

Sprawozdanie
z laboratorium komputerowego

1 Zagadnienie działa Newtona

Działo Newtona jest doświadczeniem myślowym stworzony przez Isaaca Newtona, aby wyjaśnić ruch orbitalny księżyca. Właściwie, dlaczego księżyc nie spada na Ziemię jeśli odczuwa przyspieszenie spowodowane grawitacją. Także dlaczego księżyc, który porusza się ze stałą prędkością i stałym kierunkiem oraz nie odczuwa żadnej siły zewnętrznej, nie porusza się po linii prostej, ale po okręgu. Do wyjaśnienia tych zagadnień Newton przeprowadził eksperyment, w którym na wysokim szczytce góry umieszczono armatę, którą wystrzelono poziomo pocisk. Po porównaniu dwóch wzorów na odległość, jaką pokona kula armatnia w poziomie i w pionie można zauważać, że odległość w poziomie ($d_x = \mathbf{v} \times t$) zależy od jej prędkości. Następnie Newton zdał sobie sprawę, że jeśli wybierze odpowiednią prędkość, trajektoria kuli armatniej zakrzywi się dokładnie w takim samym stopniu co krzywizna Ziemi, a zatem kula armatnia zawsze pozostanie na tej samej wysokości nad ziemią. Tym samym równoważył on bezwładność kuli armatnej, która sprawia, że chce ona kontynuować podróż w linii prostej, a więc z dala od Ziemi, z przyspieszeniem spowodowanym grawitacją Ziemi. W rezultacie kula armatnia krąży wokół Ziemi, zawsze przyspieszając w jej kierunku, ale nigdy nie zbliżając się do niej. Finalnie Newton doszedł do wniosku, że prędkość kuli armatnej jest związana z przyspieszeniem spowodowanym grawitacją Ziemi (\mathbf{a}) i promieniem orbity (\mathbf{r} - mierzonym od środka orbity; tj. środka Ziemi) w następujący sposób:

$$\mathbf{v}^2 = \mathbf{a} \times \mathbf{r}$$

Celem zadania jest napisanie programu w C++ rozwiązuające zagadnienie działa Newtona:

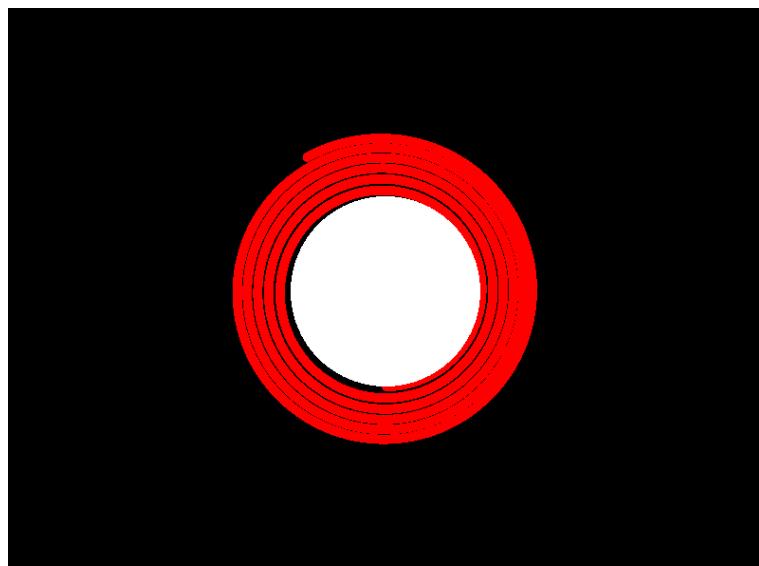
$$\frac{d^2\mathbf{r}(t)}{dt^2} = -\frac{GM}{r(t)^3}\mathbf{r}(t),$$

$$\mathbf{r}(t=0) = (0, R),$$

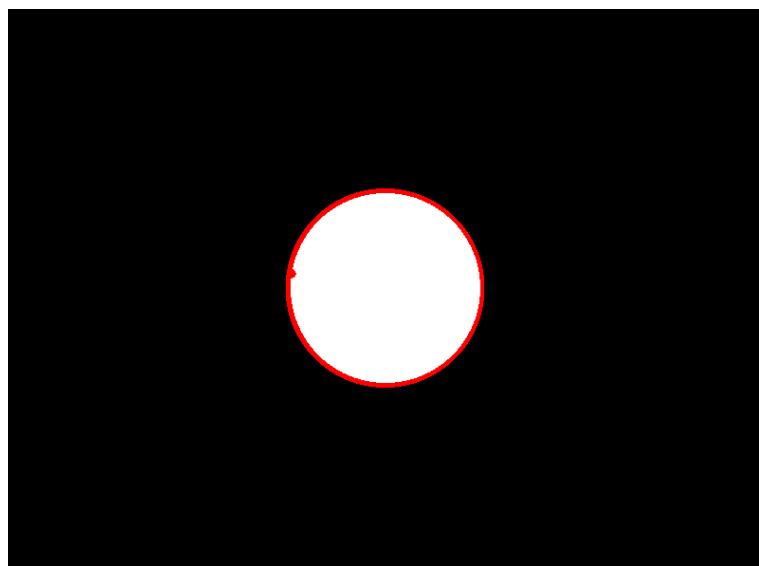
$$\mathbf{v}(t=0) = (V, 0).$$

Przedstawienie orbit po zmianach wartości V , przyjmując $G = M = R = 1$. Wyznaczyć zależność błędu w zależności od metody całkowania równania ruchu (Eulera, Eulera-Cromera i Rugego-Kutty rzędu 4) oraz kroku dt , porównując z rozwiązaniem analitycznym:

$$r(t) = \frac{R^2 V^2}{GM + \sqrt{G^2 M^2 + R^2 V^2 \left(-\frac{2GM}{R} + V^2\right)} \cos(\varphi(t) - \varphi_0)}.$$

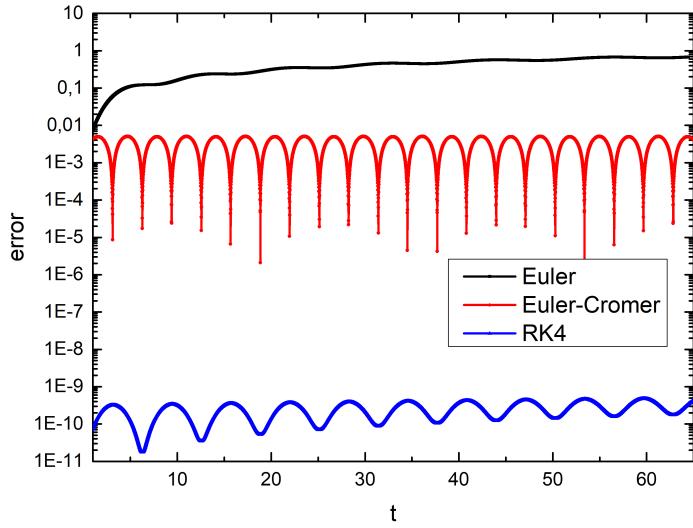


(a) Zastosowanie metody Eulera

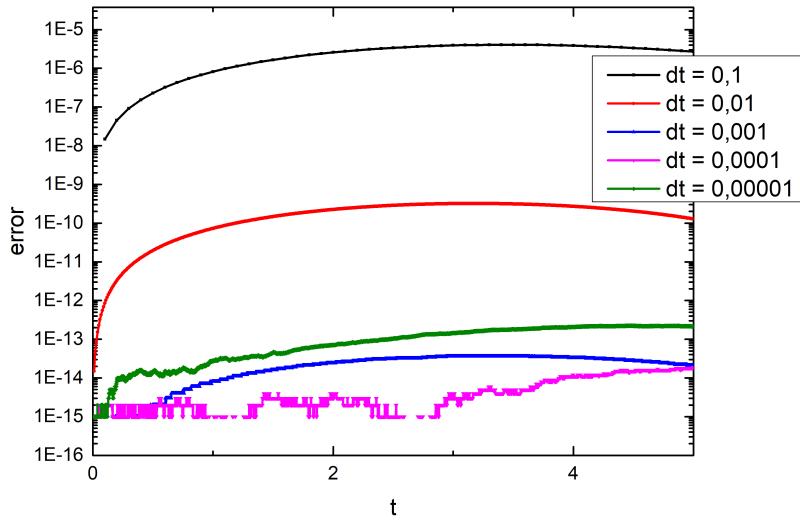


(b) Zastosowanie metody Eulera-Cromera lub Rungego-Kutty rzędu 4

Rysunek 1: Tor lotu kuli z prędkością początkową $V_0 = 1$.



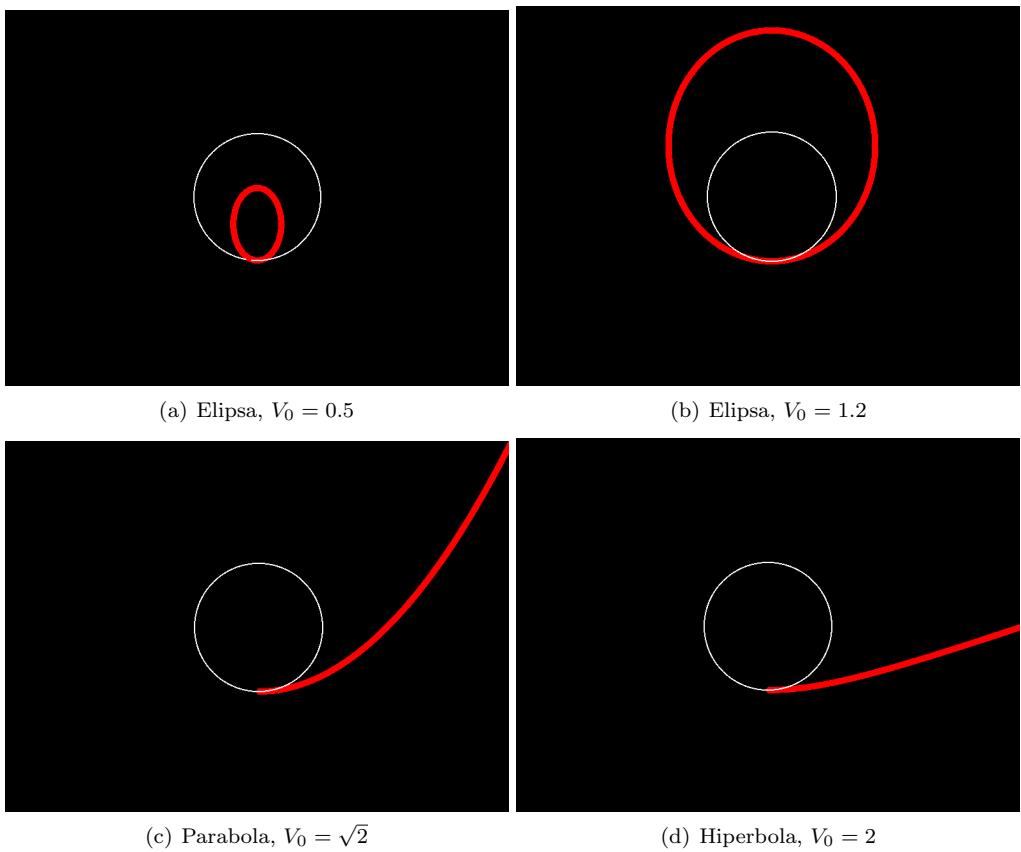
Rysunek 2: Zależność błędu w stosunku do użytej metody, na przykładzie toru lotu w kształcie okręgu.



Rysunek 3: Zależność błędu od przyjętego kroku dt .

Od przyjętej prędkości początkowej tor lotu przyjmuje inne kształty:

- Elipsa: $V \in (0, 1)$ lub $V \in (1, \sqrt{2})$
- Okrąg: $V = 1$
- Parabola: $V = \sqrt{2}$
- Hiperbola: $V > \sqrt{2}$



Rysunek 4: Tory lotu kuli armatniej w zależności od przyjętej prędkości początkowej V_0

W przypadku metody Eulera, pomimo swojej prostoty, wykazywała tendencję do dużych błędów, co widać na rysunku 1. Czego nie widać to różnic pomiędzy metodami Eulera-Cromera i Rungego-Kutty rzędu 4. Różnice dostrzegamy przyglądając się rysunkowi 2, zależności błędu od metody. Występują wyraźne różnice między tymi metodami, gdzie najlepszą okazała się metoda RK4 z błędem wynoszący ok. 1^{-10} . Analiza błędów numerycznych w zależności od kroku czasowego wykazała, że mniejsze wartości dt przyczyniały się do zmniejszenia błędów dla wszystkich badanych metod, aż do $dt = 0,00001$ w którym nastąpiło zwiększenie się błędu w czasie symulacji w stosunku do wyższych wartości kroku.

2 Ruch cząsteczki w polu magnetycznym

Podstawowym mechanizmem ruchu cząsteczki w polu magnetycznym jest oddziaływanie między magnetycznym polem indukowanym a ładunkiem elektrycznym cząsteczki. Ruch ten jest opisany zgodnie z prawem Lorentza, które mówi, że na ładunek poruszający się w polu magnetycznym działa siła prostopadła zarówno do kierunku ruchu, jak i do kierunku pola magnetycznego. W wyniku oddziaływania z polem magnetycznym, cząsteczka może wykonywać różne rodzaje ruchu. Jeśli cząsteczka porusza się prostopadle do linii pola magnetycznego, to będzie wykonywać ruch po okręgu lub spirali wokół linii pola magnetycznego. Ten rodzaj ruchu jest nazywany ruchem cykloidalnym lub ruchem obiegowym. Jeżeli cząsteczka porusza się równolegle lub antyrównolegle do linii pola magnetycznego, nie będzie doświadczać siły magnetycznej i będzie poruszać się po linii prostoliniowej.

Układ równań opisujących ruch cząstki w polu magnetycznym, wygląda następująco:

$$\begin{cases} \frac{dr}{dt} = v \\ \frac{dv}{dt} = -iv\Omega \end{cases}$$

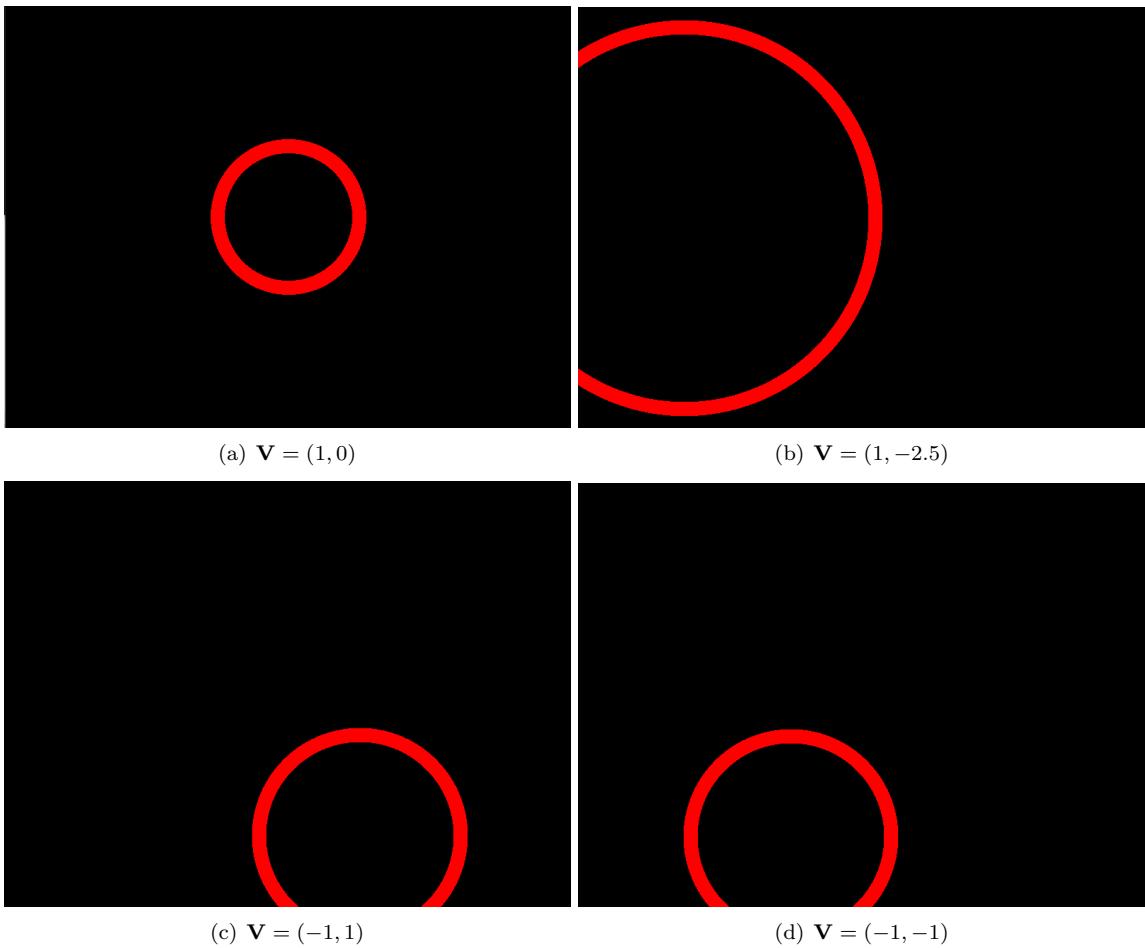
gdzie $\Omega = \frac{eB_z}{mc}$.

Algorytm:

$$\begin{cases} v_{n+1} = \frac{1-\alpha^2-2i\alpha}{1+\alpha^2} v_n \\ r_{n+1} = r_n + (v_n + v_{n+1}) \frac{\Delta t}{2} \end{cases}$$

gdzie $\alpha = \frac{1}{2} \Delta t \Omega$.

Celem ćwiczenia jest zbadanie ruchu cząstki dla różnych warunków początkowych.



Rysunek 5: Tor cząstki w polu magnetycznym przy różnych zadanych prędkościach $\mathbf{V} = (V_x, V_y, 0)$ oraz stałej indukcji magnetycznej $\mathbf{B} = (0, 0, 1)$

Na rysunku 5 możemy zobaczyć, że cząsteczka porusza się prostopadle do linii pola magnetycznego, jej trajektoria będzie okrężna. Promień krzywizny tej trajektorii zależy od masy, ładunku i prędkości cząsteczki, a także od natężenia pola magnetycznego. W naszym przypadku unormowaliśmy masę, ładunek i natężenie pola magnetycznego do 1. Większa prędkość prowadzi do większej siły magnetycznej i bardziej zakrzywionej trajektorii. Za to większe natężenie pola magnetycznego prowadzi do mniejszych promieni krzywizny trajektorii.

3 Ruch cząsteczki w polu magnetycznym i stałym elektrycznym

W obecności stałego pola magnetycznego i stałego pola elektrycznego cząsteczki naładowane mogą doświadczać sił i przyspieszeń, które znaczco wpływają na ich trajektorię i kinematykę. Istnieją dwa kluczowe oddziaływanie: siła Lorentza w polu magnetycznym i siła elektrostatyczna w polu elektrycznym.

$$m\mathbf{r} - e\mathbf{E} + \frac{e}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

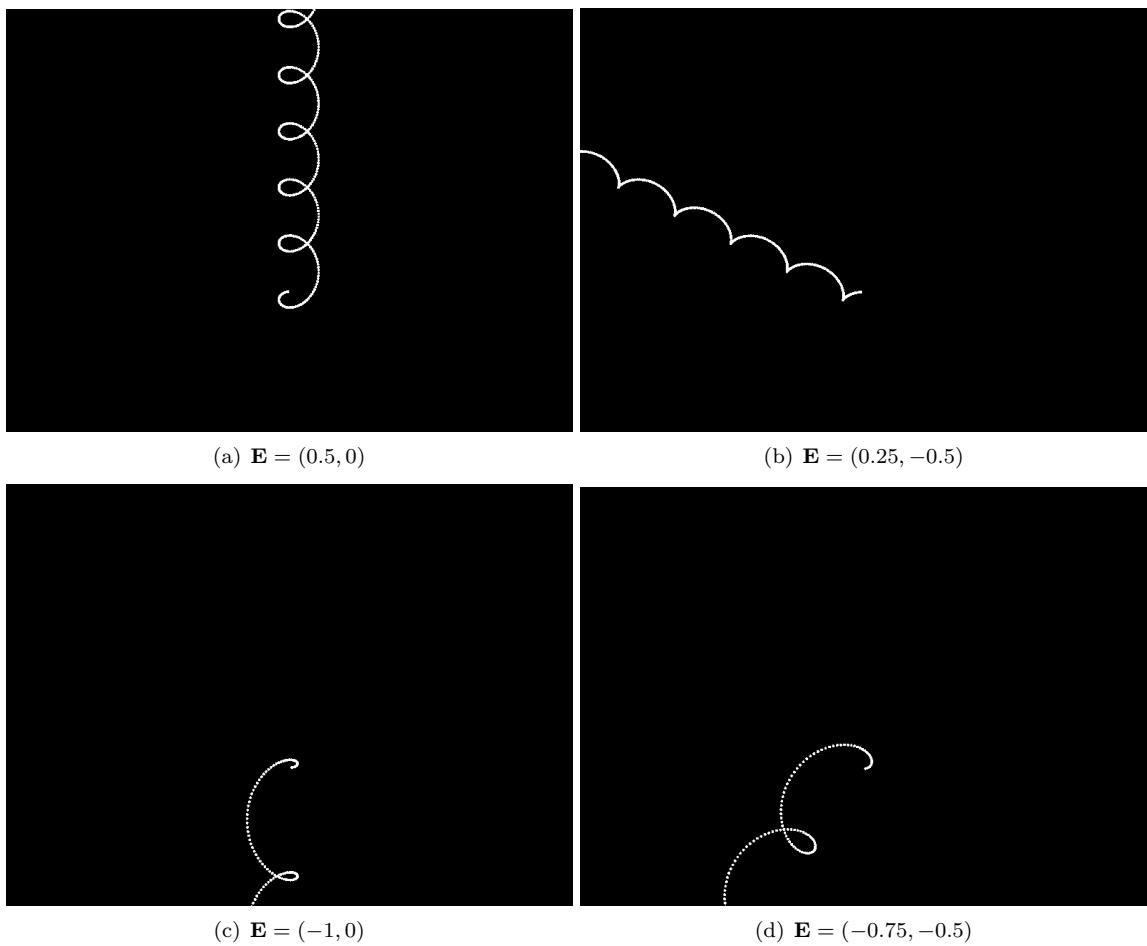
$$E = E_x + iE_y$$

Siła Lorentza jest wynikiem interakcji pomiędzy polem magnetycznym a ruchem cząstki naładowanej poruszającej się z pewną prędkością. Siła ta jest prostopadła zarówno do kierunku ruchu cząstki, jak i do kierunku pola magnetycznego. Jej wartość zależy od natężenia pola magnetycznego, ładunku cząstki oraz prędkości, z jaką porusza się cząstka. Z kolei pole elektryczne wywołuje siłę elektrostatyczną na cząstkę naładowaną. Ta siła zależy od ładunku cząstki oraz natężenia pola elektrycznego. Jeśli cząstka ma dodatni ładunek, siła elektrostatyczna działa w kierunku przeciwnym do pola elektrycznego, natomiast jeśli cząstka ma ujemny ładunek, siła działa w tym samym kierunku co pole elektryczne.

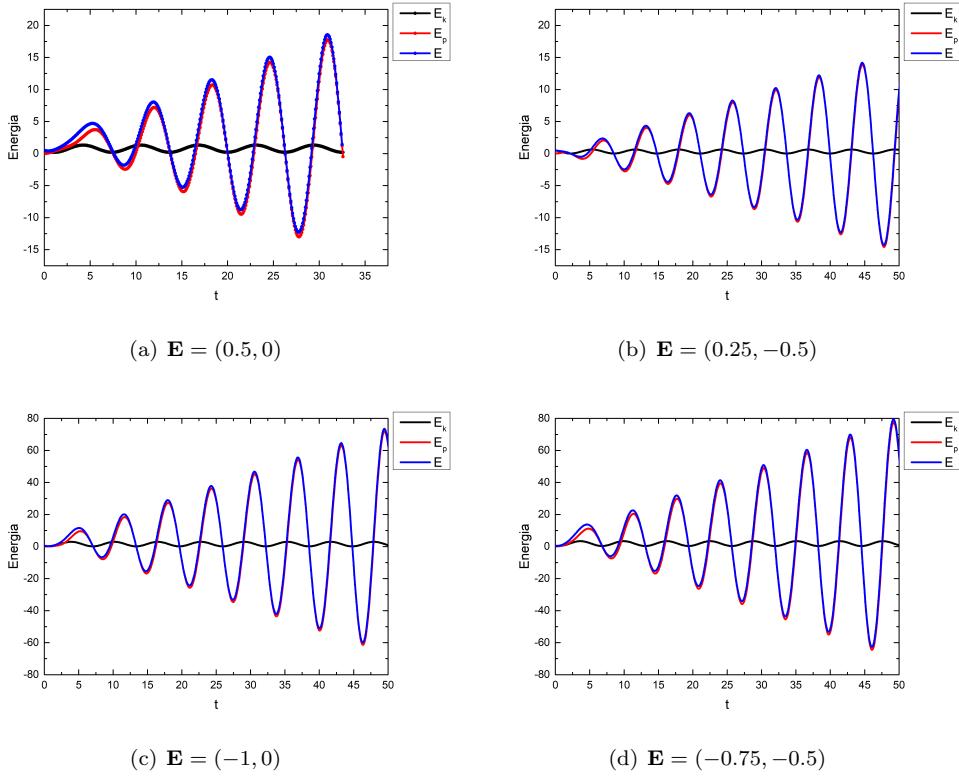
Następuje modyfikacja rozwiązania:

$$v_{n+1} = \frac{e}{m}\Delta t \left(\frac{1-i\alpha}{1+\alpha^2} \right) E + \left(\frac{1-\alpha^2-2i\alpha}{1+\alpha^2} \right) v_n$$

Celem ćwiczenia jest zbadanie zagadnienia dla różnych warunkach początkowych oraz wyznaczenie energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej.



Rysunek 6: Tor ruchu cząstki w polu elektromagnetycznym w różnych zadanych wartościach pola elektrycznego \mathbf{E} .



Rysunek 7: Wykresy energii kinetycznej, potencjalnej i całkowitej dla powyższych przypadków.

Widać, że ruch cząsteczków jest wynikiem oddziaływanego pól magnetycznego i elektrycznego na naładowane cząstki. Zmiana pola elektrycznego istotnie wypływało na kierunek trajektorie ruchu cząstki. Dodatkowo na rysunku 7 widzimy wpływ zmian wartości pola elektrycznego na energię całkowitą, kinetyczną i potencjalną cząstki.

4 Równanie Laplace'a i Poissona

Równanie Laplace'a jest równaniem różniczkowym cząstkowym drugiego stopnia, które występuje w kontekście funkcji harmonicznych. Może być stosowane do opisu wielu zjawisk fizycznych, takich jak rozkład temperatury, potencjału elektrycznego czy rozkład potencjału grawitacyjnego. W przypadku dwuwymiarowym równanie Laplace'a przyjmuje postać:

$$\Delta U = 0$$

Równanie Poissona jest rozszerzeniem równania Laplace'a i uwzględnia obecność źródeł w polu. Może być stosowane w przypadkach, gdy istnieje źródło lub odpływ pewnego rodzaju substancji, takich jak ładunki elektryczne, masy lub ciepło. W przypadku dwuwymiarowym równanie Poissona przyjmuje postać:

$$\Delta U = -\frac{\rho}{\epsilon}$$

gdzie ρ oznacza gęstość źródła, a ϵ jest przenikalnością dielektryczną.

Celem ćwiczenia jest zbadanie zagadnienia dla wybranych warunków początkowych i brzegowych, przyjmując kilka źródeł punktowych.

Obrazy z symulacjach robiono w czasie od 0 s do 45 s trwania programu w odstępach co 15 s.

Przyjęte warunki brzegowe:

```

U[ i ][ 0 ]= sin ( 2.0 * M_PI*( double ) i /( double )imax )
            *sinh ( 2.0 * M_PI*( double ) 0 /( double )jmax)+sinh ( 2.0 * M_PI )
U[ i ][ jmax -1 ]=sin ( 2.0 * M_PI*( double ) i /( double )imax )
            *sinh ( 2.0 * M_PI*( double )( jmax -1)/( double )jmax)+sinh ( 2.0 * M_PI )
U[ 0 ][ j ]=sin ( 2.0 * M_PI*( double ) 0 /( double )imax )
            *sinh ( 2.0 * M_PI*( double ) j /( double )jmax)+sinh ( 2.0 * M_PI )
U[ imax -1 ][ j ]=sin ( 2.0 * M_PI*( double )( imax -1)/( double )imax )
            *sinh ( 2.0 * M_PI*( double ) j /( double )jmax)+sinh ( 2.0 * M_PI )

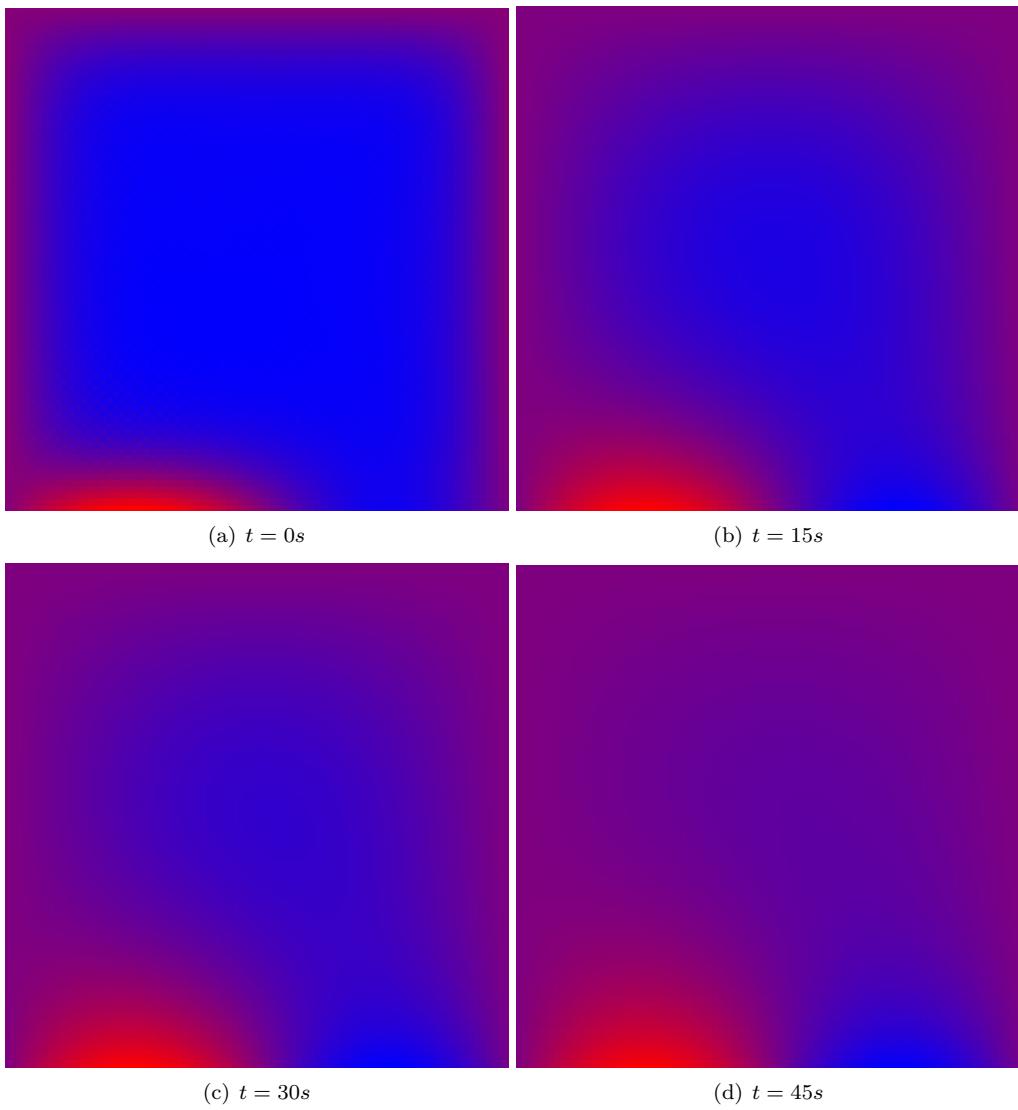
```

Przyjęte źródła punktowe:

```

rij [ 20 ][ 20 ]=1 / ( h*h );
rij [ 50 ][ 40 ]=1 / ( h*h );
rij [ 70 ][ 10 ]=1 / ( h*h );

```



Rysunek 8: Rozwiązywanie równania na kwadratowej sieci z zadanyimi, powyżej zdefiniowanymi warunkami.

Przyjęte warunki brzegowe:

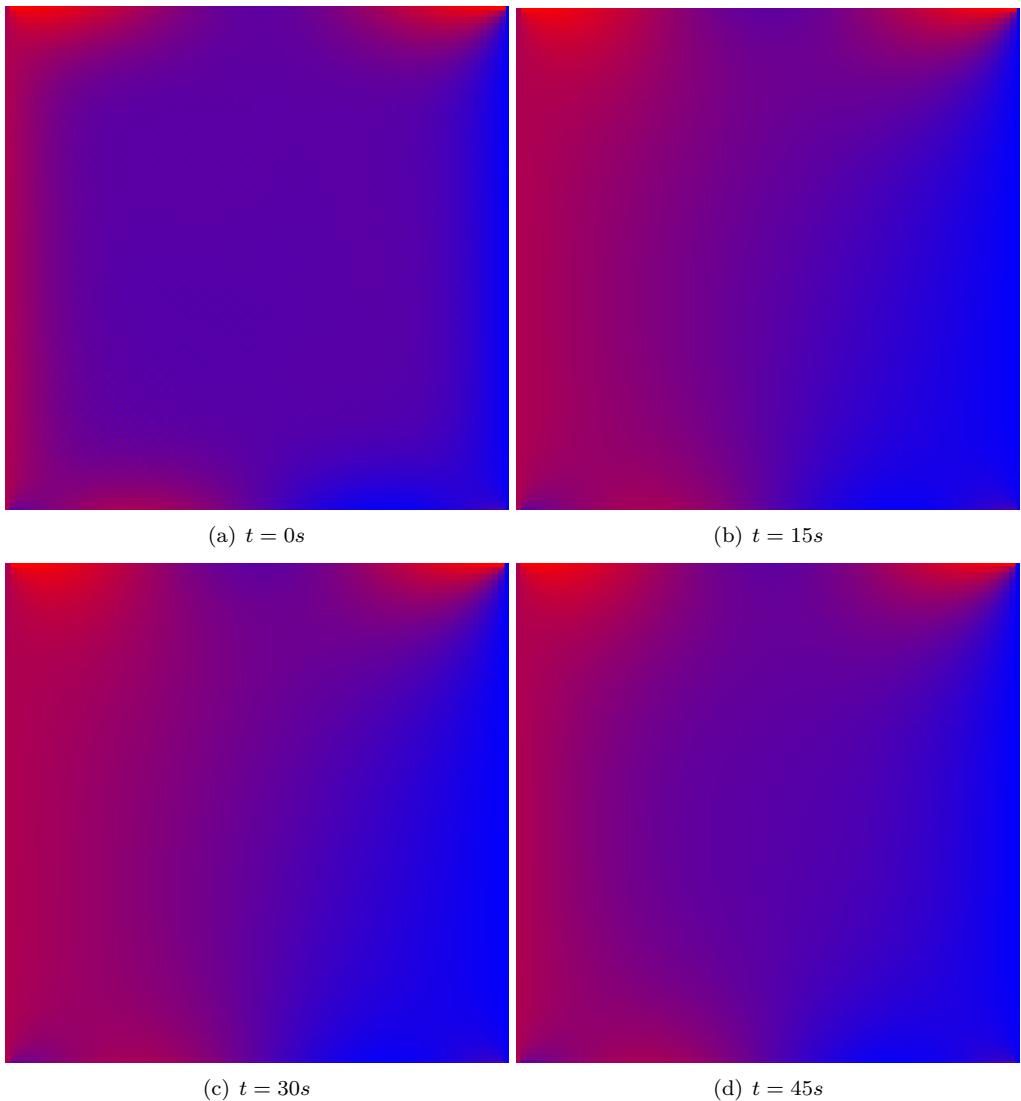
```

U[ i ][ 0 ] = cos ( 2.0*M_PI*( double ) i /( double )imax )
              *cosh ( 2.0*M_PI*( double )( jmax-1)/( double )jmax)+cosh ( 2.0*M_PI )
U[ i ][ jmax-1]=sin ( 2.0*M_PI*( double ) i /( double )imax )
              *sinh ( 2.0*M_PI*( double )( jmax-1)/( double )jmax )
U[ 0 ][ j]=sin ( 2.0*M_PI*( double ) 0 /( double )imax )
              *sinh ( 2.0*M_PI*( double ) j /( double )jmax)+sinh ( 2.0*M_PI );
U[ imax-1 ][ j]=- ( sin ( 2.0*M_PI*( double )( imax-1)/( double )imax )
                     *sinh ( 2.0*M_PI*( double ) j /( double )jmax)+sinh ( 2.0*M_PI ) )

```

Przyjęte źródła punktowe:

```
r i j [ 20 ][ 20 ]=1 / ( h*h ) ;
r i j [ 50 ][ 40 ]=1 / ( h*h ) ;
r i j [ 70 ][ 10 ]=1 / ( h*h ) ;
```



Rysunek 9: Rozwiązywanie równania na kwadratowej sieci z zadanimi, powyżej zdefiniowanymi warunkami.

Przyjęte warunki brzegowe:

$$\begin{aligned}
 U[i][0] &= -(\cos(2.0 * M_PI * (double)i / (double)imax) \\
 &\quad * \cosh(2.0 * M_PI * (double)0 / (double)jmax) + \cosh(2.0 * M_PI)) \\
 U[i][jmax-1] &= \cos(2.0 * M_PI * (double)i / (double)imax) \\
 &\quad * \cosh(2.0 * M_PI * (double)(jmax-1) / (double)jmax) + \cosh(2.0 * M_PI) \\
 U[0][j] &= \sin(2.0 * M_PI * (double)0 / (double)imax) \\
 &\quad * \cosh(2.0 * M_PI * (double)j / (double)jmax) + \cosh(2.0 * M_PI) \\
 U[imax-1][j] &= \sin(2.0 * M_PI * (double)(imax-1) / (double)imax) \\
 &\quad * \sinh(2.0 * M_PI * (double)j / (double)jmax) + \sinh(2.0 * M_PI)
 \end{aligned}$$

Przyjęte źródła punktowe:

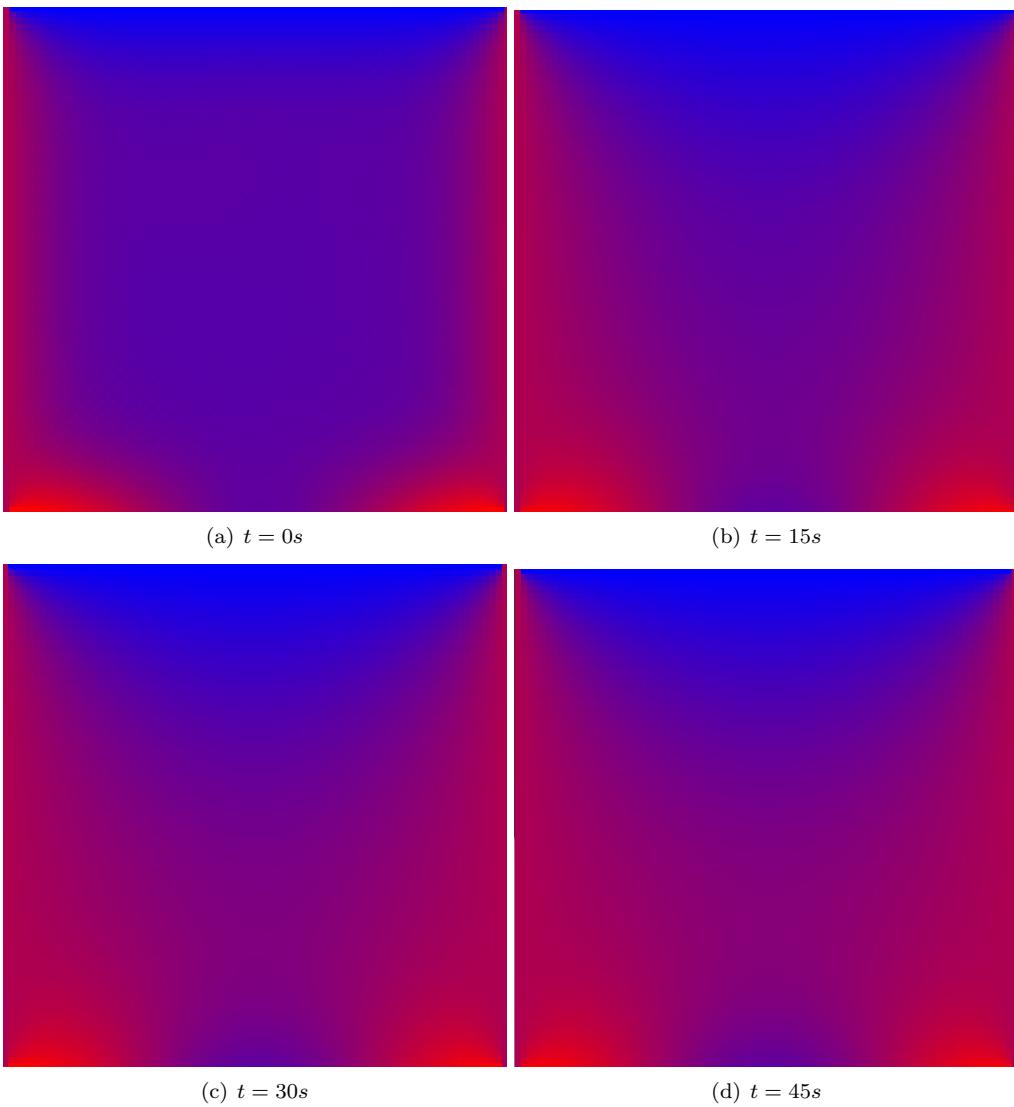
$$\begin{aligned}
 r_{ij}[20][10] &= 1 / (h * h); \\
 r_{ij}[35][10] &= 1 / (h * h); \\
 r_{ij}[50][10] &= 1 / (h * h); \\
 r_{ij}[70][10] &= 1 / (h * h);
 \end{aligned}$$

```

rij[20][70]=1/(h*h);
rij[35][70]=1/(h*h);
rij[50][70]=1/(h*h);
rij[70][70]=1/(h*h);

```

```
r ij [10][20]=1/(h*h);
r ij [10][35]=1/(h*h);
r ij [10][50]=1/(h*h);
r ij [10][70]=1/(h*h);
```



Rysunek 10: Rozwiązywanie równania na kwadratowej sieci z zadanyimi, powyżej zdefiniowanymi warunkami.

Równanie Laplace'a opisuje rozkład potencjału w polu, gdy nie ma żadnych źródeł, natomiast równanie Poissona uwzględnia obecność źródeł. Dlatego są one niezwykle ważne w analizie potencjałów fizycznych, takiej jak rozkład temperatury, które symulujemy.

5 Równanie adwekcji

Równanie adwekcji opisuje proces przenoszenia pewnej ilości fizycznej (np. masy, energii czy stężenia substancji) przez ruchome środowisko. Główną zależnością, którą uwzględnia, jest prędkość przepływu, która jest odpowiedzialna za przemieszczanie się tej ilości w przestrzeni. Równanie adwekcji jest często opisywane za pomocą jednowymiarowego równania różniczkowego cząstkowego, choć może być również rozszerzone na przypadki wielowymiarowe.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

Będziemy rozwiązywać równanie metodami Laxa:

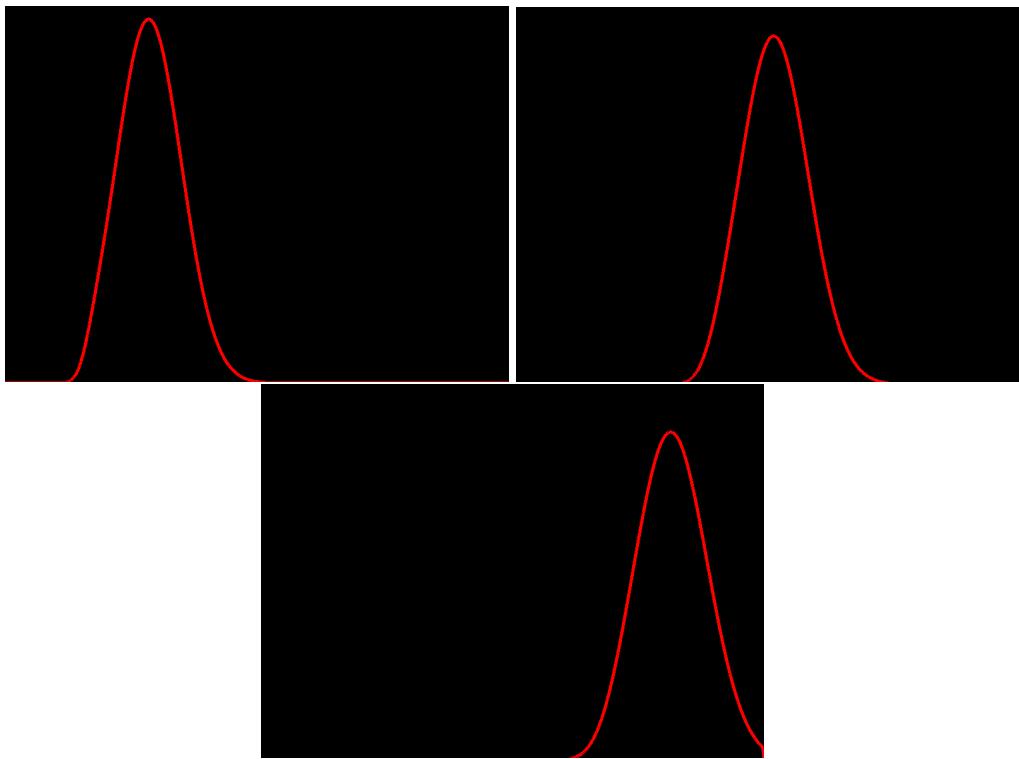
$$u_i^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{i+1}^n + u_{i-1}^n) - \frac{v\Delta t}{2h}(u_{i+1}^n + u_{i-1}^n)$$

, oraz punktu środkowego:

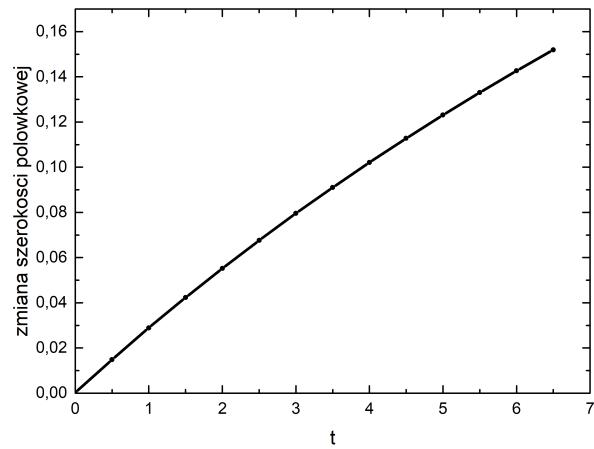
$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} - \frac{v\Delta t}{2h}(u_{i+1}^n + u_{i-1}^n)$$

Celem ćwiczenia jest zbadanie rozwiązania dla wybranych warunkach początkowych i brzegowych. Wykreślenie zależność $u(x,t)$ dla wybranych chwil czasowych oraz zmianę szerokości połówkowej w czasie.

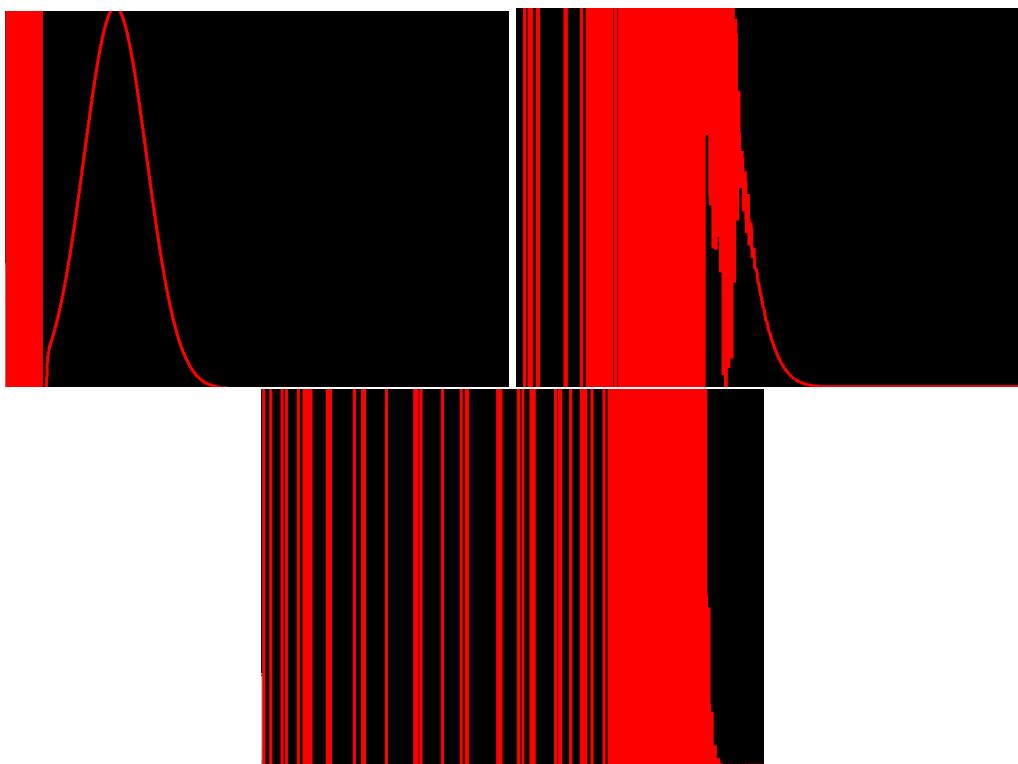
Warunkiem początkowy jest krzywa Gaussa o szerokości połówkowej mniejszej 10 razy niż cały przedział, w którym rozwiązujeśmy zagadnienie. Warunek brzegowy jest periodyczny $u_0^n = u_{l_{max}}^n$ dla każdej chwili czasu n . $\Delta t = 0.005$, $h = 0.01$, $v = 1$.



Rysunek 11: Przechodzenie, adwekcja substancji w zadanym przedziale.



Rysunek 12: Zależność zmiany szerokości połówkowej w czasie, dla zadanych powyższej warunkach, metodą Laxa.



Rysunek 13: Próba rozwiązania równania adwekcji metodą punktu środkowego.

6 Równanie dyfuzji

Równanie dyfuzji można sformułować na wiele sposobów, w zależności od kontekstu i rodzaju dyfuzji, z jaką mamy do czynienia. Jednak podstawowe równanie dyfuzji jest znane jako równanie różniczkowe cząstkowe drugiego rzędu, które opisuje proces dyfuzji w jednym lub wielu wymiarach przestrzennych. W przypadku jednowymiarowej dyfuzji, równanie dyfuzji ma postać:

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

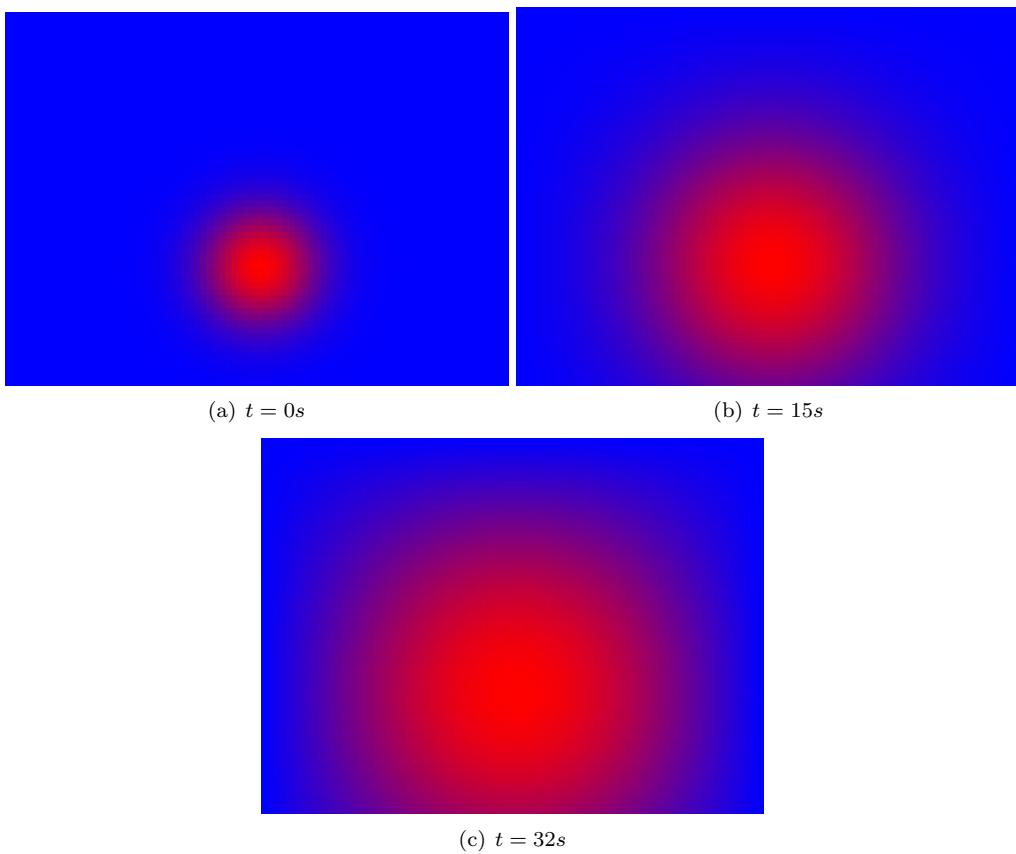
Równanie dyfuzji ma wiele istotnych zastosowań. Może być stosowane do opisu dyfuzji substancji chemicznych w ośrodkach porowatych, rozprzestrzeniania się ciepła w ciałach stałych, transportu cząsteczek w tkankach biologicznych oraz wielu innych procesów, w których zachodzi dyfuzja.

Algorytm wygląda następująco:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{h^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

Celem ćwiczenia jest zbadanie zagadnienia dla wybranych punktów początkowych i brzegowych.

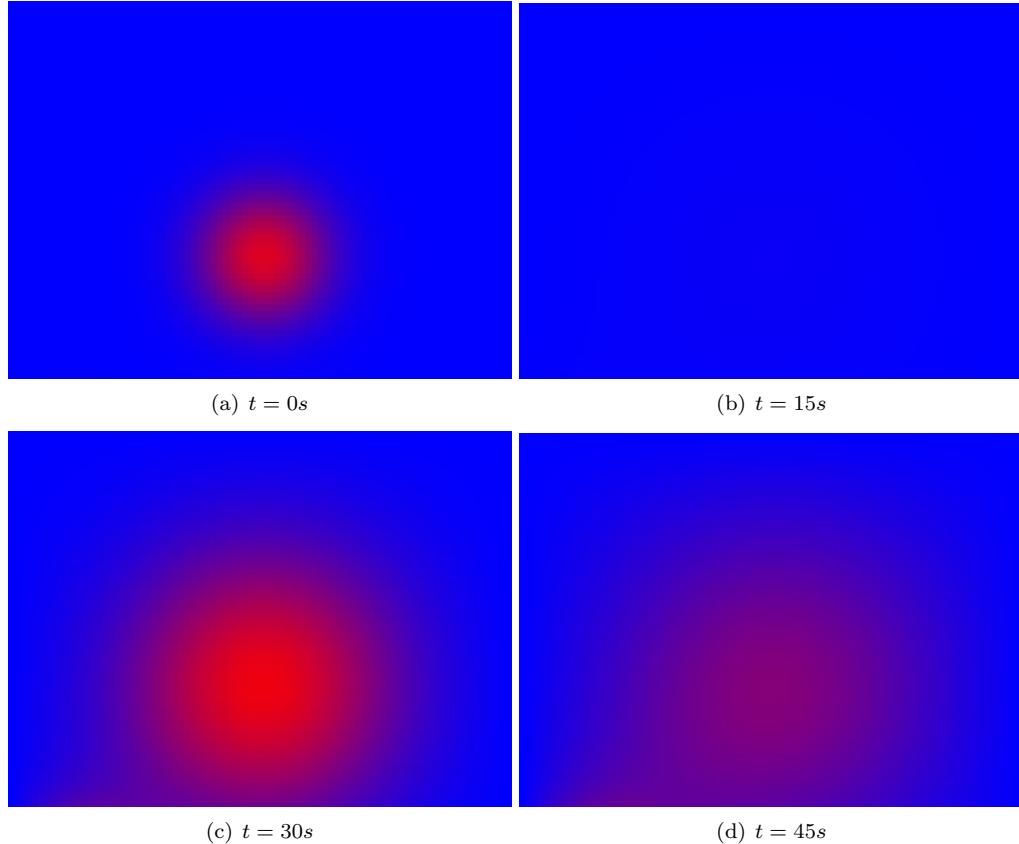
Warunek brzegowy: periodyczny, a warunek początkowy: krzywa Gaussa o szerokości połówkowej mniejszej 10 razy niż cały przedział, w którym rozwiązujemy zagadnienie.



Rysunek 14: Symulacja bez nadania punktowych źródeł.

Poniżej zostało nadane jedno źródło punktowe:

$$u[10][78] = 1 + \cos(8*t);$$

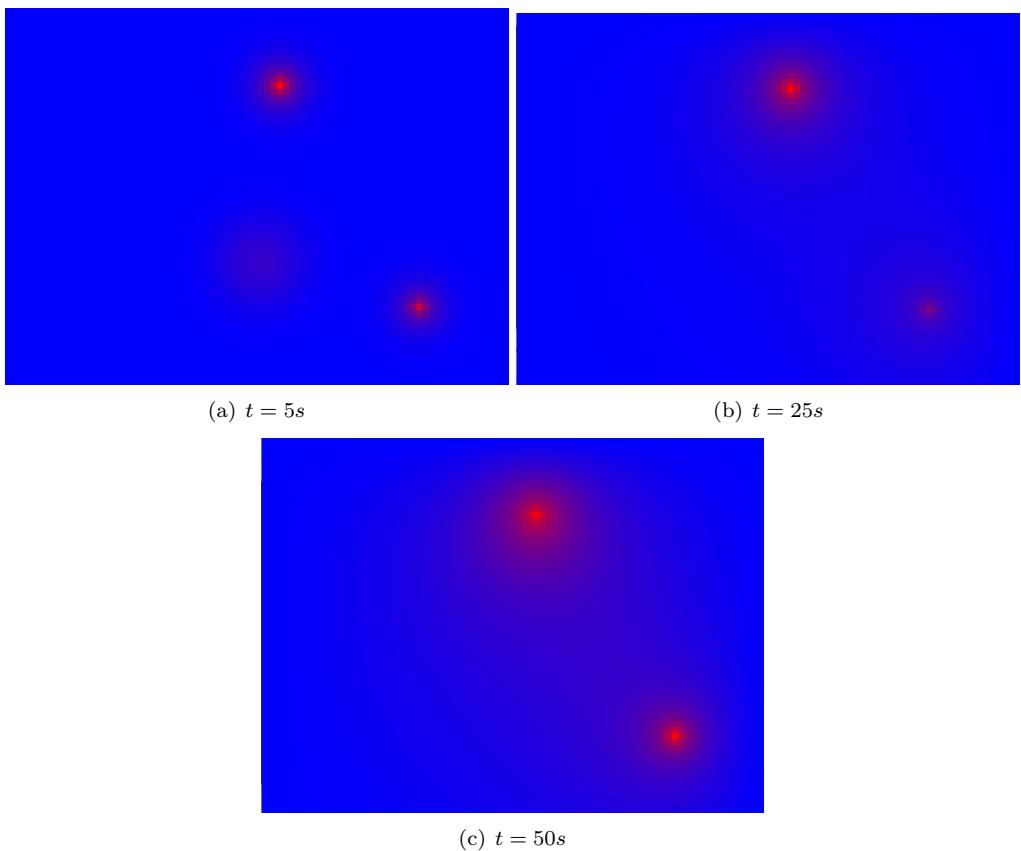


Rysunek 15: Symulacja z zadanym jednym źródłem punktowym.

W ostatnim przykładzie zostały nadane dwa źródła punktowe:

$$u[65][47] = 2 + \sin(8*t);$$

$$u[43][12] = 3 + \sin(5*t);$$



Rysunek 16: Symulacja z nadanymi dwoma źródłami punktowymi.

Na przykładach przedstawiono zastosowanie użycia równania dyfuzji, który opisuje zmianę koncentracji substancji w czasie i przestrzeni. Dzięki temu umożliwia nam prognozowanie rozprzestrzeniania się substancji oraz badanie wpływu różnych czynników na ten proces. Wpływem punktowych źródeł było naprzemienne wzmacnianie i zanikanie głównego źródła lub całkowite wygaśnięcie.

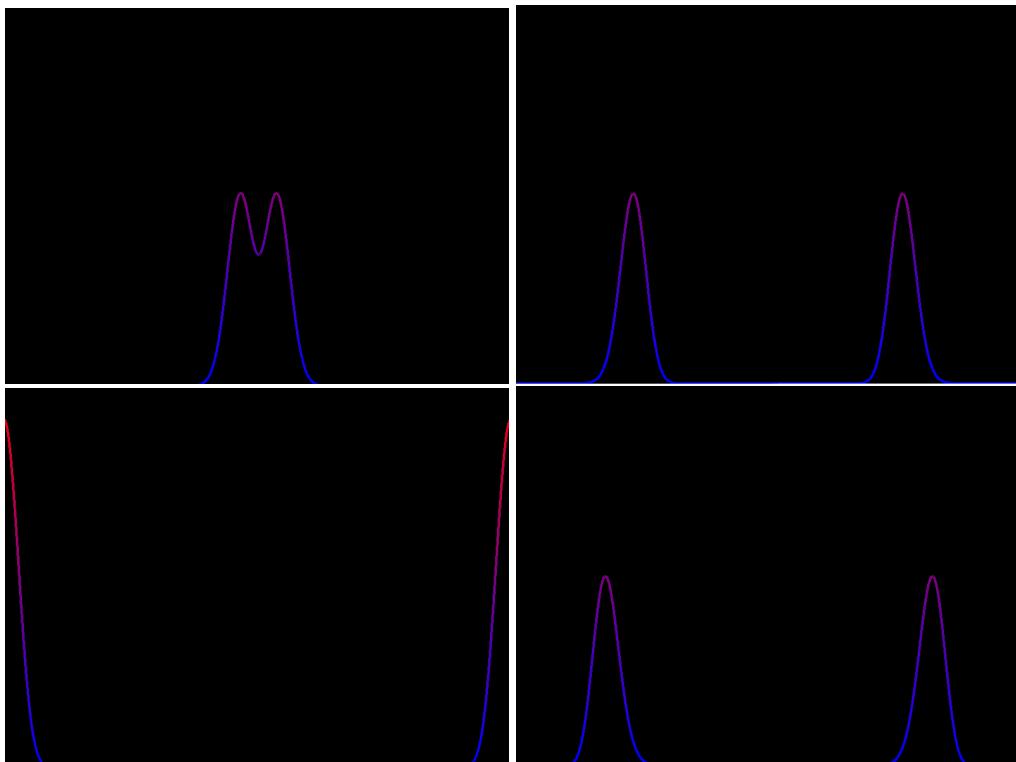
7 Równanie falowe

Równania falowe to rodzaj równań różniczkowych cząstkowych, które opisują propagację fal w przestrzeni i czasie. Dotyczy to różnych rodzajów fal, takich jak fale dźwiękowe, elektromagnetyczne, sejsmiczne czy mechaniczne. W ogólności, równania te opisują zmiany wartości pewnej wielkości (np. ciśnienia, pola elektrycznego, odkształcenia) w zależności od czasu i położenia w przestrzeni. Równania falowe mają zazwyczaj postać równań różniczkowych drugiego rzędu, które uwzględniają drugie pochodne czasowe i przestrzenne badanej wielkości.

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

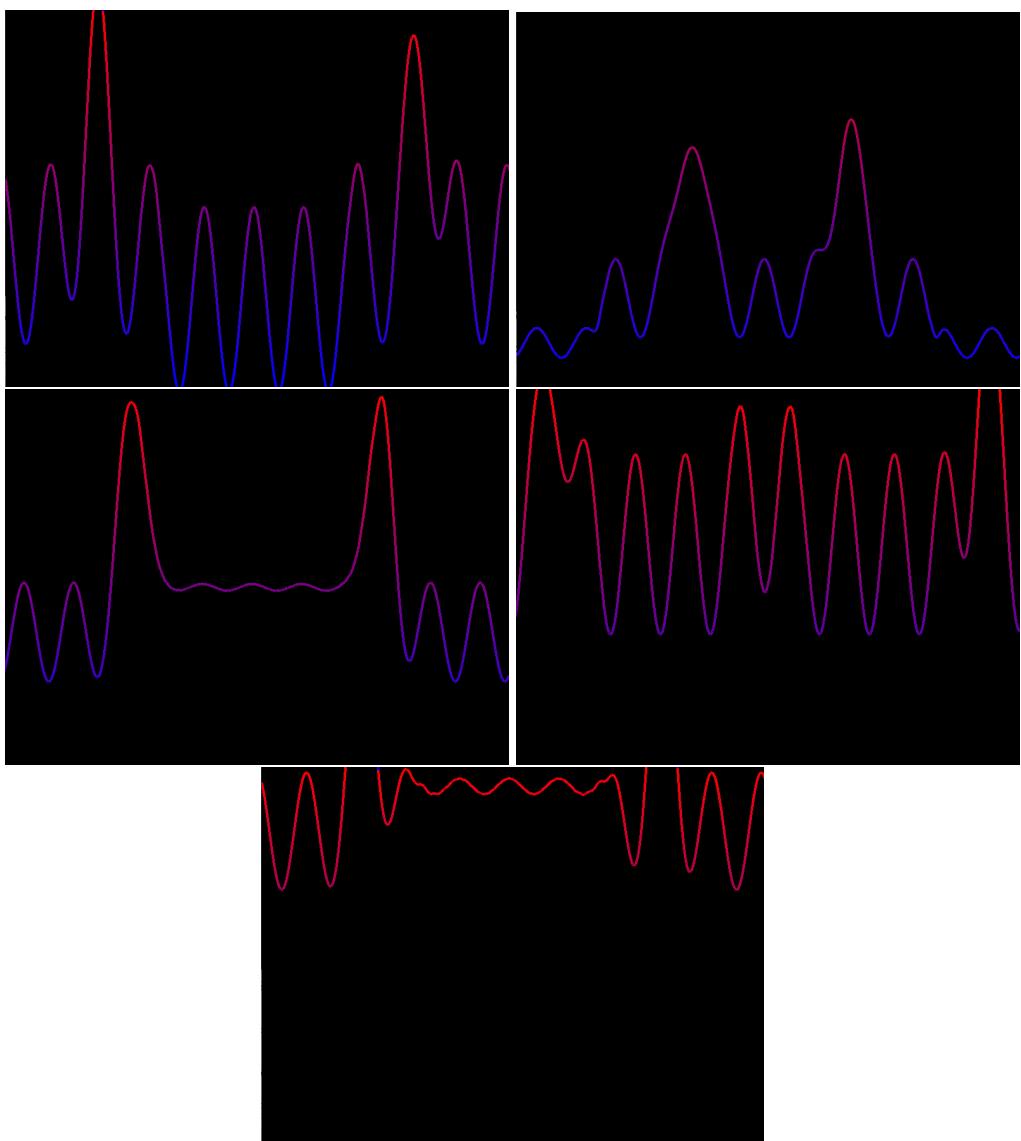
. Rozwiązywanie równań falowych pozwala na określenie kształtu, amplitudy i propagacji fal w danym systemie. Istnieje wiele technik i metod numerycznych do rozwiązywania równań falowych, takich jak metody różnicowe, elementy skończone, metody spektralne czy metody propagacji fal. Dzięki temu można symulować i analizować złożone zjawiska falowe, przewidując ich zachowanie w różnych warunkach i środowiskach.

Celem ćwiczenia jest zbadanie zależność $u(x, t)$ dla wybranych chwil czasowych oraz zmian kształtu rozwiązania w czasie dla wybranych warunków początkowych i brzegowych. Otrzymamy to metodą: $u_j^{n+1} = (\frac{c\Delta t}{h})^2(u_{j+1}^2 - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + 2u_j^n - u_j^{n-1}$. Rozwiążujemy równanie z drugą pochodną czasową, dlatego potrzebne jest rozwiązanie w chwili $t = n - 1$, u_{wcz} oraz w $t = 0$, czyli u_{pop} . W pierwszym przykładzie występuje rozchodzenie się fal gaussowskich, odbijanie się od brzegów symulacji oraz samych siebie.



Rysunek 17: Rozwiązywanie równania falowego dla: $u_{wcz} = u_{pop} = \exp(-(x - x_0) * (x - x_0) / (2.0 * sigma * sigma))$

W tym przykładzie rozwiązanie w chwili $t = 0$ zastąpiono rozwiązaniem w chwili $t = n + 1$, $u_{pop}[i] = u_{wcz}[i] + pr[i] * dt$. Ma postać wcześniejszego rozwiązania z dodanym osobnym profilem w krokach dt , powodując fluktuację całego systemu.



Rysunek 18: Symulacja rozwiązywania równania falowego dodając dodatkowy czynnik do następnego kroku programu.

8 Płaska fala

Fala płaska spolaryzowana w próżni to specyficzny rodzaj fali elektromagnetycznej, w której pole elektryczne drga w jednej płaszczyźnie, nazywanej płaszczyzną polaryzacji.

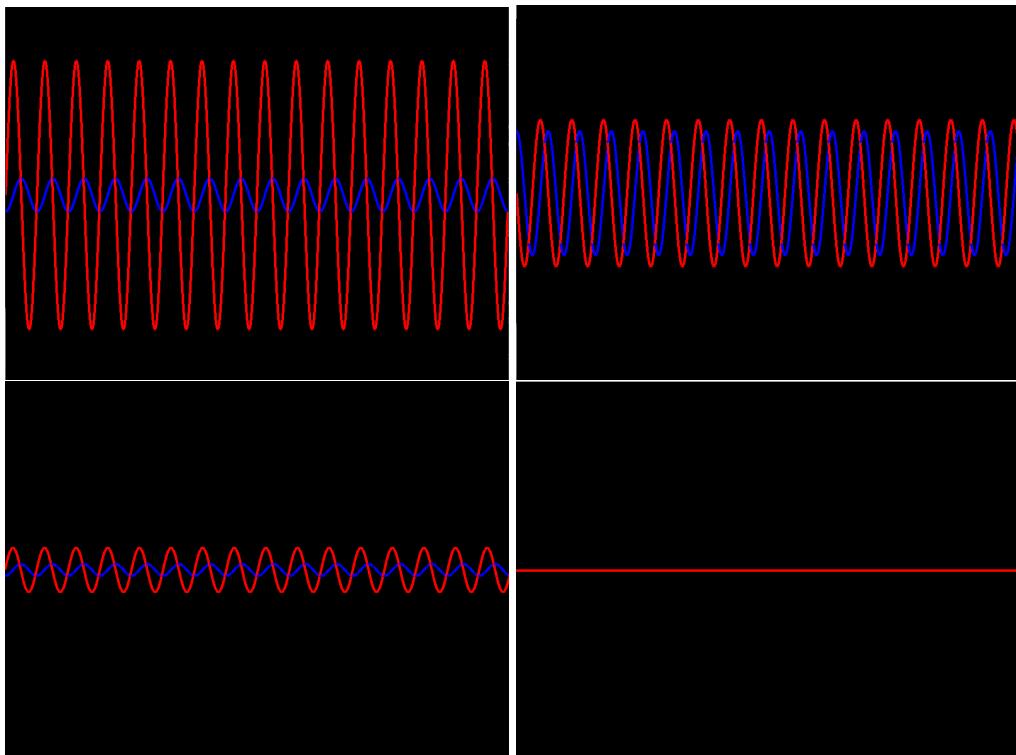
$$\begin{cases} \frac{\partial B}{\partial t} + c \frac{\partial E}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial E}{\partial t} + c \frac{\partial B}{\partial x} = 0 \end{cases}$$

W przypadku fali płaskiej spolaryzowanej w próżni, wektor pola elektrycznego oraz wektor pola magnetycznego są wzajemnie prostopadłe i prostopadłe do kierunku propagacji fali. W zależności od orientacji wektora pola elektrycznego w płaszczyźnie polaryzacji, możemy wyróżnić różne rodzaje polaryzacji, takie jak polaryzacja liniowa, eliptyczna czy kołowa. Rozwiążemy to metodą:

$$\begin{cases} E_j^{n+1} = \frac{1}{2}(E_{j+1}^n + E_{j-1}^n) - \frac{1}{2}(B_{j+1}^n - B_{j-1}^n) \frac{c\Delta t}{h} \\ B_j^{n+1} = \frac{1}{2}(B_{j+1}^n + B_{j-1}^n) - \frac{1}{2}(E_{j+1}^n - E_{j-1}^n) \frac{c\Delta t}{h} \end{cases}$$

Celem ćwiczenia zbadanie zależność $E(x, t)$ i $B(x, t)$ dla wybranych chwil czasowych dla różnych układów równań. Warunki brzegowe są periodyczne, zmieniamy jedynie warunki początkowe, to znaczy układ równań E i B . W pierwszym przypadku nadajemy warunki początkowe:

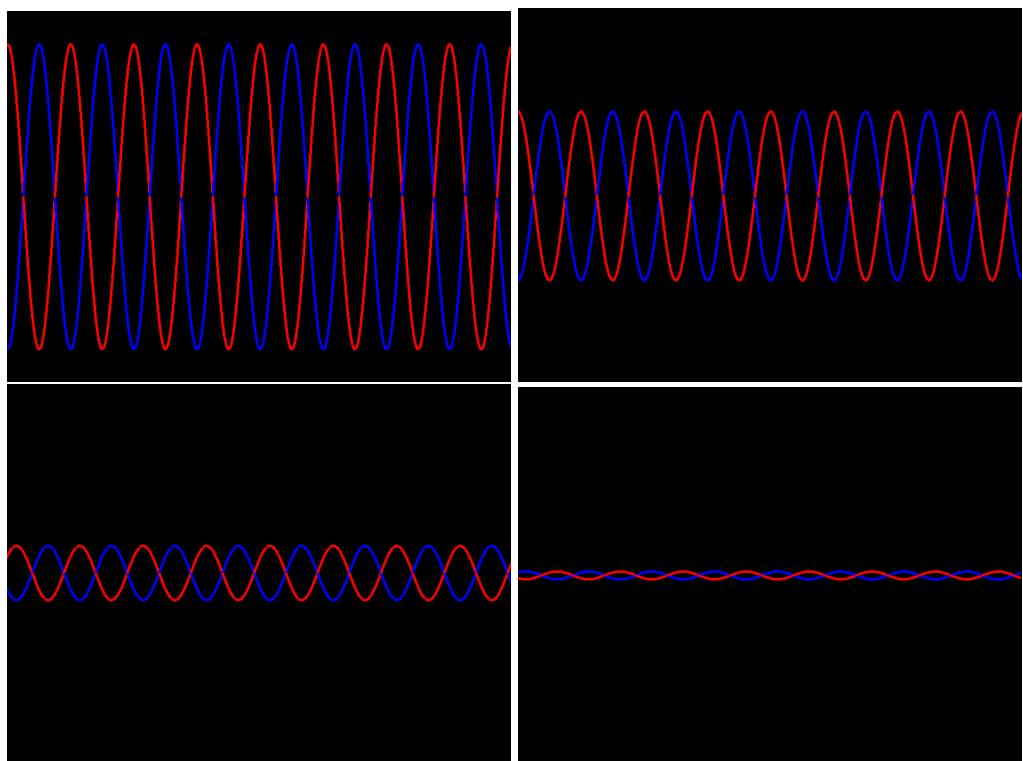
$$\begin{aligned} E[i] &= \cos(4 * M_PI * x); \\ B[i] &= \sin(4 * M_PI * x); \end{aligned}$$



Rysunek 19: Rozwiązanie dla fali sinusoidalnej.

W drugim przypadku nadajemy warunki początkowe:

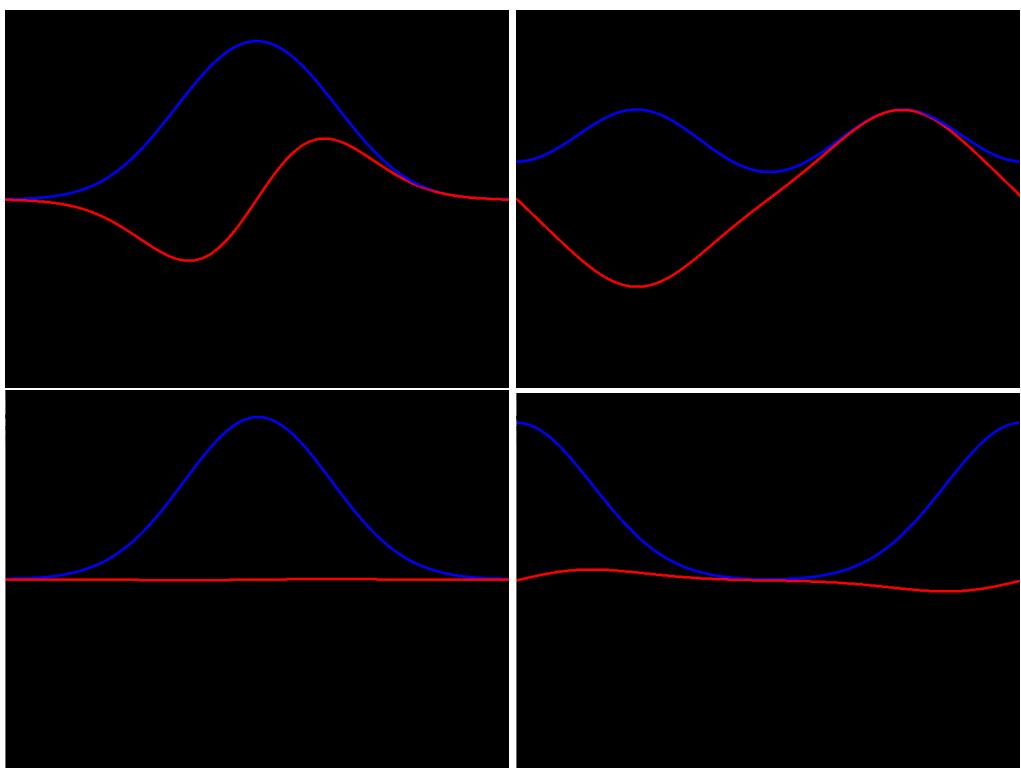
$$\begin{aligned} E[i] &= 1.0 * \sin(2.0 * M_PI * x); \\ B[i] &= 1.0 * \sin(2.0 * M_PI * x + M_PI); \end{aligned}$$



Rysunek 20: Rozwiązań dla fali sinusoidalnej z przesunięciem falowym jednej z nich o π .

W ostatnim przypadku rozpatrujemy rozwiązanie dla warunków początkowych:

$$E[i] = 1.0 * \exp(-(x-x_0) * (x-x_0) / (2 * 1.0)); \\ B[i] = 0.0;$$



Rysunek 21: Rozwiązań dla fali gaussowskiej

9 Cząstka w pudle potencjału

Cząstka w pudle potencjalnym to klasyczne zagadnienie fizyczne, które ma na celu opisanie ruchu cząstki w ograniczonej przestrzeni, w której występuje pewne potencjalne pole. Pudło potencjalne jest zazwyczaj idealizowanym modelem, w którym potencjał jest skończony wewnątrz pewnych granic i nieskończony na zewnątrz. W takim modelu cząstka jest traktowana jako punkt materialny, który może poruszać się wzdłuż jednego wymiaru. Jej zachowanie jest opisane przez równanie ruchu, które wynika z prawa zachowania energii. Cząstka ma pewną energię całkowitą, która jest sumą jej energii kinetycznej i potencjalnej.

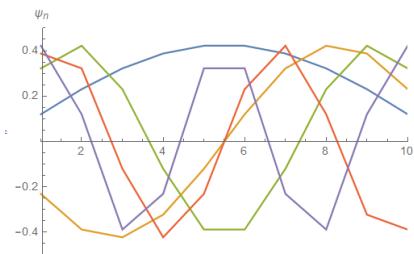
$$E_n = \frac{n^2\pi^2}{2L^2} = \frac{n^2\pi^2}{2(j_{max}\Delta x)^2}$$

Wewnątrz pudła potencjalnego, gdzie potencjał jest skończony, cząstka może poruszać się swobodnie, podlegając zmianom energii kinetycznej, ale jej energia całkowita pozostaje stała. Na granicach pudła potencjalnego występują zazwyczaj warunki brzegowe, które określają, jak cząstka zachowuje się na tych granicach. Może to obejmować odbicia od ścianek pudła lub inne specyficzne warunki, które wpływają na ruch cząstki. Równanie Schrödingera jest używane do kwantowego opisu cząstek w pudle potencjalnym, gdzie funkcja falowa cząstki jest rozwiązaniem tego równania.

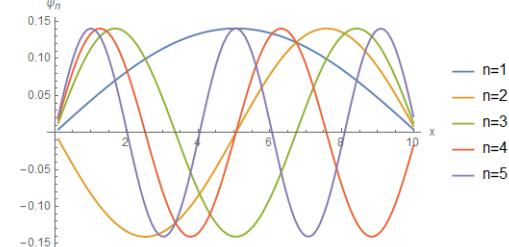
$$-\frac{1}{2}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Celem ćwiczenia jest rozwiązać zagadnienie cząstki w pudle potencjału o długości $L = 10$, dzieląc ten przedział na 10, 100, 1000 części. Przyjmujemy najprostszą dyskretyzację drugiej pochodnej funkcji falowej:

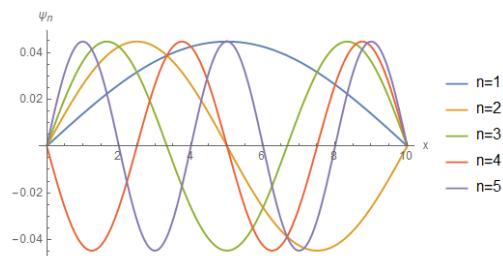
$$\psi''(x) \approx \frac{\psi(x + \Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x - \Delta x)}{\Delta x^2}$$



(a) Przy podziale pudła na 10 części

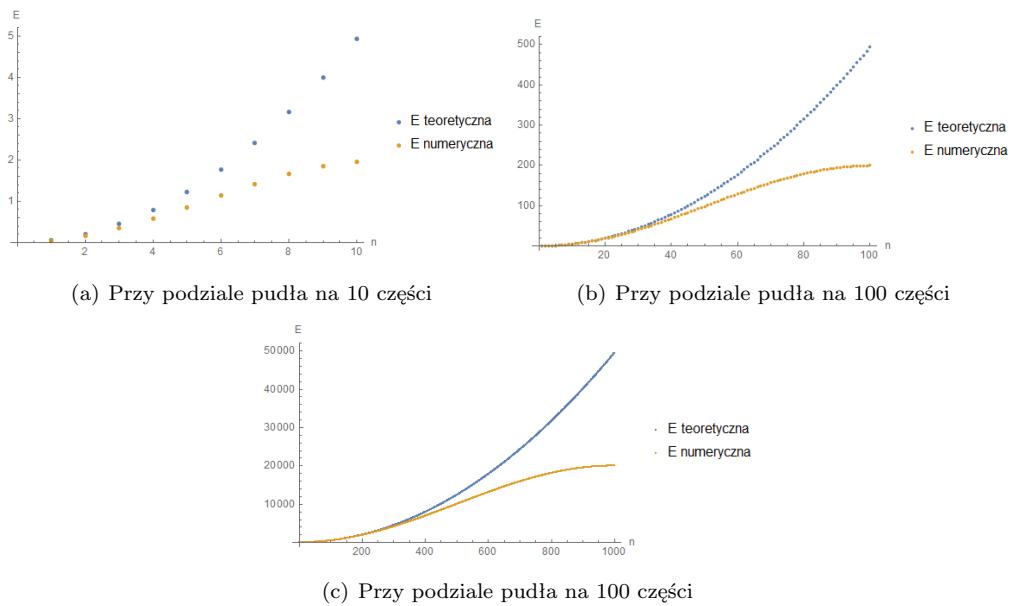


(b) Przy podziale pudła na 100 części

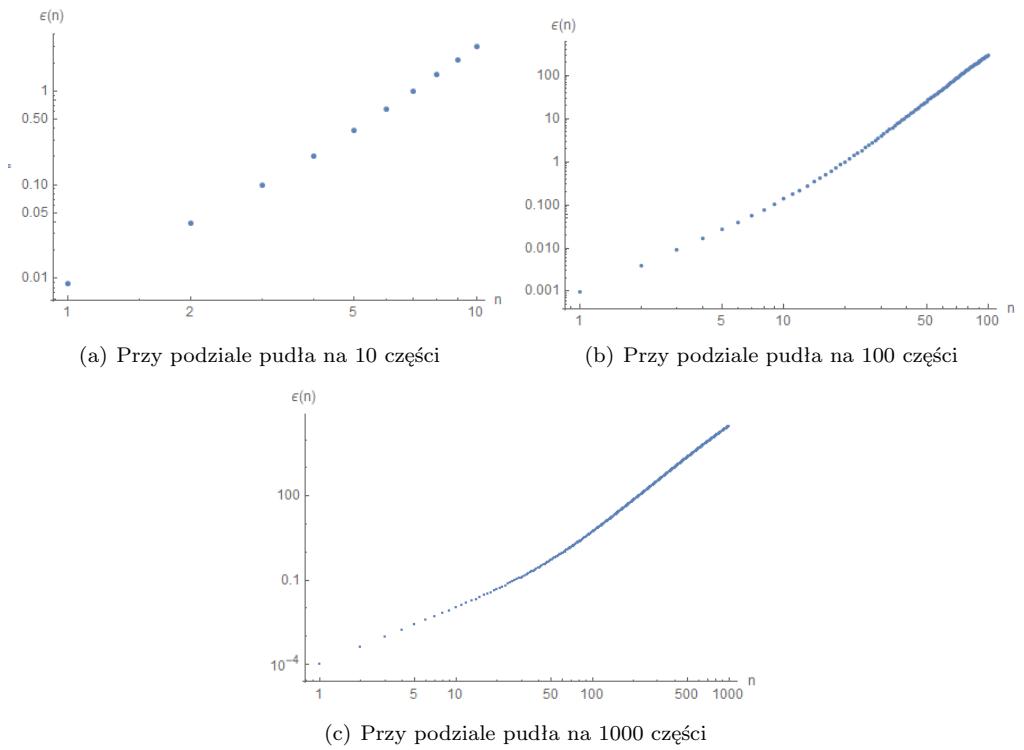


(c) Przy podziale pudła na 1000 części

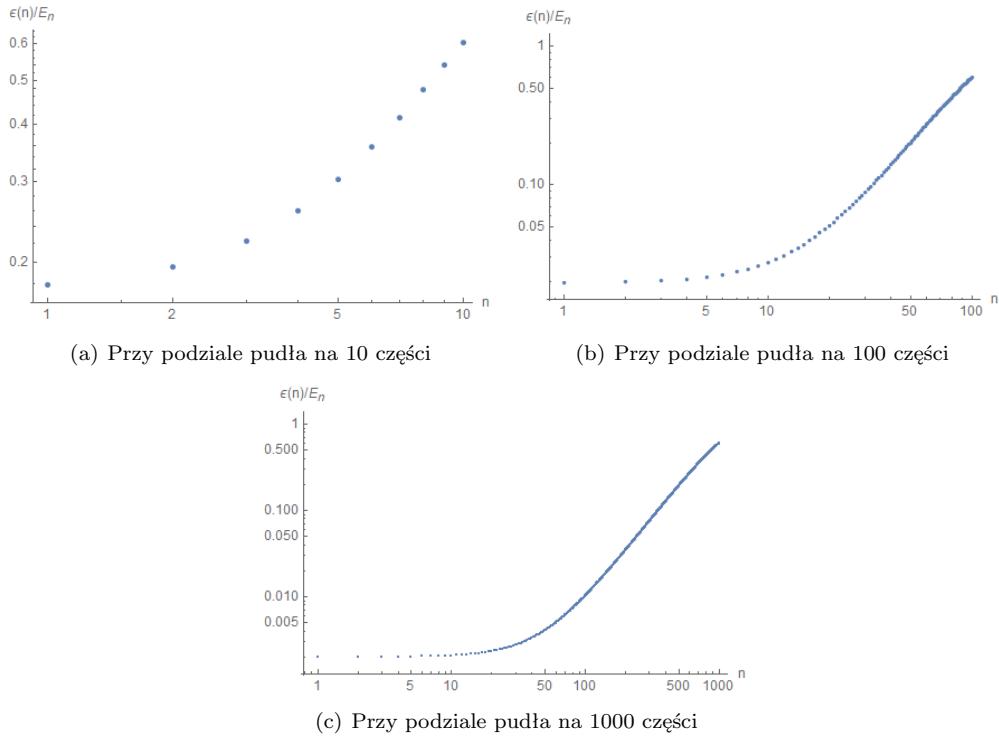
Rysunek 22: Funkcje falowe odpowiadające 5 najmniejszych funkcjom falowym.



Rysunek 23: Wykres wartości energii teoretycznej oraz numerycznej w zależności od numeru stanu n



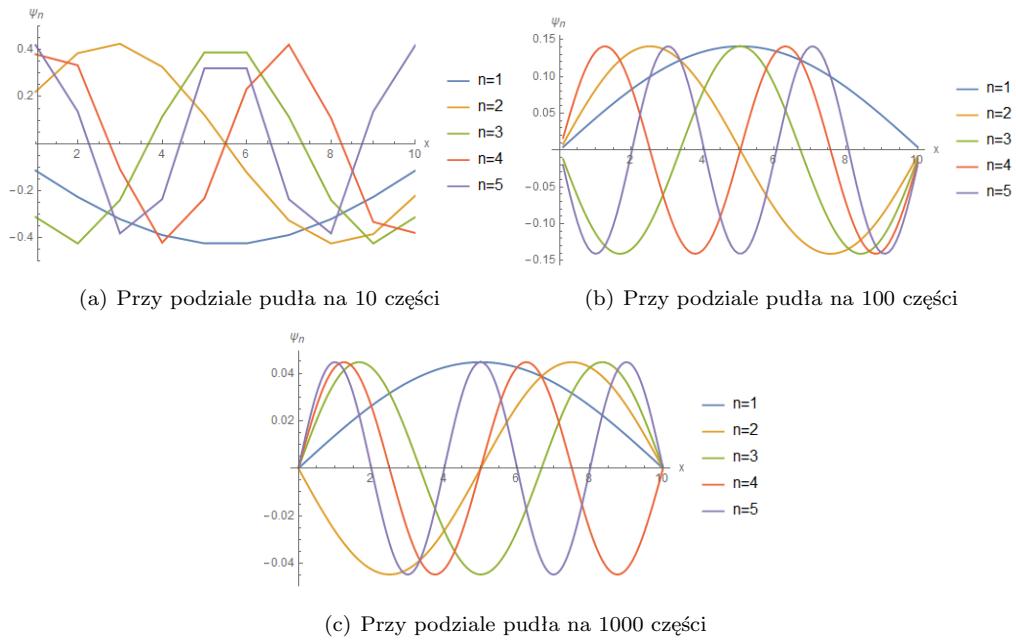
Rysunek 24: Wykres zależności błędu od numeru stanu n



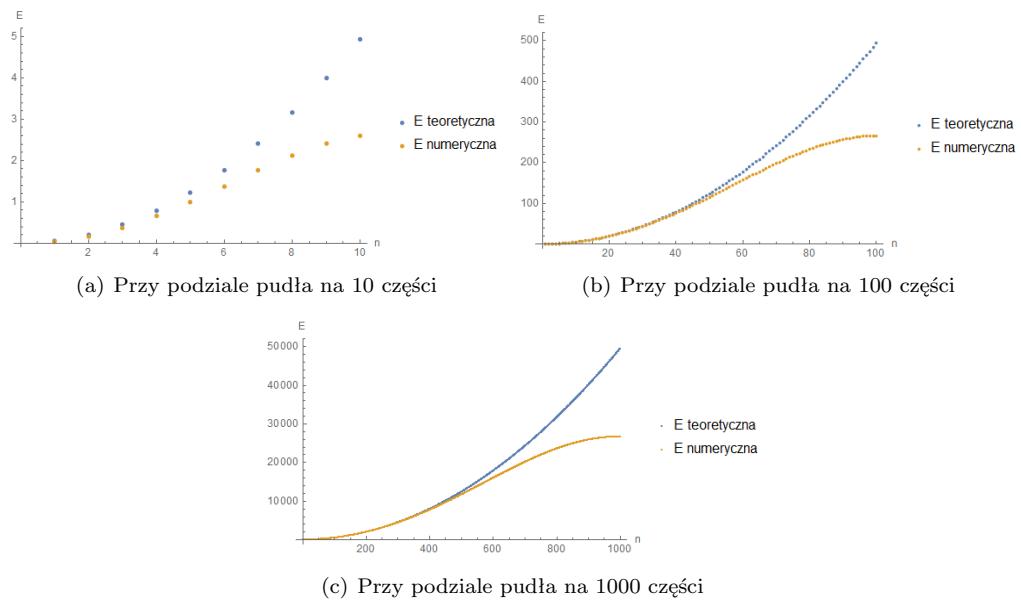
Rysunek 25: Wykres zależności błędu względnego od numeru stanu n

Zmodyfikowano program, aby zastosować inną dyskretyzację:

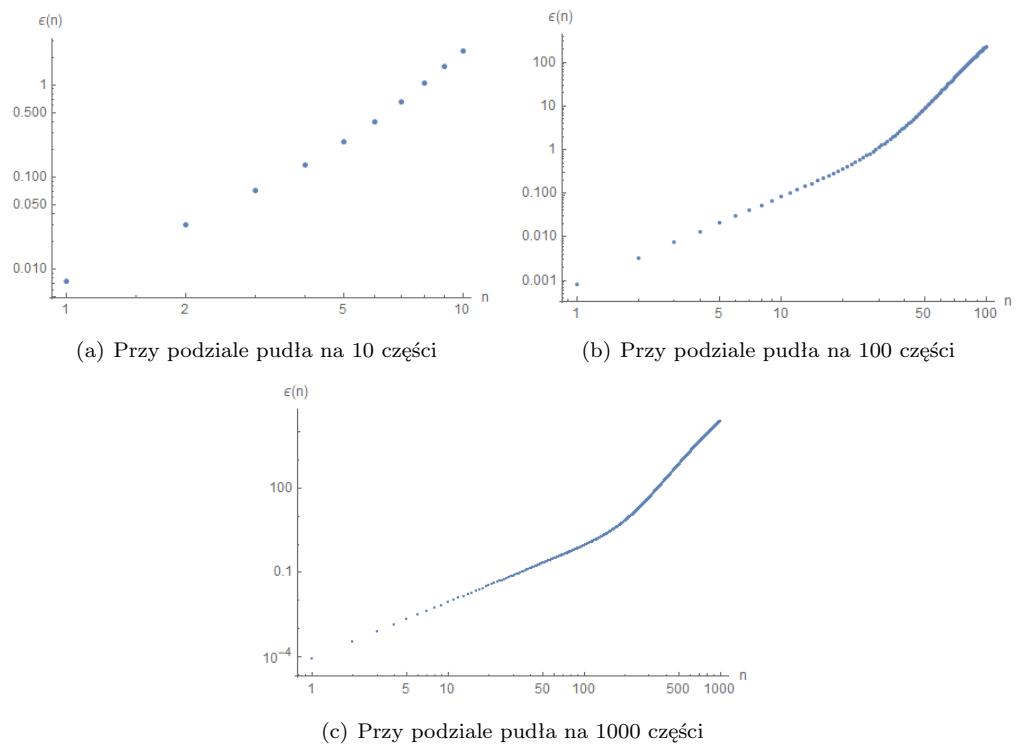
$$\psi''(x) \approx \frac{\psi(x + 2\Delta x) + 16(\psi(x + \Delta x) - 30\psi(x) + 16\psi(x - \Delta x) - \psi(x - 2\Delta x))}{12\Delta x^2}$$



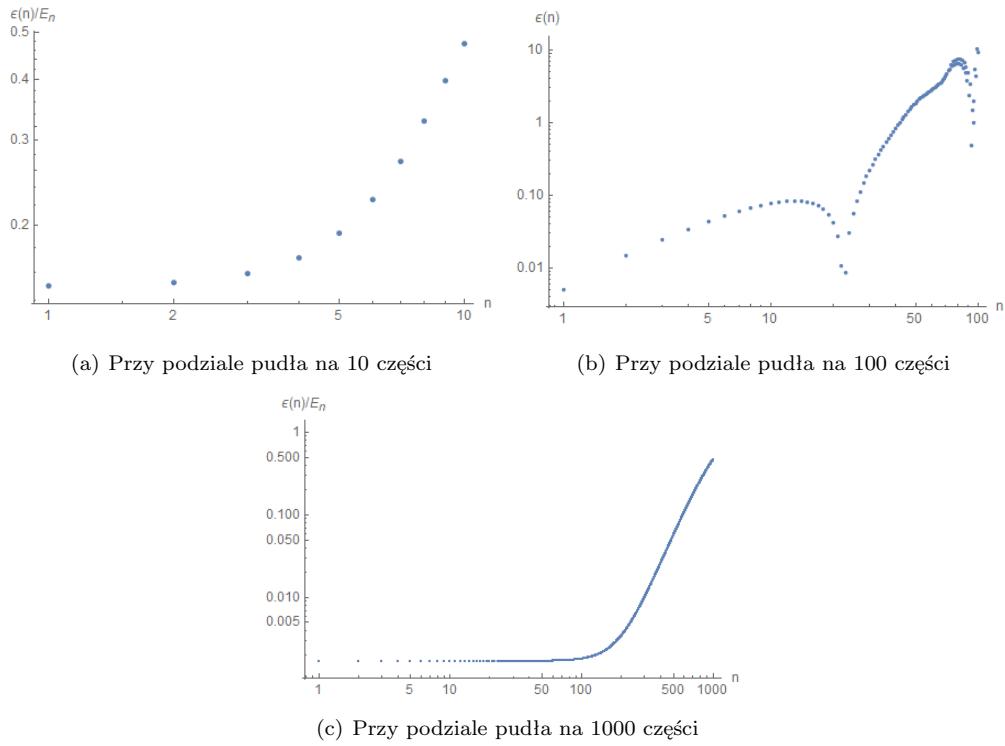
Rysunek 26: Funkcje falowe odpowiadających 5 najmniejszych funkcjami falowymi.



Rysunek 27: Wykres wartości energii teoretycznej oraz numerycznej w zależności od numeru stanu n



Rysunek 28: Wykres zależności błędu od numeru stanu n



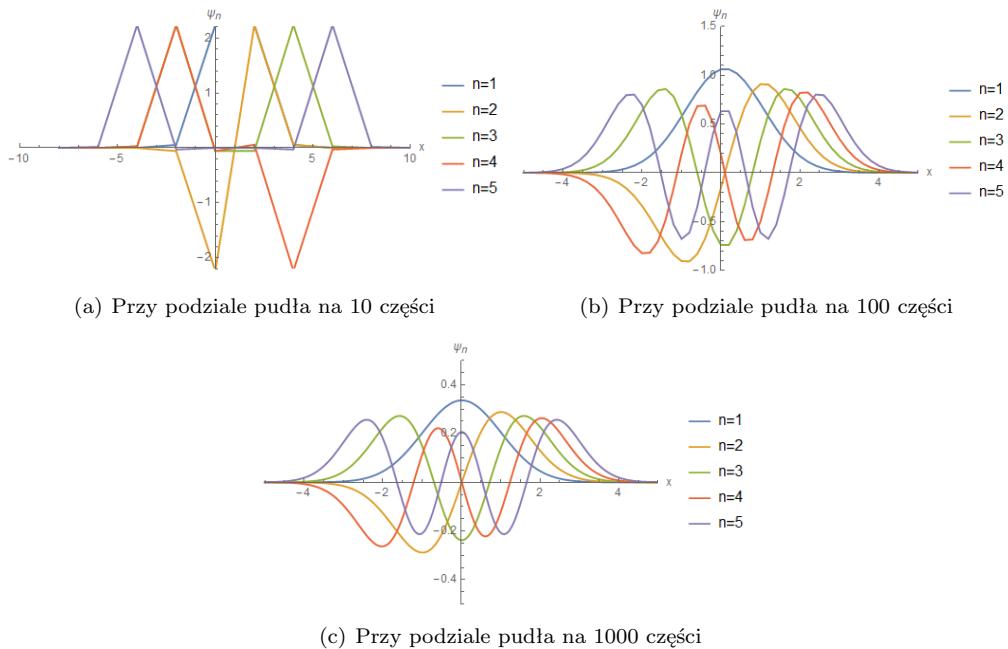
Rysunek 29: Wykres zależności błędu względnego od numeru stanu n

Widzimy, że wartości energii obliczone numerycznie odbiegają od teoretycznych wartościami energii dla danego stanu energetycznego. Możemy zaobserwować, że im wyższy numer stanu energetycznego, tym wyższa energia cząstki. Otrzymane wartości energetyczne są ograniczone do pewnego zakresu, co wynika z faktu, że cząstka jest ograniczona wewnątrz pudła potencjalnego. Na wykresach funkcji każda ma inną liczbę węzłów, a ich kształt jest zależny od numeru stanu energetycznego. Im większy numer stanu energetycznego, tym większa liczba węzłów w funkcji falowej. Analizując wykres błędu, możemy zauważać, że błąd pomiędzy wartościami teoretycznymi a numerycznymi rośnie wraz z rosnącym numerem stanu energetycznego. Dodatkowo lepsza dyskretyzacja ma powodować obniżenie wartości tego błędu, ale nie w drastyczny sposób.

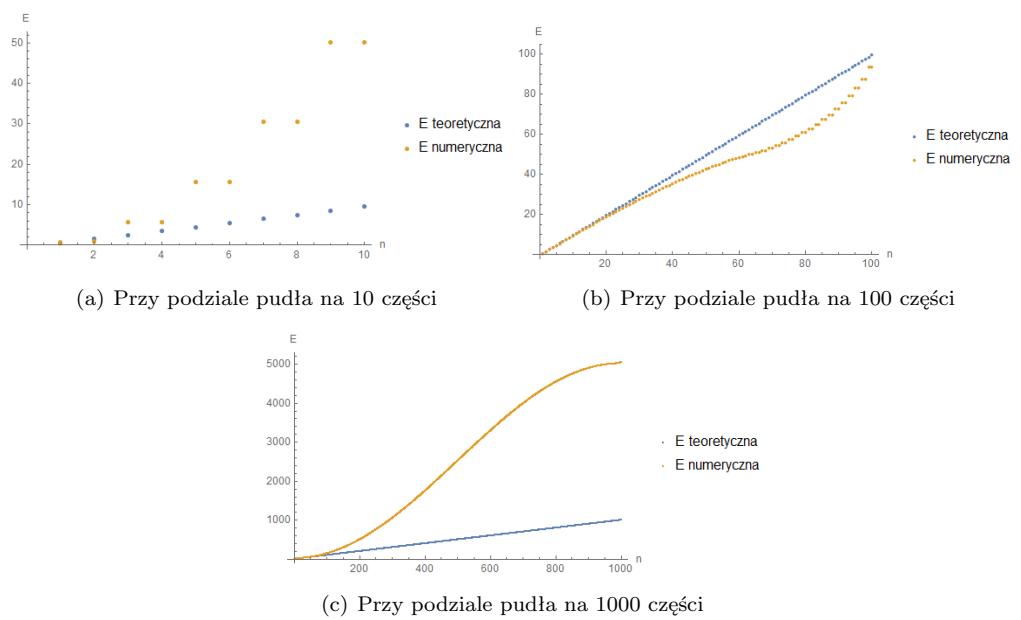
10 Kwantowy oscylator harmoniczny

Oscylator harmoniczny kwantowy to model, który opisuje zachowanie cząstki w potencjale harmonicznym zgodnie z zasadami mechaniki kwantowej. W przeciwieństwie do klasycznego oscylatora harmonicznego, w którym energia cząstki może przyjmować dowolne wartości, oscylator harmoniczny kwantowy ma skwantowaną energię, czyli istnieją tylko określone, dyskretnie poziomy energetyczne. W wyniku rozwiązywania równania Schrödingera dla tego operatora, otrzymuje się dyskretne wartości energii, zwane stanami kwantowymi lub poziomami energetycznymi. Każdy stan kwantowy jest opisany przez funkcję falową, a prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w określonym stanie jest proporcjonalne do kwadratu wartości tej funkcji falowej. Przyjmujemy potencjał harmoniczny: $v(x) = \frac{1}{2}x^2$. Tak jak w poprzednim zagadnieniu zdefiniujemy pewną długość potencjału i dzielimy go na przedziały. Używamy dyskretyzacji funkcji falowej:

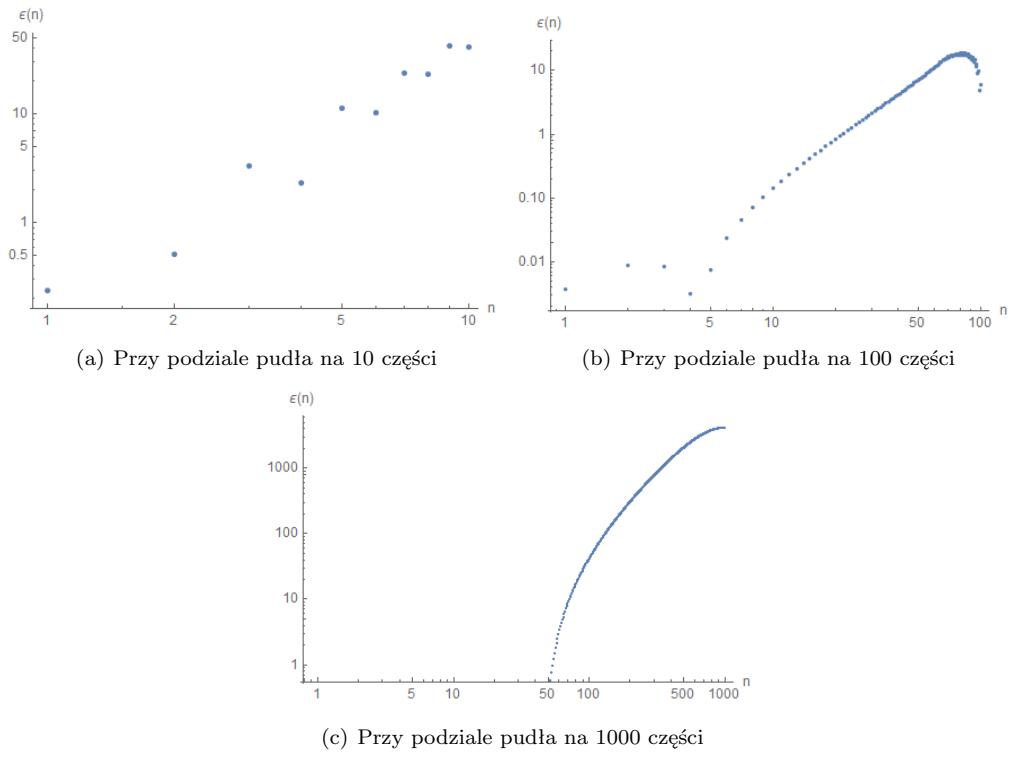
$$\psi''(x) \approx \frac{\psi(x + \Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x - \Delta x)}{\Delta x^2}$$



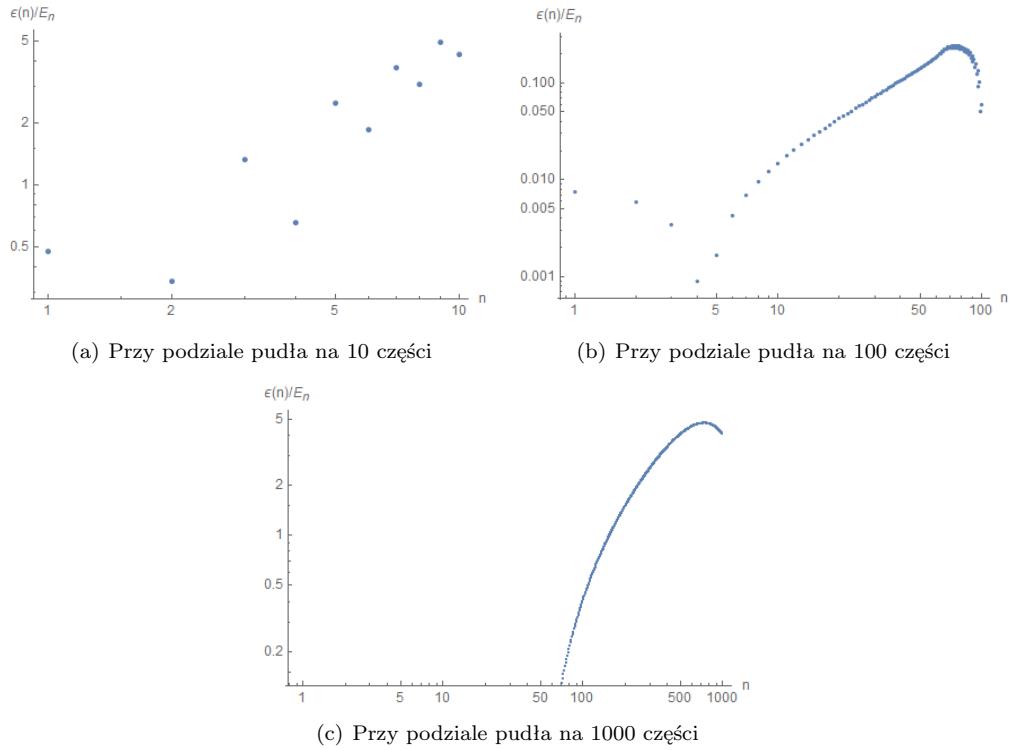
Rysunek 30: Funkcje falowe odpowiadające 5 najmniejszym funkcjom falowym.



Rysunek 31: Wykres wartości energii teoretycznej oraz numerycznej w zależności od numeru stanu n



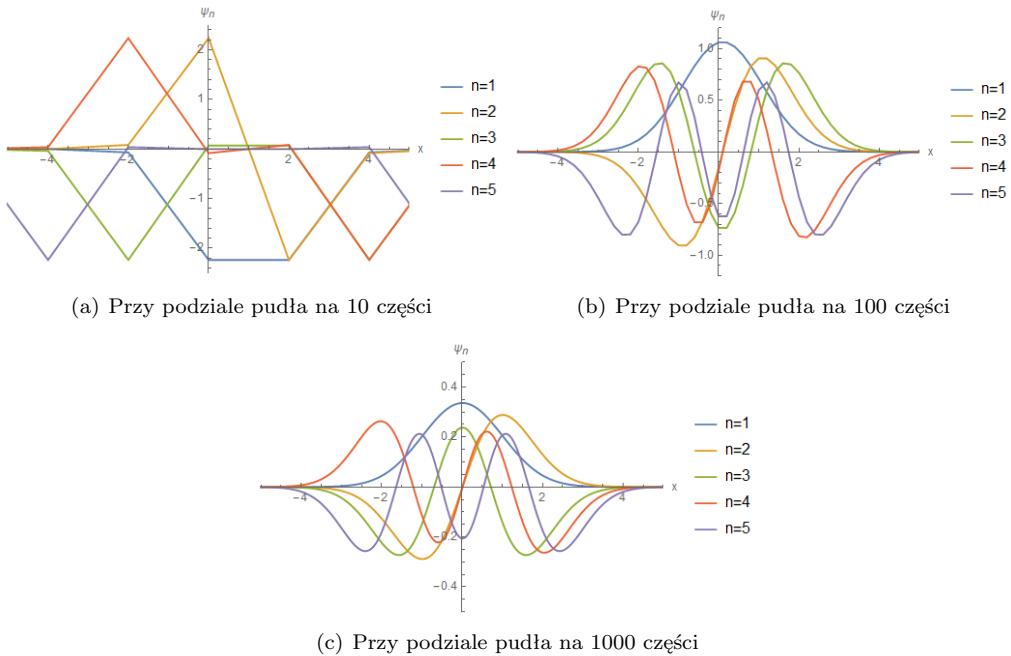
Rysunek 32: Wykres zależności błędu od numeru stanu n



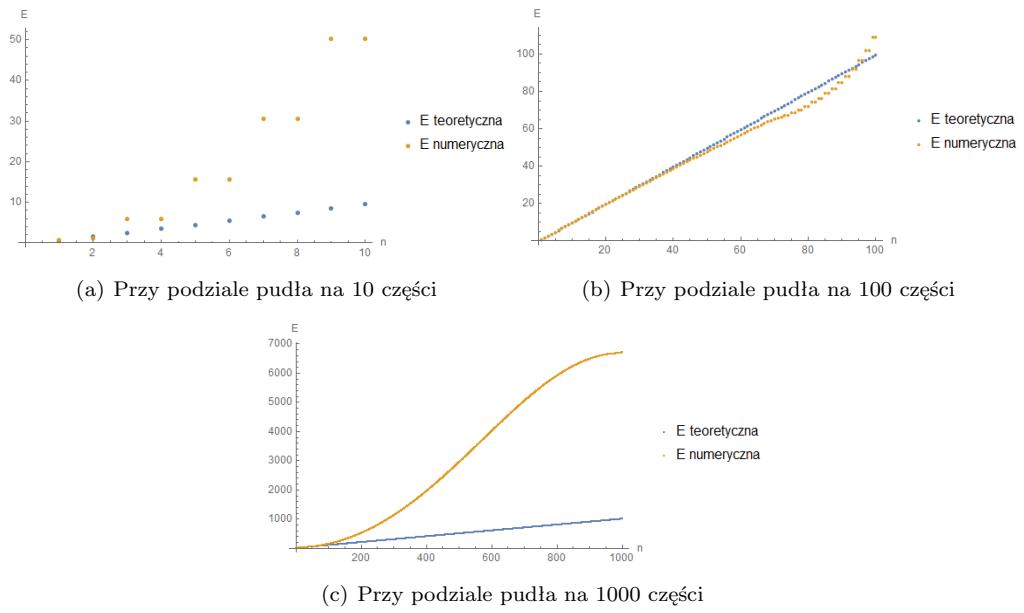
Rysunek 33: Wykres zależności błędu względnego od numeru stanu n

Zmodyfikowano program, aby zastosować inną dyskretyzację:

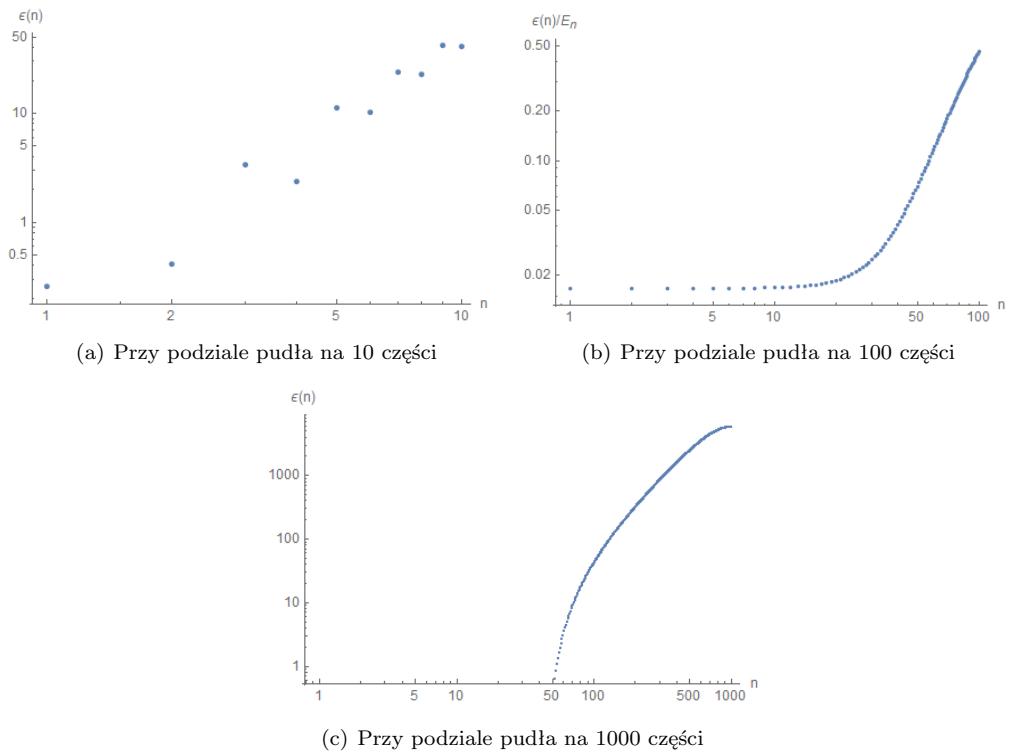
$$\psi''(x) \approx \frac{\psi(x + 2\Delta x) + 16(\psi(x + \Delta x) - 30\psi(x) + 16\psi(x - \Delta x) - \psi(x - 2\Delta x))}{12\Delta x^2}$$



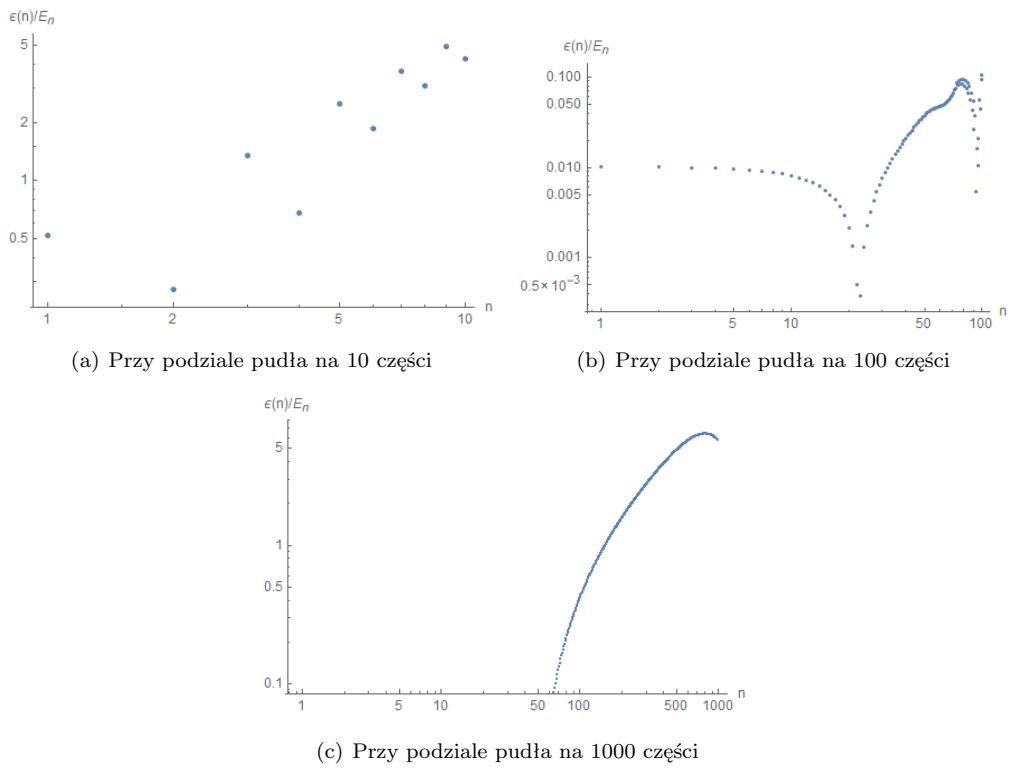
Rysunek 34: Funkcje falowe odpowiadających 5 najmniejszych funkcjom falowym.



Rysunek 35: Wykres wartości energii teoretycznej oraz numerycznej w zależności od numeru stanu n



Rysunek 36: Wykres zależności błędu od numeru stanu n



Rysunek 37: Wykres zależności błędu względnego od numeru stanu n

Podobnie jak w poprzednim zagadnieniu wartości energii odbiegają od wartości teoretycznych, błąd wzrasta wraz z ilością kroków oraz lepsza dyskretyzacja zapewnia dokładniejsze wyniki.

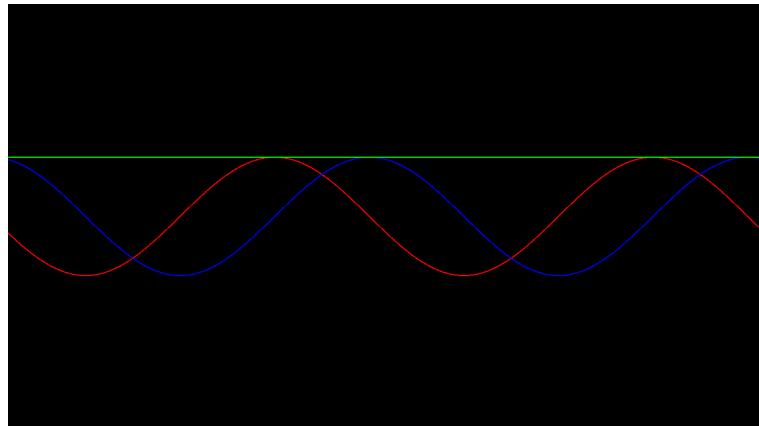
11 Ewolucja funkcji falowych

Celem ćwiczenia jest zbadanie ewolucji funkcji falowych wybranych rozwiązań za pomocą algorytmu:

$$\psi_a^{n+1} = \psi_a^n + \frac{i\hbar\Delta t}{m} \left(\frac{\psi_{a+1}^n - 2\psi_a^n + \psi_{a-1}^n}{\Delta x^2} - \frac{2mV(a)}{\hbar^2} \psi_a^n \right)$$

. Warunkami początkowymi są:

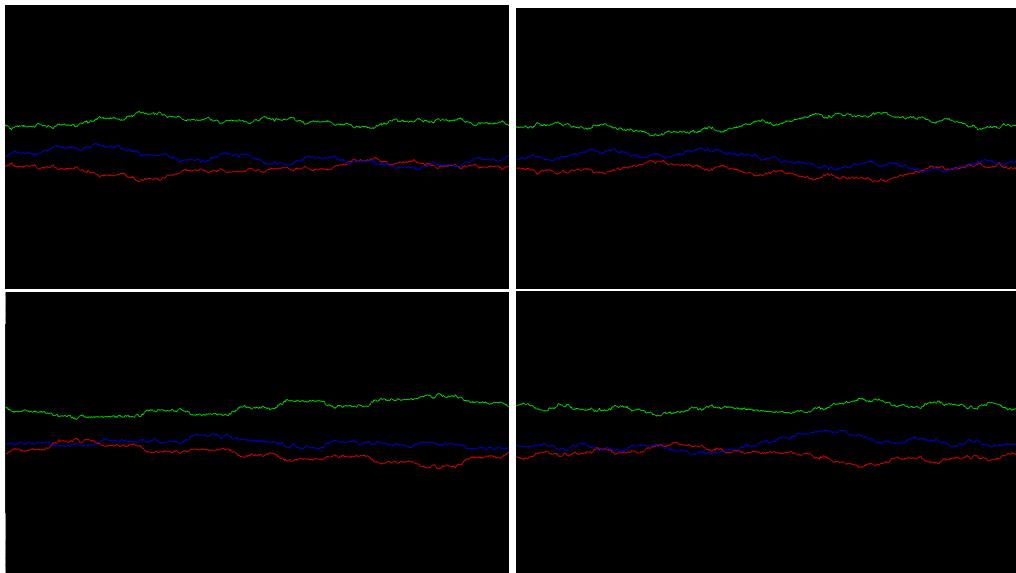
```
psireal_m1 [ i ]=1.0*cos ( 4.0*M_PI*x ) ;
psiimag_m1 [ i ]=1.0*sin ( 4.0*M_PI*x ) ;
```



Rysunek 38: Caption

Następnie zbadano ewolucję fal gaussowskich:

```
double gaussian = exp(-m*omega*x*x/(2*hbar))/sqrt(sqrt(M_PI*hbar/(m * omega)));
psireal_m1 [ i ] = gaussian*cos(omega*x);
psiimag_m1 [ i ] = gaussian*sin(omega*x);
```



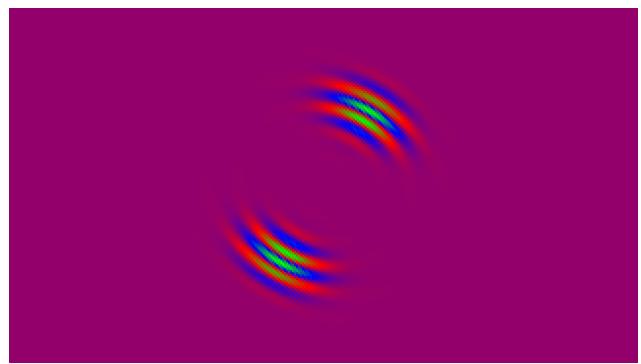
Rysunek 39: Próba symulowania ewolucji fal gaussowskich

12 Bilard kwantowy

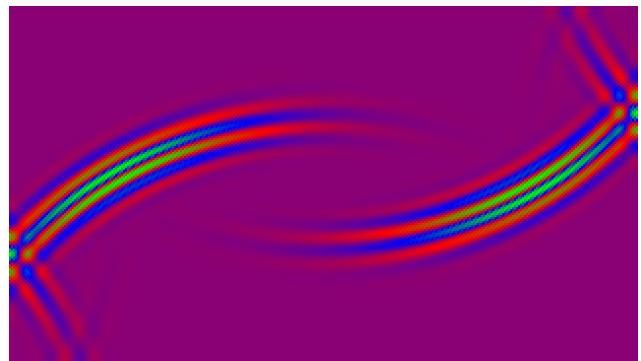
Bilard kwantowy jest teoretycznym modelem fizycznym, który bada ruch cząstek w środowisku odbijających się granicach. Jest to analogia do tradycyjnego bilardu, w którym kulki poruszają się na stole i odbijają od ścianek. Jednak w bilardzie kwantowym, zamiast kul, używane są cząstki kwantowe, takie jak elektrony lub fotony, a stołem jest przestrzeń o określonych granicach. W bilardzie kwantowym, ruch cząstek jest opisywany przez równanie Schrödingera, które jest podstawowym równaniem mechaniki kwantowej. Cząstki kwantowe mogą istnieć w stanach superpozycji, co oznacza, że mogą znajdować się w różnych miejscach jednocześnie. Kiedy cząstka uderza w granicę bilardu kwantowego, zachodzi zjawisko odbicia kwantowego, które jest opisane przez prawdopodobieństwo przeniknięcia cząstki przez granicę. Zachowanie funkcji falowej symulowano przy pomocy automatu komórkowego:

$$\psi_C(t + \Delta t) = \frac{1}{2}[\psi_N(t) + \psi_S(t) + \psi_E(t) + \psi_W(t) - w\psi_C(t)]$$

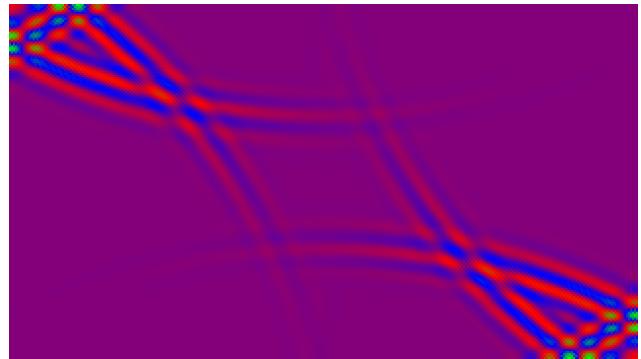
Rozwiążanie w węźle (indeks C - centrum) w kolejnej chwili czasowej zależy od rozwiązania w tym samym węźle w chwili t oraz rozwiązań u czterech sąsiadów (północ N, południe S, wschód E i zachód W) w chwili t .



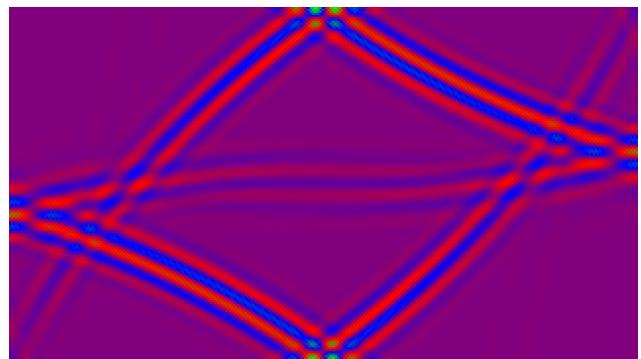
(a) $t = 0s$



(b) $t = 15s$

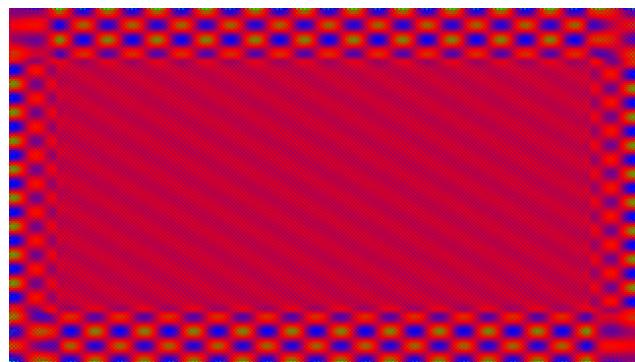


(c) $t = 30s$

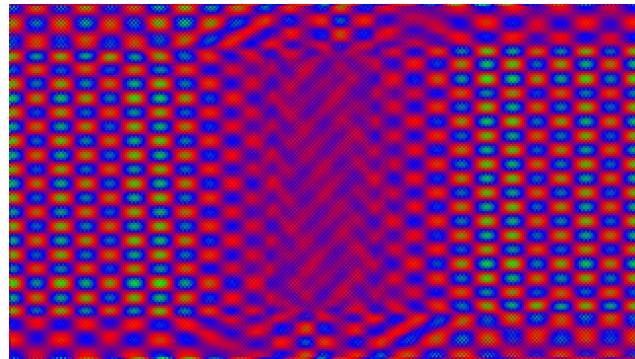


(d) $t = 45s$

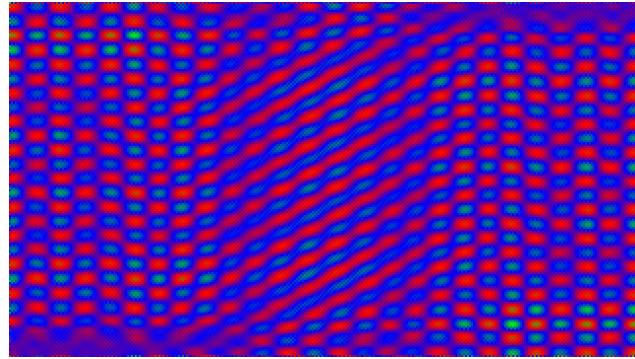
Rysunek 40: Dla rozwiązań początkowego: $\psi(x, y) = \exp(-5.0 * (x * x + y * y)) * \cos(2.0 * M_P I * 2.0 * (u * x - y * \sqrt{1.0 - u * u}))$



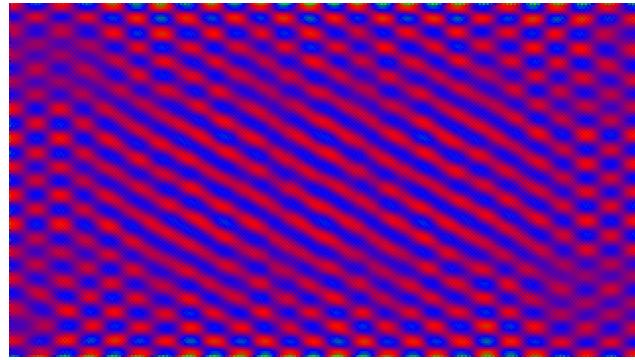
(a) $t = 0s$



(b) $t = 15s$

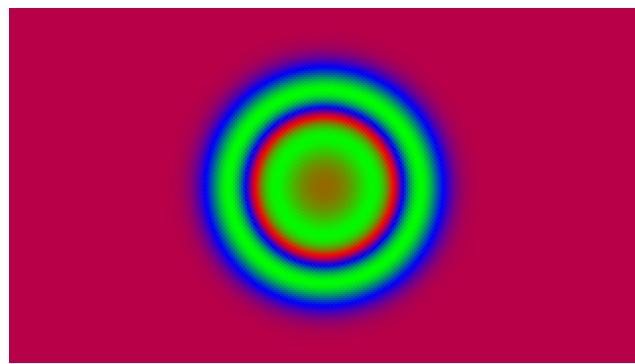


(c) $t = 30s$

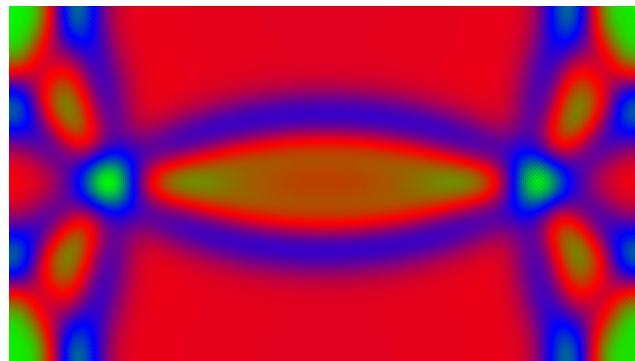


(d) $t = 45s$

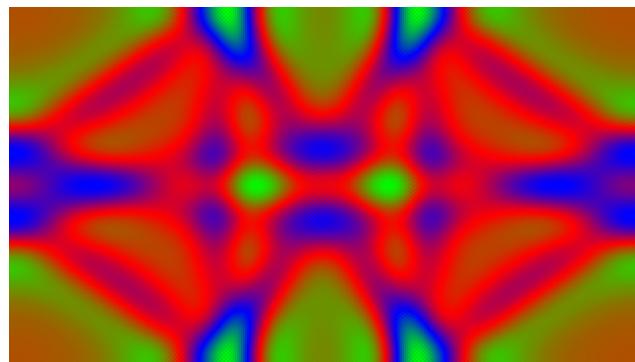
Rysunek 41: Dla rozwiązań początkowego: $\psi(x, y) = \exp(-0.0 * (x * x + y * y)) * \cos(2.0 * M_P I * 2.0 * (u * x - y * \sqrt{1.0 - u * u}))$



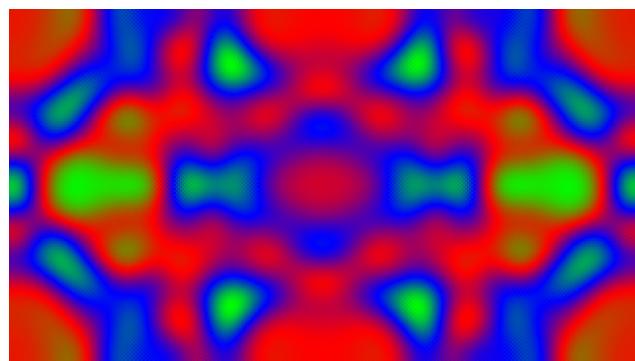
(a) $t = 0s$



(b) $t = 15s$



(c) $t = 30s$



(d) $t = 45s$

Rysunek 42: Dla rozwiązań początkowego: $\psi(x, y) = \exp(-3.0 * (x * x + y * y)) * \cos(2.0 * M_P I * 0.0 * (u * x - y * \sqrt{1.0 - u * u}))$