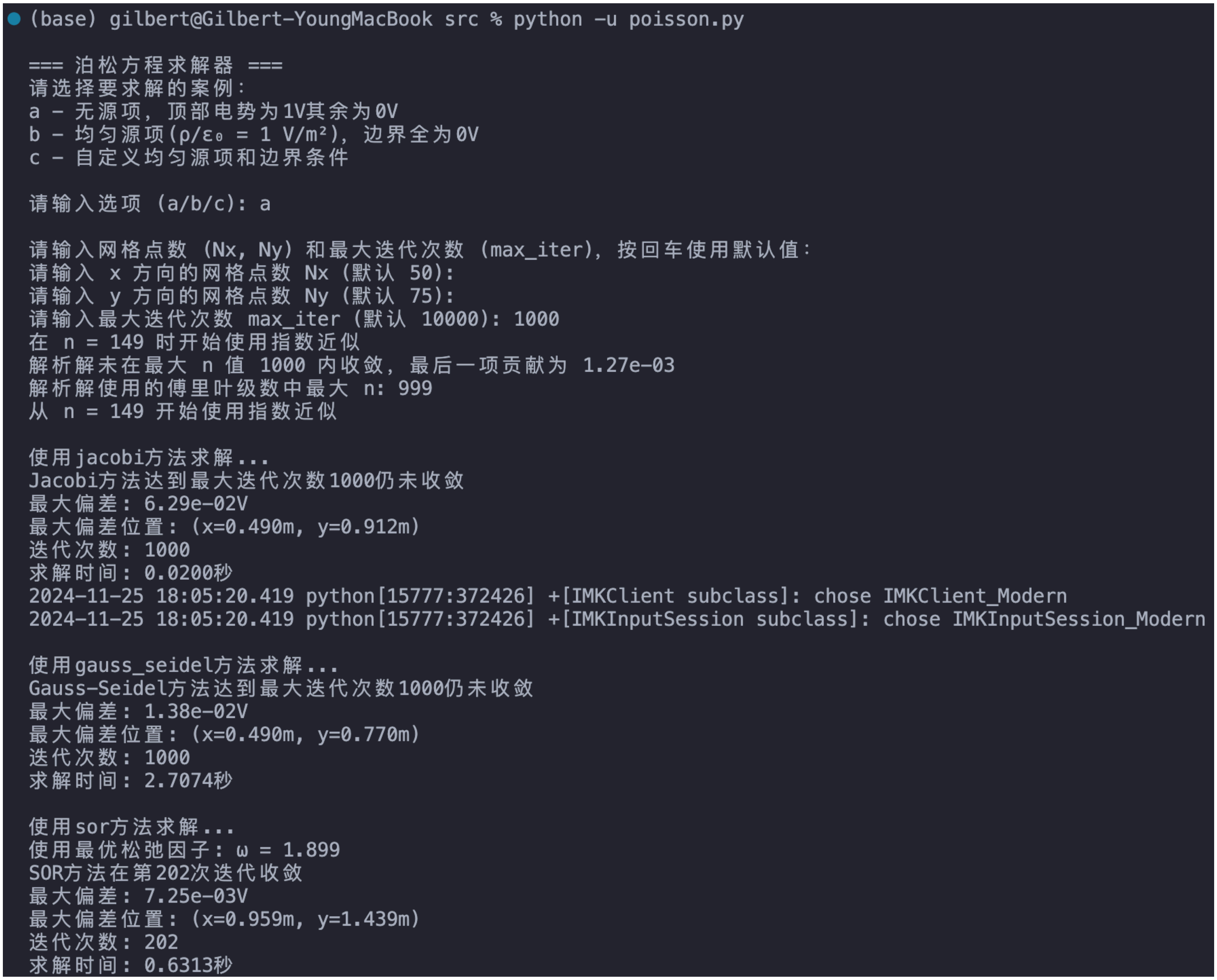
Input: ϕ (potential matrix), ω (relaxation factor), `tolerance`, `max_iter`

Output: ϕ (updated potential matrix)

$dx^2 \leftarrow dx^2,\ dy^2 \leftarrow dy^2,\ \mathsf{denom} \leftarrow 2 \times (dx^2 + dy^2)$; `// Precompute constants`
for $it \leftarrow 1$ **to** *max_iter* **do**
  max_change $\leftarrow 0$; `// Reset max change for this iteration`
  for $i \leftarrow 1$ **to** $N_x - 2$ **do**
    for $j \leftarrow 1$ **to** $N_y - 2$ **do**
      $\phi_{\text{old}} \leftarrow \phi[i,j]$;
      $\phi_{\text{new}} \leftarrow \frac{(\phi[i+1,j]+\phi[i-1,j])\times dy^2+(\phi[i,j+1]+\phi[i,j-1])\times dx^2+dx^2\times dy^2\times \rho_{\epsilon_0}[i,j]}{\mathsf{denom}}$; `// Standard update`
      $\phi[i,j] \leftarrow (1-\omega)\cdot \phi_{\text{old}} + \omega \cdot \phi_{\text{new}}$; `// SOR update`
      max_change $\leftarrow \max(\text{max\_change}, |\phi[i,j] - \phi_{\text{old}}|)$; `// Track max change`
    end
  end
  if max_change $<$ *tolerance* **then**
    return ϕ ; `// Convergence reached`
  end
end
return ϕ ; `// Return after max iterations`

1.4 结果示例

1.4.1 Case (a)：无源电荷，三边接地



```
(base) gilbert@Gilbert-YoungMacBook src % python -u poisson.py

=== 泊松方程求解器 ===
请选择要求解的案例:
a - 无源项, 顶部电势为1V其余为0V
b - 均匀源项(ρ/ε₀ = 1 V/m²), 边界全为0V
c - 自定义均匀源项和边界条件

请输入选项 (a/b/c): a

请输入网格点数 (Nx, Ny) 和最大迭代次数 (max_iter), 按回车使用默认值:
请输入 x 方向的网格点数 Nx (默认 50):
请输入 y 方向的网格点数 Ny (默认 75):
请输入最大迭代次数 max_iter (默认 10000): 1000
在 n = 149 时开始使用指数近似
解析解未在最大 n 值 1000 内收敛, 最后一项贡献为 1.27e-03
解析解使用的傅里叶级数中最大 n: 999
从 n = 149 开始使用指数近似

使用jacobi方法求解...
Jacobi方法达到最大迭代次数1000仍未收敛
最大偏差: 6.29e-02V
最大偏差位置: (x=0.490m, y=0.912m)
迭代次数: 1000
求解时间: 0.0200秒
2024-11-25 18:05:20.419 python[15777:372426] +[IMKClient subclass]: chose IMKClient_Modern
2024-11-25 18:05:20.419 python[15777:372426] +[IMKInputSession subclass]: chose IMKInputSession_Modern

使用gauss_seidel方法求解...
Gauss-Seidel方法达到最大迭代次数1000仍未收敛
最大偏差: 1.38e-02V
最大偏差位置: (x=0.490m, y=0.770m)
迭代次数: 1000
求解时间: 2.7074秒

使用sor方法求解...
使用最优松弛因子: ω = 1.899
SOR方法在第202次迭代收敛
最大偏差: 7.25e-03V
最大偏差位置: (x=0.959m, y=1.439m)
迭代次数: 202
求解时间: 0.6313秒
```

图 1: (a)：终端输出

本次测试特地将最大迭代次数截断在 1000，以测试三种方式的精度与收敛速度。可以看到最终与解析解的最大误差比较中，Jacobi 方法的误差最大，而 Gauss-Seidel 方法的误差较小，SOR 方法的误差最小，且在第 202 步便已收敛至指定精度。在耗时方面，Jacobi 因为不需要使用实时更新的 ϕ，可以进行多线程并行，所以耗时反而最短，而 Gauss-Seidel 方法（隐式）因为需要使用新的 ϕ，耗时最长，SOR 方法介于两者之间，虽不能并行，但收敛速度最快。

在输出的误差比较图中，Jacobi 与 Gauss-Seidel 方法的误差图形状相似，最大偏差点均在中心处，但误差更小，而 SOR 方法几乎没有偏差，最大偏差点在硬性边界条件的不连续处，这非程序本身的问题。**在运行动画时**将能更直观展现迭代过程，SOR 的更新更为迅速且方向准确。

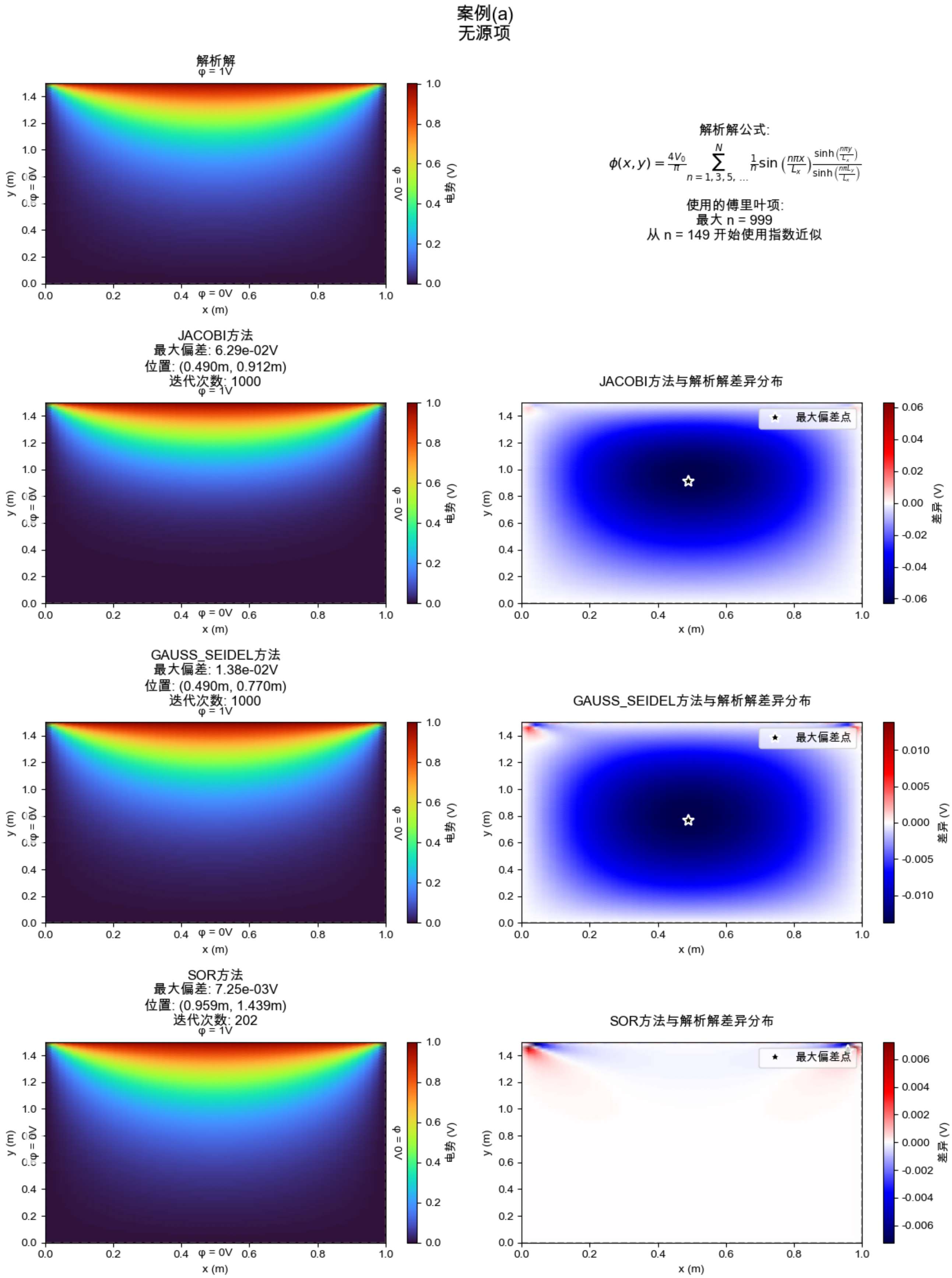

案例(a)
无源项
解析解
φ = 1V
φ = 0V
x (m)
y (m)
电势 (V)
解析解公式:
$\phi(x,y) = \frac{4V_0}{\pi} \sum_{n=1,3,5,\ldots}^{N} \frac{1}{n} \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \frac{\sinh\left(\frac{n\pi y}{L_x}\right)}{\sinh\left(\frac{n\pi L_y}{L_x}\right)}$
使用的傅里叶项:
最大 n = 999
从 n = 149 开始使用指数近似
JACOBI方法
最大偏差: 6.29e-02V
位置: (0.490m, 0.912m)
迭代次数: 1000
JACOBI方法与解析解差异分布
最大偏差点
差异 (V)
GAUSS_SEIDEL方法
最大偏差: 1.38e-02V
位置: (0.490m, 0.770m)
迭代次数: 1000
GAUSS_SEIDEL方法与解析解差异分布
SOR方法
最大偏差: 7.25e-03V
位置: (0.959m, 1.439m)
迭代次数: 202
SOR方法与解析解差异分布

图 2: (a)：计算结果及对比

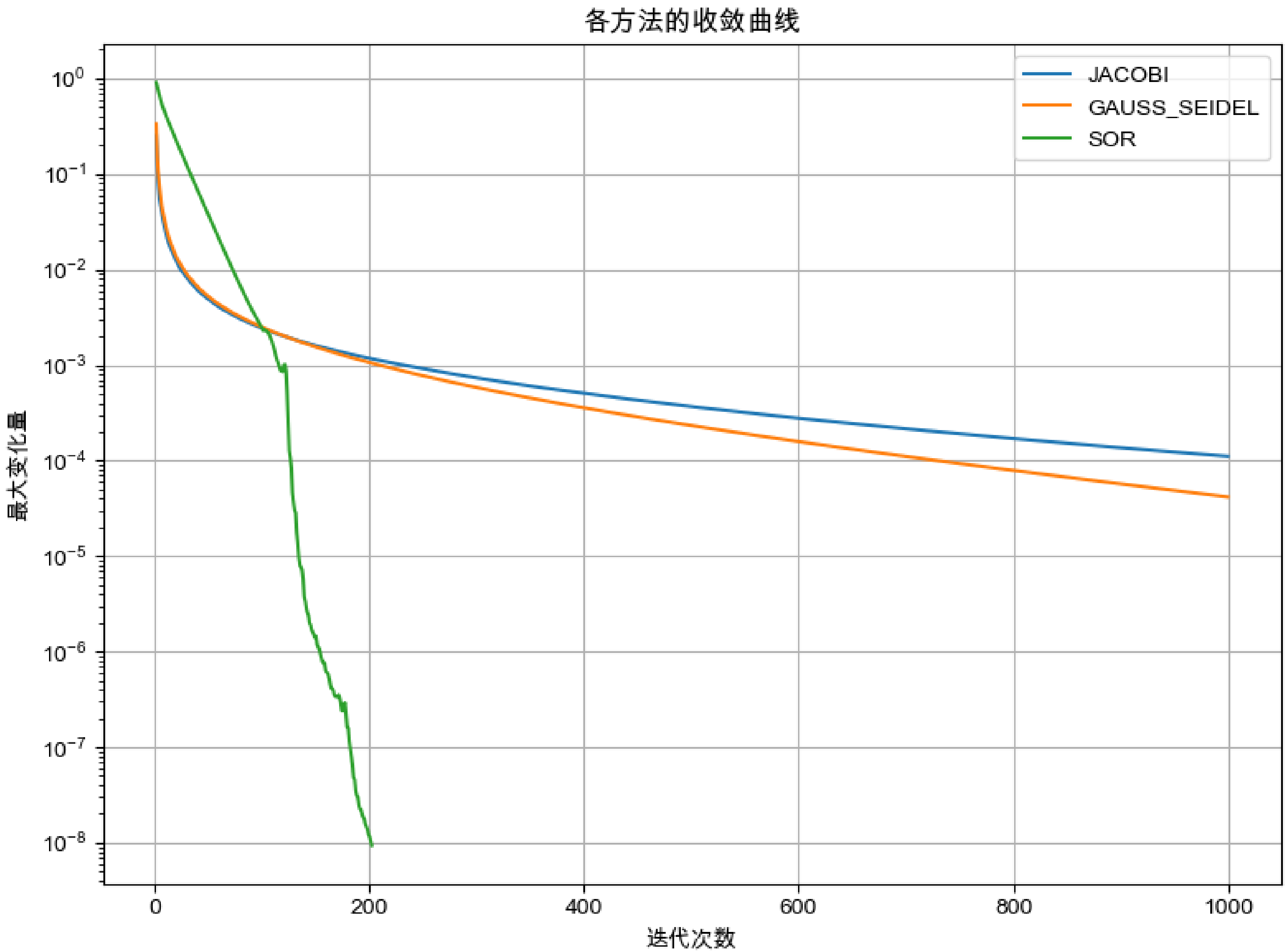


图 3: (a)：收敛曲线对比

收敛曲线的趋势并不完全如课件上的

$$r \simeq \begin{cases} \frac{1}{2}pL^2 & \text{for Jacobi's method,} \\ \frac{1}{4}pL^2 & \text{for the Gauss-Seidel method,} \\ \frac{1}{3}pL & \text{for SOR with } \omega \simeq 2/(1+\pi/L). \end{cases}$$

不过线性趋势与二次趋势还是大概可以看出来。最初版本的程序使用上式预测收敛次数的功能也删去了，看上去 SOR 的收敛比预期更为迅猛。

1.4.2 Case (b)：均匀源电荷，四边接地

```
(base) gilbert@Gilbert-YoungMacBook src % python -u poisson.py

=== 泊松方程求解器 ===
请选择要求解的案例:
a - 无源项, 顶部电势为1V其余为0V
b - 均匀源项(ρ/ε₀ = 1 V/m²), 边界全为0V
c - 自定义均匀源项和边界条件

请输入选项 (a/b/c): b

请输入网格点数 (Nx, Ny) 和最大迭代次数 (max_iter), 按回车使用默认值:
请输入 x 方向的网格点数 Nx (默认 50):
请输入 y 方向的网格点数 Ny (默认 50):
请输入最大迭代次数 max_iter (默认 10000): 3000
INFO:root:解析解在 n = 11, m = 49 项时达到收敛, 最大项贡献为 2.71e-21
解析解使用的傅里叶级数项数: N = 11, M = 49

使用jacobi方法求解...
Jacobi方法达到最大迭代次数3000仍未收敛
最大偏差: 2.25e-04V
最大偏差位置: (x=0.571m, y=0.449m)
迭代次数: 3000
求解时间: 0.0443秒
2024-11-25 18:07:32.196 python[15971:375251] +[IMKClient subclass]: chose IMKClient_Modern
2024-11-25 18:07:32.196 python[15971:375251] +[IMKInputSession subclass]: chose IMKInputSession_Modern

使用gauss_seidel方法求解...
Gauss-Seidel方法在第2537次迭代收敛
最大偏差: 1.67e-04V
最大偏差位置: (x=0.980m, y=0.469m)
迭代次数: 2537
求解时间: 4.3666秒

使用sor方法求解...
使用最优松弛因子: ω = 1.882
SOR方法在第133次迭代收敛
最大偏差: 1.67e-04V
最大偏差位置: (x=0.980m, y=0.449m)
迭代次数: 133
求解时间: 0.2592秒
```

图 4: (b)：终端输出

本案例 Jacobi 在 3000 次迭代中都为收敛，Gauss-Seidel 方法在第 2537 次迭代侥幸收敛，而 SOR 方法在第 133 次迭代便收敛至指定精度。

比较有意思的是下面的误差比较图，在 x 方向出现了明显的周期性，且可以在下面两幅子图中验证，该条纹周期恰与上方显示的解析解 x 方向级数截断 N 对应，表明该误差是解析解截断导致，验证**前文所述**的，未按照对角线法则计算的级数收敛问题。

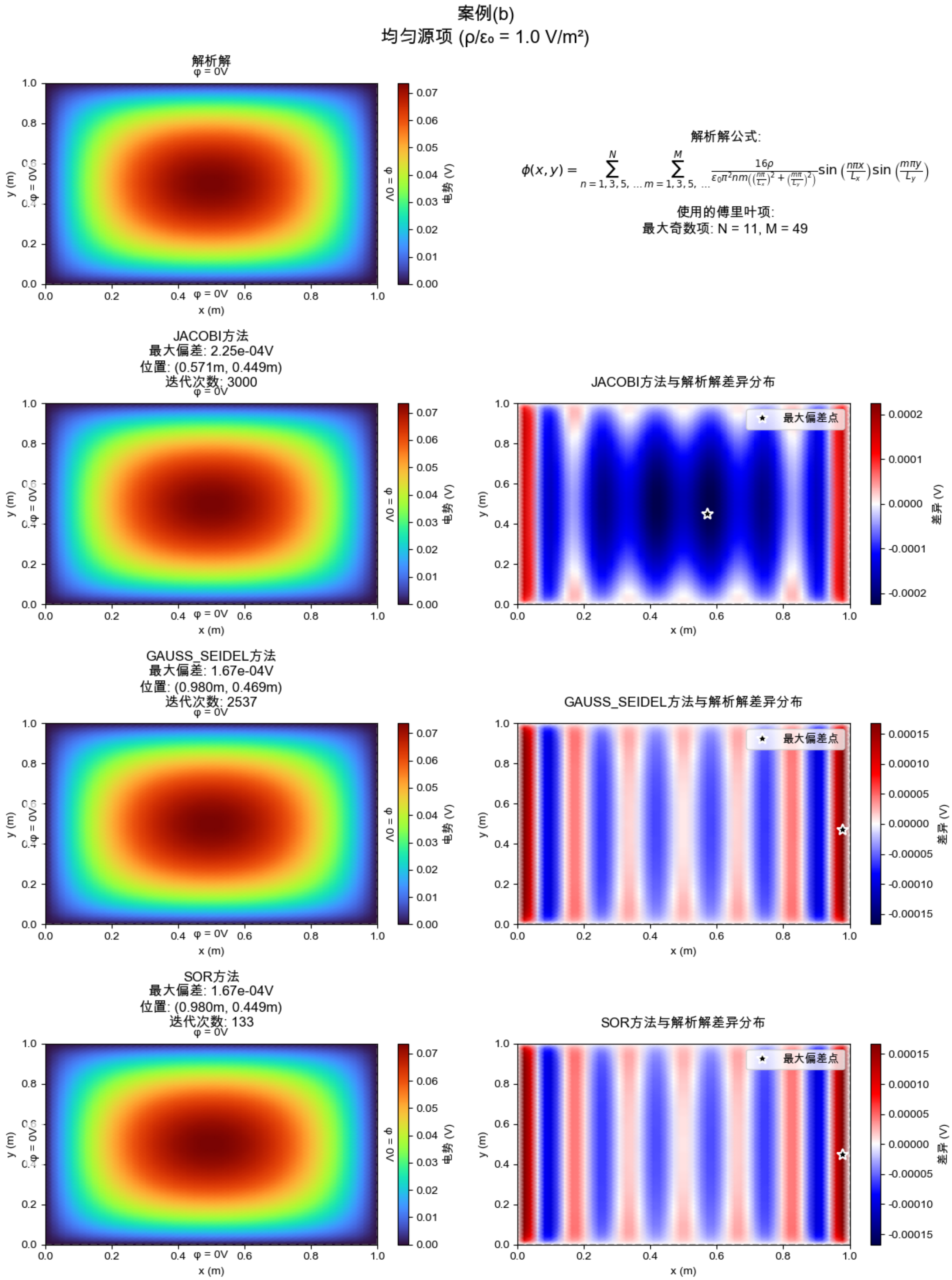

案例(b)
均匀源项 (ρ/ε₀ = 1.0 V/m²)
解析解
φ = 0V
解析解公式:
$\phi(x,y) = \sum_{n=1,3,5,\dots}^{N} \sum_{m=1,3,5,\dots}^{M} \frac{16\rho}{\varepsilon_0 \pi^2 nm\left(\left(\frac{n\pi}{L_x}\right)^2+\left(\frac{m\pi}{L_y}\right)^2\right)} \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right)$
使用的傅里叶项:
最大奇数项: N = 11, M = 49
JACOBI方法
最大偏差: 2.25e-04V
位置: (0.571m, 0.449m)
迭代次数: 3000
JACOBI方法与解析解差异分布
GAUSS_SEIDEL方法
最大偏差: 1.67e-04V
位置: (0.980m, 0.469m)
迭代次数: 2537
GAUSS_SEIDEL方法与解析解差异分布
SOR方法
最大偏差: 1.67e-04V
位置: (0.980m, 0.449m)
迭代次数: 133
SOR方法与解析解差异分布
最大偏差点
x (m)
y (m)
电势 (V)
差异 (V)

图 5: (b)：计算结果及对比

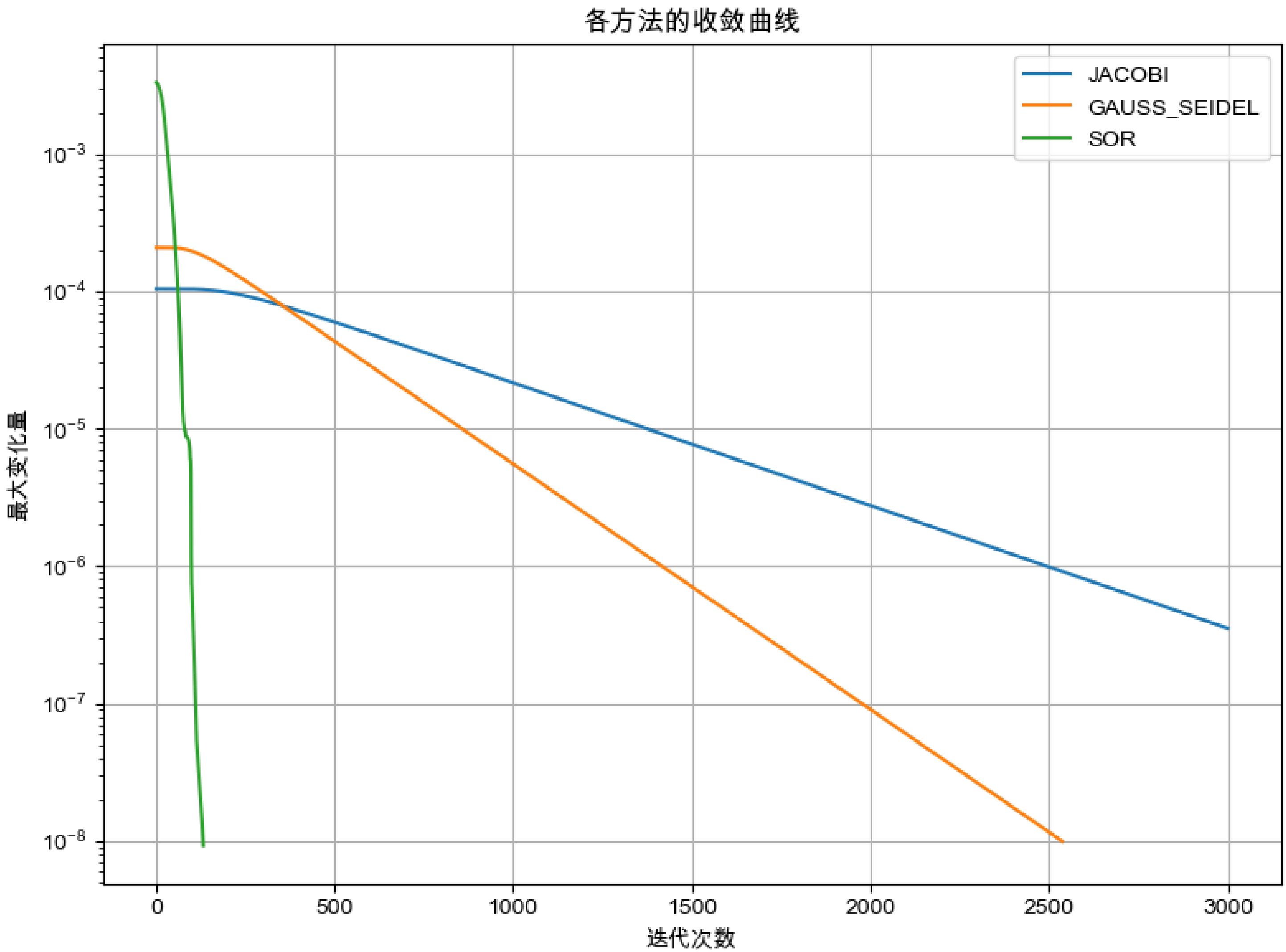


图 6: (b)：收敛曲线对比

此次收敛速度方面，仍是 SOR 大获全胜，不过尚不清楚其余两种方法的起始点收敛曲线凹凸性起源。

1.4.3 Case (c)：均匀源电荷，自定义边界

```
● (base) gilbert@Gilbert-YoungMacBook src % python -u poisson.py

 === 泊松方程求解器 ===
 请选择要求解的案例:
 a - 无源项，顶部电势为1V其余为0V
 b - 均匀源项(ρ/ε₀ = 1 V/m²), 边界全为0V
 c - 自定义均匀源项和边界条件

 请输入选项 (a/b/c): c

 === 请输入自定义参数 ===
 (注: 所有长度单位为米(m), 电势单位为伏特(V))
 请输入 x 方向长度 Lx: 1
 请输入 y 方向长度 Ly: 2
 请输入均匀源项大小(ρ/ε₀): -1

 请输入边界电势值:
 left 边界电势: 1
 right 边界电势: 2
 bottom 边界电势: -1
 top 边界电势: 0

 请输入网格点数 (Nx, Ny) 和最大迭代次数 (max_iter), 按回车使用默认值:
 请输入 x 方向的网格点数 Nx (默认 50): 100
 请输入 y 方向的网格点数 Ny (默认 100): 200
 请输入最大迭代次数 max_iter (默认 10000): 5000
 INFO:root:解析解在 n = 11, m = 199 项时达到收敛, 最大项贡献为 3.32e-22
 在 n = 447 时开始使用指数近似
 解析解未在最大 n 值 3000 内收敛, 最后一项贡献为 4.25e-04
 在 n = 447 时开始使用指数近似
 解析解未在最大 n 值 3000 内收敛, 最后一项贡献为 8.49e-04
 在 n = 113 时开始使用指数近似
 解析解未在最大 n 值 3000 内收敛, 最后一项贡献为 4.25e-04
 解析解计算完成
 特解使用的最大奇数项: N = 11, M = 199
 齐次解使用的最大傅里叶项: n = 2999
 从 n = 113 开始使用指数近似
```

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

使用gauss_seidel方法求解...
Gauss-Seidel方法达到最大迭代次数5000仍未收敛
最大偏差: 7.29e-02V
最大偏差位置: (x=0.495m, y=0.995m)
迭代次数: 5000
求解时间: 70.1102秒

使用sor方法求解...
使用最优松弛因子: ω = 1.952
SOR方法在第439次迭代收敛
最大偏差: 2.62e-02V
最大偏差位置: (x=1.000m, y=1.960m)
迭代次数: 439
求解时间: 7.0361秒
```

图 7: (c)：终端输出

本次在矩形区域添加均匀的负电荷，四周边界条件电势均不相等，程序仍完美执行任务。

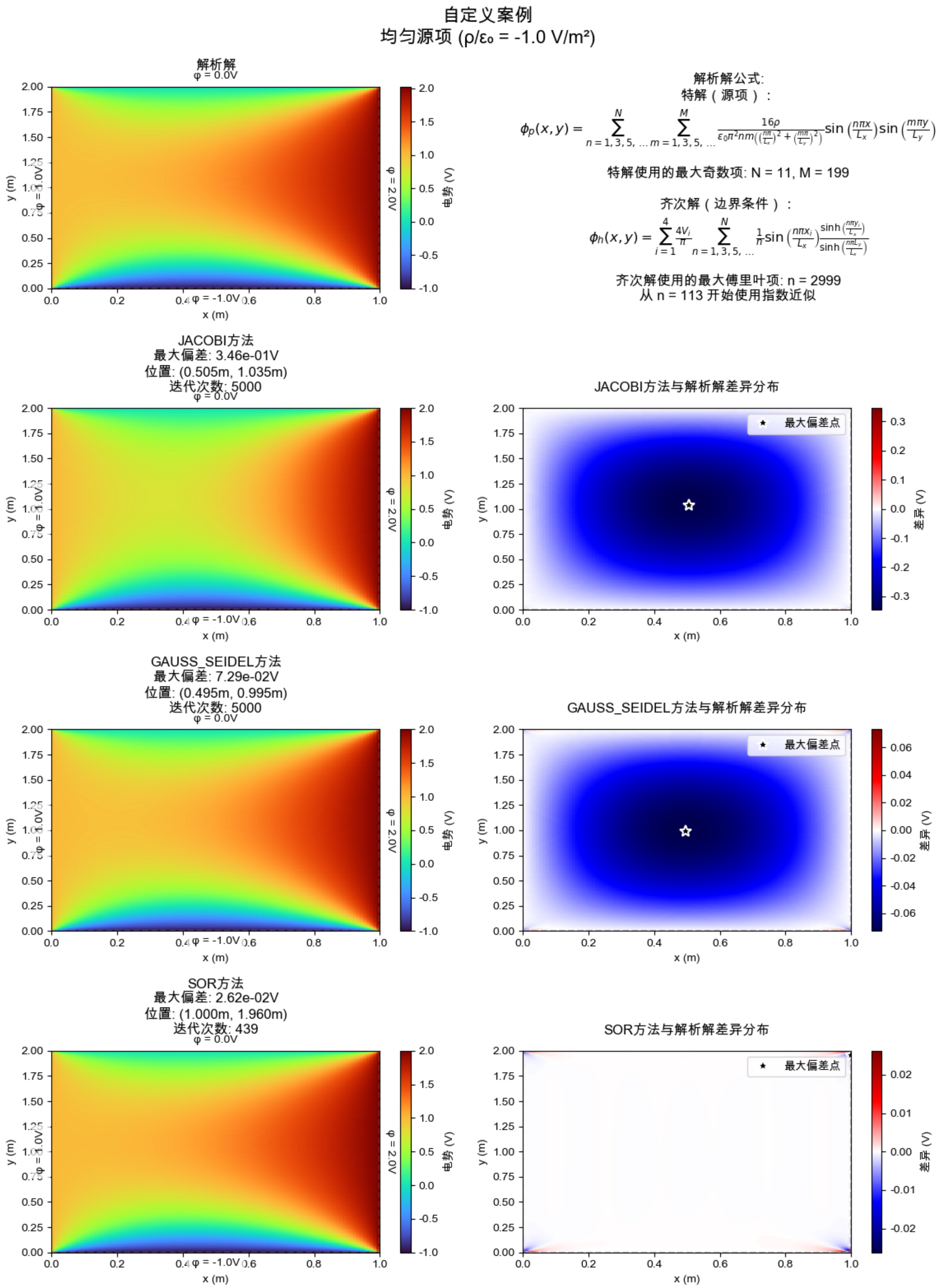

自定义案例
均匀源项 (ρ/ε₀ = -1.0 V/m²)
解析解
解析解公式:
特解（源项）:
特解使用的最大奇数项: N = 11, M = 199
齐次解（边界条件）:
齐次解使用的最大傅里叶项: n = 2999
从 n = 113 开始使用指数近似
JACOBI方法
最大偏差: 3.46e-01V
位置: (0.505m, 1.035m)
迭代次数: 5000
JACOBI方法与解析解差异分布
GAUSS_SEIDEL方法
最大偏差: 7.29e-02V
位置: (0.495m, 0.995m)
迭代次数: 5000
GAUSS_SEIDEL方法与解析解差异分布
SOR方法
最大偏差: 2.62e-02V
位置: (1.000m, 1.960m)
迭代次数: 439
SOR方法与解析解差异分布
最大偏差点
φ = 0.0V
φ = -1.0V
φ = 2.0V
x (m)
y (m)
电势 (V)
差异 (V)

图 8: (c)：计算结果及对比

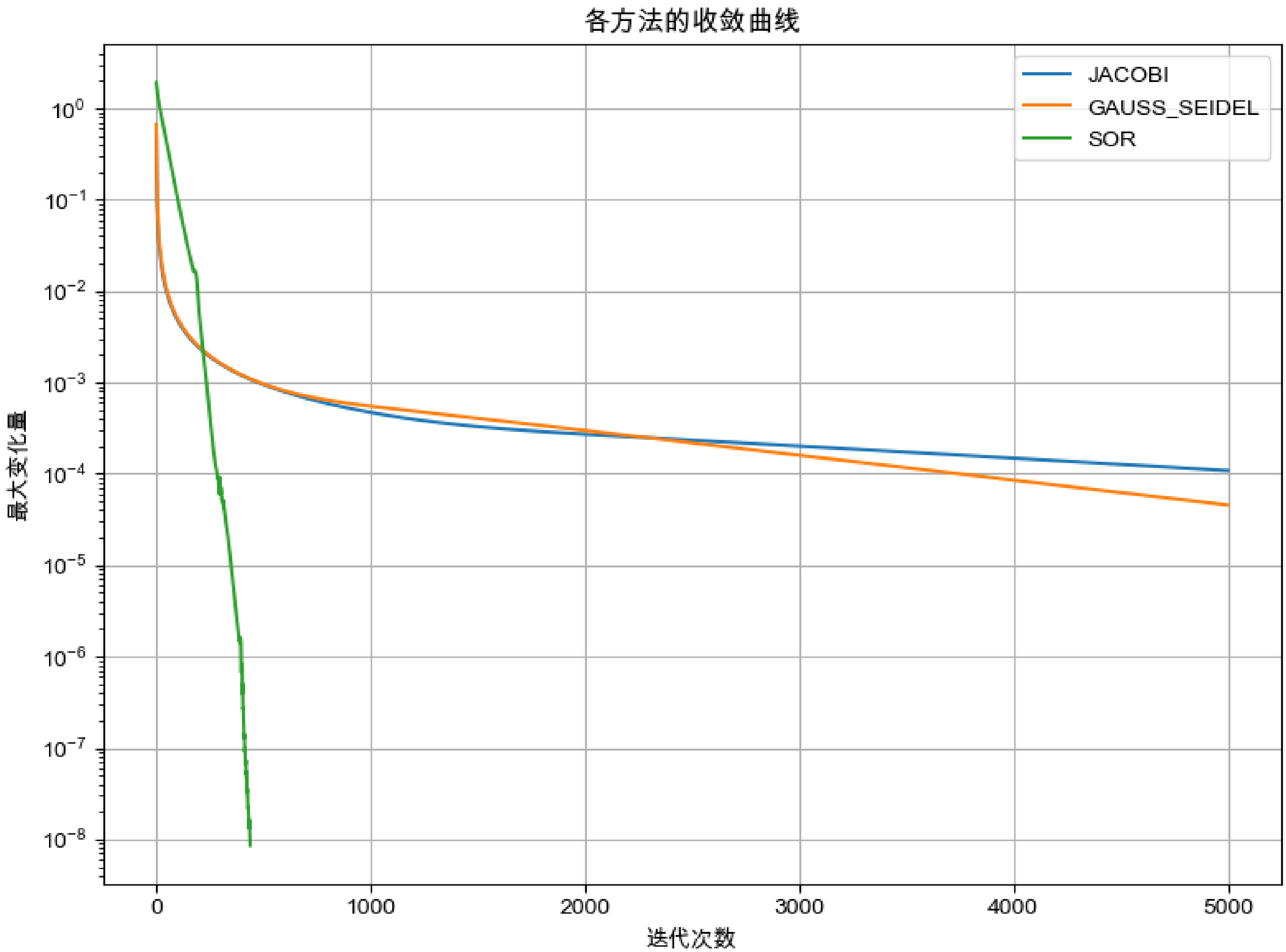


图 9: (c)：收敛曲线对比

2 题目 2：含时薛定谔方程求解

2.1 题目描述

Solve the time-dependent Schrödinger equation using both the Crank–Nicolson scheme and a stable explicit scheme. Consider the one-dimensional case and test it by applying it to the problem of a square well with a Gaussian initial state coming in from the left.

Hint: The Gaussian initial state could be expressed as:

$$\Psi(x,0)=\sqrt{\frac{1}{\pi}}\exp\left[ik_0x-\frac{(x-\xi_0)^2}{2}\right].$$

2.2 程序描述

本程序通过 `Parameters` 类管理参数，包括网格参数（时空坐标剖分）、势阱参数（宽度、深度与中心位置）以及初始波包参数（宽度、位置与动量）。定义了一个 `SchrodingerSolver` 求解器基类，包含了 Crank-Nicolson

解法与显式解法的接口，以及一些共用的方法，如检查输入参数是否满足 Von Neumann 稳定性条件。两个求解器 `CrankNicolsonSolver` 与 `ExplicitSolver` 继承自基类，分别实现了 Crank–Nicolson 解法与显式解法。本题求解的一维含时薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,t)$$

在原子单位制 $\hbar=m=1$ 下化简为

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\psi$$

离散化时记 ψ_j^n 为在位置 $x_j=j\Delta x$ 和时间 $t^n=n\Delta t$ 处的波函数值。

2.2.1 Crank-Nicolson 算法

类比二阶偏微分方程中的 Gauss-Seidel 迭代，隐式的 Crank-Nicolson 算法对时间导数采用前向差分，对中心差分的空间导数和势能项取时间切片 n 和 $n+1$ 的平均，即:

$$i\frac{\psi_j^{n+1}-\psi_j^n}{\Delta t}=-\frac{1}{4}\left(\frac{\psi_{j+1}^{n+1}-2\psi_j^{n+1}+\psi_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}+\frac{\psi_{j+1}^{n}-2\psi_j^{n}+\psi_{j-1}^{n}}{(\Delta x)^2}\right)+\frac{1}{2}V_j\left(\psi_j^{n+1}+\psi_j^n\right)$$

可以整理为半步演化形式

$$\left(1+i\frac{\Delta t}{2}\hat{H}\right)\psi^{n+1}=\left(1-i\frac{\Delta t}{2}\hat{H}\right)\psi^n$$

其中哈密顿算符在每个时间切片上离散化为

$$\hat{H}\psi_j=-\frac{1}{2(\Delta x)^2}\left(\psi_{j+1}-2\psi_j+\psi_{j-1}\right)+V_j\psi_j$$

实际代码实现中，构造了两个三对角矩阵，化方程为 $\mathbf{A}\psi^{n+1}=\mathbf{B}\psi^n$，满足 $\mathbf{A}=\mathbf{I}+i\frac{\Delta t}{2}\mathbf{H}$与$\mathbf{B}=\mathbf{I}-i\frac{\Delta t}{2}\mathbf{H}$，即

$$\mathbf{A},\mathbf{B}=\begin{pmatrix}1+2\alpha\pm\frac{i\Delta t}{2}V_1 & \mp\alpha & 0 & \cdots & 0\\ \mp\alpha & 1+2\alpha\pm\frac{i\Delta t}{2}V_2 & \mp\alpha & \ddots & \vdots\\ 0 & \mp\alpha & 1+2\alpha\pm\frac{i\Delta t}{2}V_3 & \ddots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \mp\alpha\\ 0 & \cdots & 0 & \mp\alpha & 1+2\alpha\pm\frac{i\Delta t}{2}V_{N_x}\end{pmatrix}$$

其中 $\alpha=\frac{i\Delta t}{4(\Delta x)^2}$，模长需满足 Von Neumann 稳定性条件。

在演化步骤中，三对角矩阵均使用 CSC 稀疏格式存储，并使用 `scipy.sparse.linalg.spsolve` 进行求解，以提高计算效率和节省内存。

2.2.2 显式算法

显式算法对时间导数与空间导数采用中心差分，但不对相邻切片的势能或者空间导数进行平均

$$i\frac{\psi_j^{n+1}-\psi_j^{n-1}}{2\Delta t}=-\frac{1}{2}\frac{\psi_{j+1}^n-2\psi_j^n+\psi_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}+V_j\psi_j^n$$

故可以直接进行显式更新

$$\psi_j^{n+1}=\psi_j^{n-1}+\frac{i\Delta t}{\Delta x^2}\left(\psi_{j+1}^n+\psi_{j-1}^n-2\psi_j^n\right)-2i\Delta tV_j\psi_j^n$$

化为矩阵形式即为

$$\psi^{n+1} = \psi^{n-1} + \frac{i\Delta t}{(\Delta x)^2}\mathbf{L}\psi^n - 2i\Delta t\mathbf{V}\psi^n$$

其中 $\mathbf{V}$ 即离散的势能项，动能项为拉普拉斯算符

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

实际代码实现中没有显式定义 $\mathbf{L}$，而是在每一步中借助 `np.roll` 函数（将数组在周期边界条件下顺次移动），直接计算了 $\mathbf{L}\psi^n$。在第一步中因为没有 ψ^{n-1}，故使用 Crank-Nicolson 算法进行第一步演化，之后都使用显式算法进行演化。

2.3 伪代码

Powered by LaTeX pseudocode generator

Algorithm 4: Crank-Nicolson Method for Time Evolution (Optimized)

Input: ψ (initial wave function), Δt, Δx, V (potential), N_x (spatial resolution), N_t (time steps)

Output: ψ_{history} (wave function at all time steps)

$\alpha \leftarrow i\Delta t/(4\Delta x^2)$; `// Precompute coefficient`

$\mathbf{A} \leftarrow \text{ConstructMatrix}([-\alpha, 1+2\alpha+i\Delta tV/2, -\alpha], [-1,0,1], N_x)$; `// Left-hand matrix`

$\mathbf{B} \leftarrow \text{ConstructMatrix}([\alpha, 1-2\alpha-i\Delta tV/2, \alpha], [-1,0,1], N_x)$; `// Right-hand matrix`

for $t \leftarrow 1$ **to** $N_t - 1$ **do**

  $\psi \leftarrow \texttt{spsolve}(\mathbf{A}, \mathbf{B}\cdot\psi)$; `// Solve` $\mathbf{A}\psi^{(n+1)} = \mathbf{B}\psi^{(n)}$

  Append ψ to ψ_{history} ; `// Record updated wave function`

end

return ψ_{history}

Algorithm 5: Explicit Time Evolution with Crank-Nicolson First Step (Optimized)

Input: ψ (initial wave function), Δt, Δx, V (potential), N_x (spatial resolution), N_t (time steps)

Output: ψ_{history} (wave function at all time steps)

$\alpha \leftarrow i\Delta t/\Delta x^2, \psi_{\text{prev}} \leftarrow \psi, \psi_{\text{history}} \leftarrow [\psi]$; `// Initialize constants and history`

$\psi \leftarrow \texttt{CrankNicolsonStep}(\psi, \Delta t, \Delta x, V)$; `// Perform first step using CN method`

Append ψ to ψ_{history} ; `// Subsequent steps using explicit method`

for $t \leftarrow 2$ **to** $N_t - 1$ **do**

  $\psi_{\text{current}} \leftarrow \psi, \psi_{\text{jp1}} \leftarrow \texttt{np.roll}(\psi_{\text{current}}, 1), \psi_{\text{jm1}} \leftarrow \texttt{np.roll}(\psi_{\text{current}}, -1)$; `// Compute shifts`

  $\mathbf{L}\psi^n \leftarrow \psi_{\text{jp1}} + \psi_{\text{jm1}} - 2\psi_{\text{current}}$; `// Laplacian action`

  $\psi \leftarrow \psi_{\text{prev}} + \alpha\cdot(\mathbf{L}\psi^n) - 2i\Delta tV\cdot\psi_{\text{current}}$; `// Update` $\psi^{(n+1)}$

  $\psi_{\text{prev}} \leftarrow \psi_{\text{current}}$; `// Update` $\psi^{(n-1)}$ `for next step`

  Append ψ to ψ_{history} ; `// Record updated wave function`

end

return ψ_{history}

2.4 结果示例

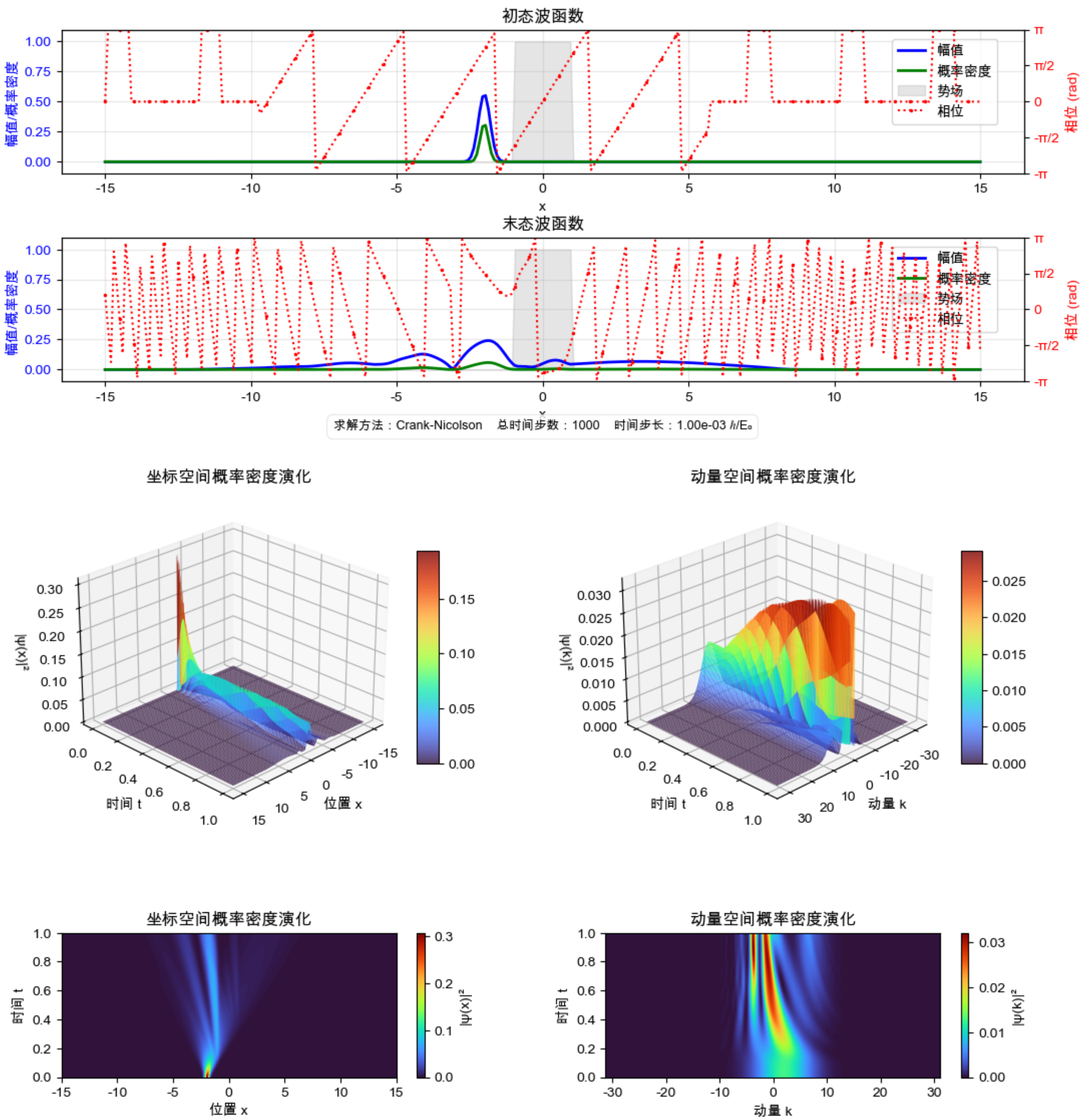


图 10: Crank–Nicolson 解法结果

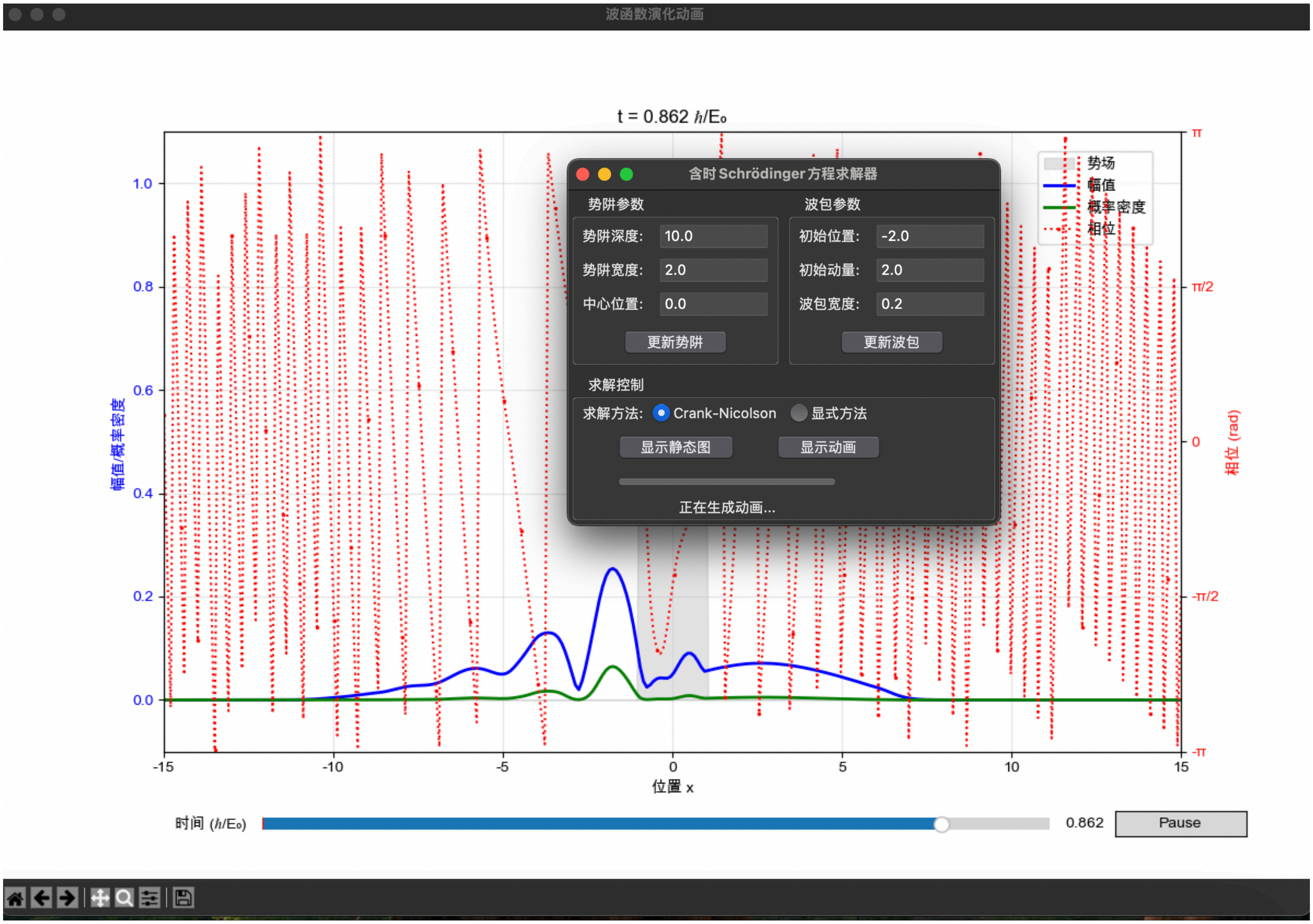


图 11: Crank–Nicolson 解法中间态（动画截图）

本题使用的默认参数也可从图中读出，下图表明两种解法结果一致。动画运行需要先点击“显示动画”按钮，待动画生成就绪后会显示并自动播放，有进度条可供拖动回放。动画播放器存在一些已知 bug，没力气修复了，不影响求解结果与静态图展示。

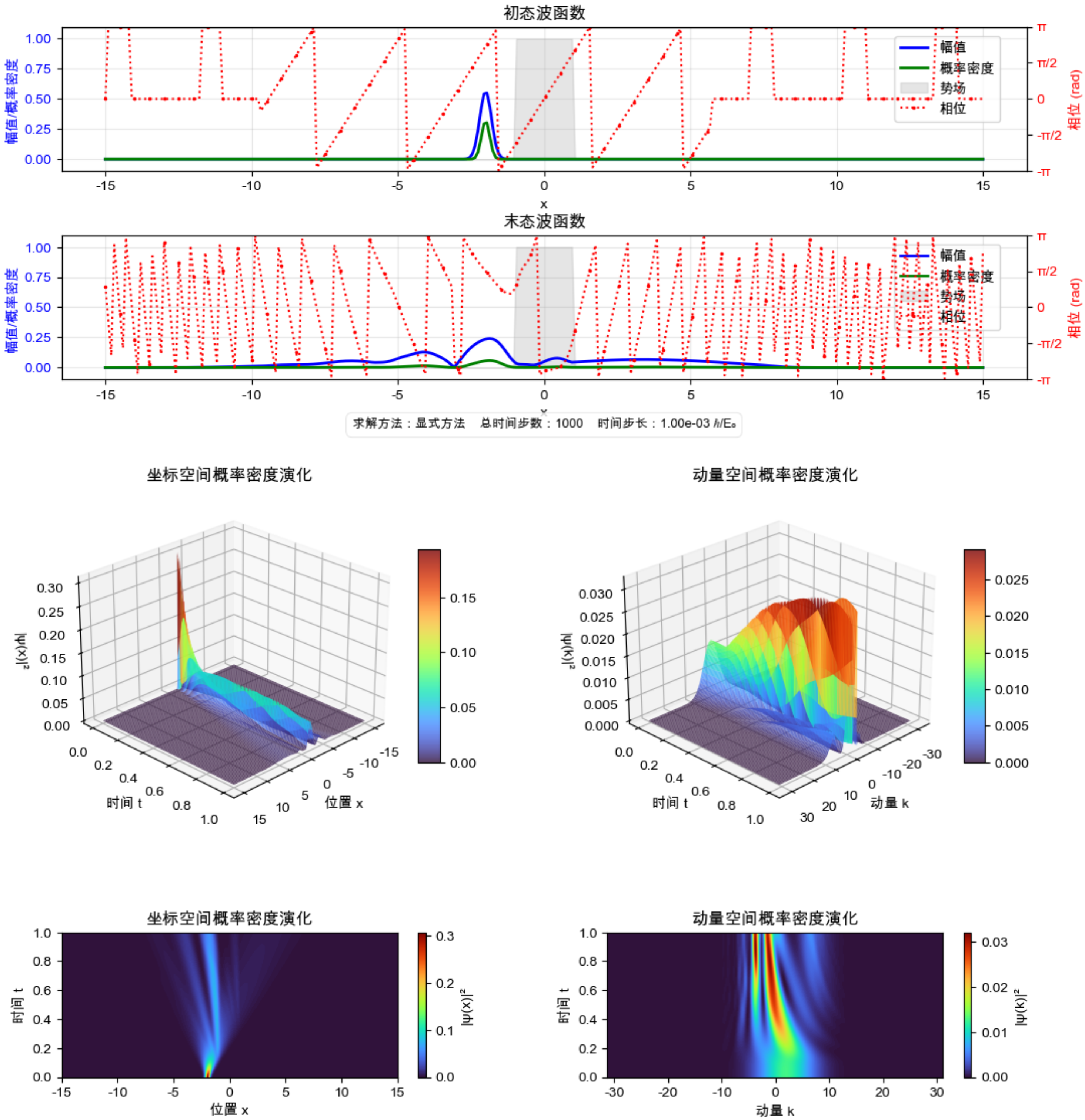

初态波函数
幅值
概率密度
势场
相位
幅值/概率密度
相位 (rad)
末态波函数
求解方法：显式方法　总时间步数：1000　时间步长：1.00e-03 $\hbar/E_0$
坐标空间概率密度演化
动量空间概率密度演化
时间 t
位置 x
动量 k
$|\psi(x)|^2$
$|\psi(k)|^2$

图 12: 显式解法结果

3 题目 3：波动方程显式求解稳定条件

3.1 题目描述

Prove the stability condition of the explicit scheme of the 1D wave equation by performing Von Neumann stability analysis:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

If $c\Delta t/\Delta x \leq 1$, the explicit scheme is stable.

3.2 证明

使用中心差分离散化

$$\frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta t^2} = c^2 \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2}.$$

令 $\alpha = \frac{c\Delta t}{\Delta x}$，则可改写为：

$$u_{i,j+1} = 2u_{i,j} - u_{i,j-1} + \alpha^2(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}).$$

假设数值解为傅里叶模式形式 $u_{i,j} = \xi^j e^{iKi\Delta x}$，代入差分方程得到：

$$\xi^{j+1} e^{iKi\Delta x} = 2\xi^j e^{iKi\Delta x} - \xi^{j-1} e^{iKi\Delta x} + \alpha^2 \left(\xi^j e^{iK(i+1)\Delta x} - 2\xi^j e^{iKi\Delta x} + \xi^j e^{iK(i-1)\Delta x} \right).$$

化简得到

$$\xi - 2 + 1/\xi = \alpha^2(e^{iK\Delta x} + e^{-iK\Delta x} - 2) = -4\alpha^2 \sin^2\left(\frac{K\Delta x}{2}\right).$$

设 $\beta = 1 - 2\alpha^2 \sin^2\left(\frac{K\Delta x}{2}\right)$，方程化为：

$$\xi^2 - 2\beta\xi + 1 = 0,$$

其解为：

$$\xi = \beta \pm \sqrt{\beta^2 - 1}.$$

根据冯 · 诺伊曼稳定性分析，为了数值方案稳定，要求放大因子 ξ 的模满足 $|\xi| \leq 1$. 由于 $\beta = 1 - 2\alpha^2 \sin^2\left(\frac{K\Delta x}{2}\right)$，当 $|\beta| \leq 1$ 时，有 $\beta^2 - 1 \leq 0$，此时 $\xi = \beta \pm i\sqrt{1 - \beta^2}$，模长恰好为：

$$|\xi| = \sqrt{\beta^2 + (1 - \beta^2)} = 1.$$

而一旦 $|\beta| > 1$，则 $|\xi_+| > 1$，数值方案不稳定。因此，为了 $|\xi| \leq 1$，需满足

$$0 \leq \alpha^2 \sin^2(\frac{K\Delta x}{2}) \leq 1, \quad \forall K \in \mathbb{R}.$$

亦即要求

$$\boxed{\alpha = \frac{c\Delta t}{\Delta x} \leq 1}$$

此时一维波动方程的显式差分格式是稳定的。