

Elementy Modelowania Komputerowego w Fizyce

od praktyki do umiejętności i wiedzy

Paweł Scharoch
Maciej P. Polak
Radosław Szymon



Wrocław University of Science and Technology

...not to be published

*Niniejszy podręcznik powstał w opraciu o wiele lat doświadczeń
w prowadzeniu kursu "Metody Obliczeniowe Fizyki" na Wydziale
Podstawowych Problemów Techniki Politechniki Wrocławskiej.*

Paweł Scharoch

...not to be published

CONTENTS

WSTĘP	1
PIERWSZE KROKI	5
Podstawowe operacje matematyczne	5
0.1 Znajdowanie miejsca zerowego funkcji 1D	5
0.1.1 Metoda Bisekcji	5
0.1.2 Metoda Siecznych oraz Newton-Rhapson	6
0.2 Znajdowanie minimum (maksimum) funkcji 1D	6
0.2.1 Metoda Złotego Podziału	6
0.2.2 Inne metody	7
Ćwiczenia	9
1 PROJEKT: PROSTOKĄTNA STUDNIA KWANTOWA - STACJO-	
NARNE RÓWNANIE SCHRÖDINGERA W JEDNYM WYMIARZE	11
1.1 METODA	11
1.2 Ćwiczenia	13
2 PROJEKT: DYFRAKCJA ŚWIATŁA NA SZCZELINIE	15
2.1 PROBLEM FIZYCZNY: interferencja i dyfrakcja	15
2.2 METODY NUMERYCZNE: pochodne i kwadratury	16
2.2.1 Pochodne: schematy 2, 3 i 5-punktowy	17
2.2.2 Kwadratura: metoda prostokątów, trapezów oraz par-	
bol (Simpsona)	18
2.3 Ćwiczenia	19
3 PROJEKT: WAHADŁO JAKO WZORZEC JEDNOSTKI CZASU	23
3.1 PROBLEM FIZYCZNY: wahadło matematyczne	23
3.2 METODY NUMERYCZNE: Zagadnienie wartości początkowej dla	
równań różniczkowych zwyczajnych (ODE - <i>Ordinary Diffe-</i>	
<i>rential Equations</i>	24
3.2.1 Metoda Rungego-Kutty	26
3.3 Ćwiczenia	26
4 PROJEKT: UKŁAD PLANETARNY	29
4.1 PROBLEM FIZYCZNY: Ruch planet	29
4.2 REDUKCJA RUCHU POJEDYNCZEJ PLANETY Z POLU CENTRALNYM	
DO JEDNEGO WYMIARU	30
4.3 METODY NUMERYCZNE: algorytm Verleta	32
4.4 Ćwiczenia	33
5 PROJEKT: GRAWITACJA WENĄTRZ GWIAZDY	37

5.1	PROBLEM FIZYCZNY: Pole grawitacyjne od ciągłego rozkładu gęstości masy	38
5.2	METODY NUMERYCZNE: zagadnienie wartości brzegowych dla równań różniczkowych zwyczajnych	40
5.2.1	Algorytm Numerova-Cowellsa	40
5.3	Ćwiczenia	41
6	PROJEKT: MODY NORMALNE W FAŁOWODZIE CYLINDRYCZNYM	43
6.1	PROBLEM FIZYCZNY: fala stojąca	43
6.2	METODY NUMERYCZNE: zagadnienie własne	45
6.2.1	Metoda strzałów	45
6.3	Ćwiczenia	46
7	PROJEKT: WŁAŚCIWOŚCI ŚCIANY JAKO IZOLATORA TERMICZNEGO	49
7.1	PROBLEM FIZYCZNY: dyfuzja stacjonarna	49
7.2	METODY NUMERYCZNE: metoda różnic skończonych	51
7.3	Ćwiczenia	54
8	PROJEKT: KONDENSATOR CYLINDRYCZNY	57
8.1	Zasada wariacyjna dla układu elektrostatycznego	58
8.2	METODY NUMERYCZNE: Metoda elementów skończonych (FE)	59
8.3	Ćwiczenia	61

WSTĘP

Modelowanie numeryczne to relatywnie nowe i potężne narzędzie badawcze. Jego spektakularny rozwój można było obserwować przez ostatnie półwiecze, jako konsekwencję rozwoju technologii komputerowych. Obecnie nie ma dziedziny nauki czy inżynierii, gdzie modelowanie numeryczne nie odgrywałoby trudnej do przecenienia roli. Lista korzyści jest długa. Otwierają się nowe możliwości, jak zdolność "przewidywania" właściwości układów, badanie właściwości niedostępnych bezpośrednio eksperymentalnie, uzyskiwanie danych ilościowych wymagających ogromnej liczby operacji matematycznych lub obróbki wielkich zbiorów danych ('Big Data'), uczenie maszynowe ('Machine Learning'), etc. Tym niezwykłym możliwościom towarzyszy łatwość w stosowaniu, duża szybkość uzyskiwania wyników oraz relatywnie niskie koszty. Dzisiaj badania obliczeniowe dzięki wymienionym wyżej cechom tworzą niezależne narzędzie badawcze (obok zawsze najważniejszego eksperymentu oraz teorii), które z jednej strony jest rozszerzeniem narzędzi teoretycznych, ale z drugiej tworzy nową metodykę, która często przypomina raczej eksperyment niż teorię (eksperymentowanie na układach wirtualnych). Narzędzie to staje się nieocenionym wsparciem dla badań doświadczalnych, technologii, a także dla fizyki teoretycznej, gdzie modelowanie matematyczne często na ostatnim etapie wymaga złożonych obliczeń prowadzących do wyników ilościowych.

W świetle tych uwag staje się rzeczą oczywistą, że różne aspekty modelowania numerycznego muszą być ważnym elementem wykształcenia, szczególnie w jednostkach ukierunkowanych na nauki ścisłe i inżynierię. Rzeczywiście tego rodzaju kursy oferowane są od wielu lat na uczelniach na całym świecie, nawet w formie niezależnych specjalności (np. Informatyka Stosowana, Big Data) i koncentrują się one na różnych aspektach zastosowań komputerów w nauce i technice, w szczególności na modelowaniu numerycznym. Niniejszy podręcznik jest odpowiedzią na potrzeby w tym ostatnim aspekcie, czyli poświęcony jest modelowaniu komputerowemu. Jego konstrukcja opiera się na idei podejścia problemowego w kształceniu tak, jak sugeruje to już tytuł podręcznika: "Modelowanie Komputerowe w Fizyce, od praktyki do umiejętności i wiedzy". Oznacza to, że nie jest to systematyczny kurs metod numerycznych, lecz pewien zbiór projektów-problemów, a metody numeryczne pojawiają się jako narzędzie ich rozwiązania. W ten sposób poznawanie tych metod staje się funkcją celu, jakim jest rozwiązanie konkretnego problemu, co stanowi czynnik motywujący. Każdy projekt

Contents

rozpoczyna się prezentacją i dyskusją konkretnego zagadnienia, dalej wprowadzany jest odpowiedni aparat matematyczny i w końcu omawiane są metody numeryczne, i algorytmy oraz proponowany jest program komputerowy. Wartością dodaną jest tu nauka fizyki, gdyż projekty obejmują wiele jej obszarów. Pomysły na niektóre projekty zostały zaczerpnięte z podręcznika S.Koonin [?].

Metody numeryczne omawiane w tym podręczniku obejmują podstawowe operacje matematyczne (znajdowanie miejsca zerowego oraz ekstremum funkcji), pochodne i kwadratura funkcji, równania różniczkowe zwyczajne i cząstkowe: zagadnienie wartości początkowej, zagadnienie wartości brzegowych, zagadnienie własne. Większość wprowadzanych metod opiera się na dyskretyzacji zmiennych niezależnych. Wybrane problemy fizyczne są stosunkowo proste, tak aby były możliwe do samodzielnego zaprogramowania i przeanalizowania w czasie 1-2-godzinnych sesji w pracowni komputerowej. Z tego powodu podstawowe projekty poświęcone równaniom różniczkowym cząstkowym ilustrowane są przez układy jednowymiarowe.



(a) Lista oprogramowań stosowanych w chemii kwantowej



(b) Link 2 (kody)



(c) Link 3 (Koonin?)

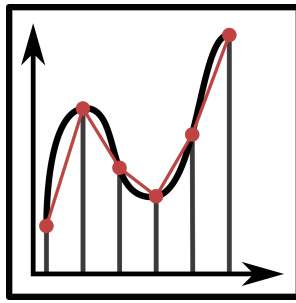
Głównym celem kursu jest nauka metod numerycznych, nie zaś konkretnego języka programowania, dlatego algorytmy mogą być implementowane w różnych językach, jak FORTRAN, C, PYTHON, etc. i podstawowe wersje kodów do projektów w tych językach zostały umieszczone na stronie www. Jednakże preferowanym na zajęciach językiem jest FORTRAN77 z kilku powodów. Jest to język zaprojektowany specjalnie do obliczeń numerycznych ('FORMuła TRANslator'), istnieje wiele przetestowanych i stabilnych bibliotek procedur numerycznych, język ten (w podstawowych i nowoczesnych wersjach, np. FORTRAN95) jest ciągle używany do tworzenia kodów z zakresu fizyki i chemii kwantowej (patrz *Link 1*) i wreszcie w wersji FORTRAN77 jest on bardzo prosty do przyswojenia i zastosowania podczas pierwszych zajęć praktycznych.

Wszystkie programy omawiane w tej książce, w wersji podstawowej, znajdują się na stronie internetowej: www...., dla projektów podstawowych w wer-

sjach FORTRAN77, Python i C++, a dla projektów zaawansowanych w FORTRAN77. Programy nie są optymalizowane ze względu na czas obliczeń, by zachować przejrzystość implementacji algorytmów i umożliwić łatwe ich zrozumienie. Wykorzystywane są tylko podstawowe operacje programistyczne: podstawienie, pętla, instrukcje warunkowe, tablice, podprogramy i funkcje (wraz z podstawowymi metodami współdzielenia danych). Taka konstrukcja programów ułatwia również przeniesienie ich do innych środowisk programistycznych. Praca z programami obejmuje ich testowanie, opcjonalnie rozbudowę oraz, co jest głównym celem, analizę układów fizycznych, ze szczególnym zwróceniem uwagi na ograniczenia związane z cyfrową naturą narzędzia badawczego.

Materiał jest zorganizowany w następujący sposób. Każdy rozdział zaczyna się od streszczenia, po którym następuje omówienie układu fizycznego wraz z teoretycznymi podstawami (w razie potrzeby konieczna wiedza powinna być pogłębiona w oparciu o zewnętrzne źródła). Następnie omawiane są metody numeryczne do rozwiązania zagadnień matematycznych oraz odpowiednie algorytmy. Prezentowane są pełne wyprowadzenia algorytmów, ponieważ ich świadome wykorzystanie jest kluczowe do późniejszej analizy wyników często obciążonych niefizycznymi cechami związanymi z cyfrowym charakterem analizy problemu. Rekomendowane jest pogłębianie wiedzy zarówno z zakresu fizyki (z wykorzystaniem dowolnych źródeł na poziomie akademickim), jak i metod numerycznych, np. [?, ?, ?]. Rekomenduje się również, aby czytelnik samodzielnie wyprowadzał wszystkie formuły związane z metodami numerycznymi. Ostatnia część każdego rozdziału to podstawowe ćwiczenia, jakie należy wykonać z programem. Ćwiczenia podzielone są na 3 kategorie: podstawowe (które powinny być wykonane), uzupełniające (ich celem jest pojęcie i ugruntowanie wiedzy i umiejętności) oraz zaawansowane (zawierające trudniejsze zadania, dla osób szczególnie zainteresowanych przedmiotem). Niektóre ćwiczenia wymagają modyfikacji programów, a więc są także przyczynkiem do nauki programowania. Oprócz podstawowych projektów (pierwszych ośmiu), książka zawiera propozycje projektów zaawansowanych. Służą one do zademonstrowania możliwych zastosowań poznanych algorytmów do analizy bardziej złożonych zagadnień fizycznych. Wszystkie prace proponowane w tym podręczniku można wykonać, korzystając z darmowych narzędzi (np. Force-FORTRAN, GNU-PLOT do opracowań graficznych).

...not to be published



PIERWSZE KROKI

Wymagania wstępne: podstawowa znajomość komputera (system operacyjny Windows lub Linux).

Jest to pierwsza sesja w pracowni komputerowej, podczas której uczestnik poznaje podstawowe narzędzia, które będą wykorzystywane podczas nauki, elementy języka FORTRAN (lub PYTHON), środowisko programistyczne (np. Force), program graficzny (np. GNUPLOT). Wprowadzone zostają podstawowe operacje programistyczne i matematyczne: tablicowanie funkcji 1D i 2D, wyznaczanie miejsca zerowego oraz ekstremum funkcji 1D.

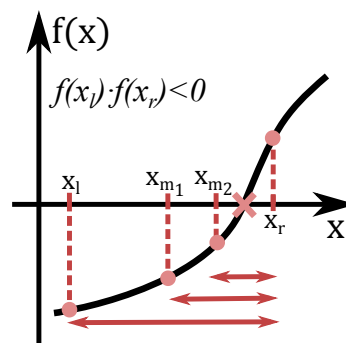
PODSTAWOWE OPERACJE MATEMATYCZNE

tablicowanie funkcji 1D i 2D, znajdowanie miejsca zerowego (metody: Bisekcji, Newton-Raphson, Siecznych), znajdowanie ekstremum (metody: 1D Simplex, Złotego Podziału, Parabol)

0.1 ZNAJDOWANIE MIEJSCA ZEROWEGO FUNKCJI 1D

0.1.1 Metoda Bisekcji

Rozpoczynamy od sytuacji, gdy jesteśmy pewni, że jedno i tylko jedno miejsce zerowe funkcji $f(x)$ znajduje się w przedziale (x_l, x_r) (Rys.2). Oznacza to, że znamy już położenie miejsca zerowego z niepewnością $(x_r - x_l)$. Strategia dalszego postępowania to redukcja przedziału niepewności w kolejnych krokach. Najefektywniejszym sposobem postępowania jest tu podzielenie przedziału z poprzedniego kroku (także wyjściowego) na pół, poprzez znalezienie punktu środkowego $x_m = (x_r + x_l)/2$.



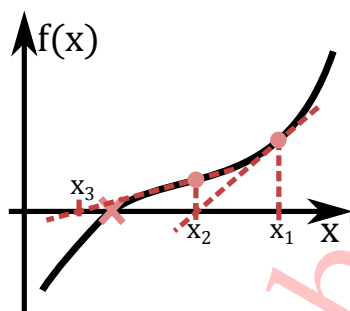
Rysunek 2: Metoda Bisekcji

Otrzymujemy dwa przedziały o dwukrotnie mniejszej długości, jednak miejsce zerowe może znajdować się tylko w jednym z nich. Celem jego identyfikacji

Contents

kacji sprawdzamy warunek np. $f(x_l) \cdot f(x_m) < 0$, czyli czy funkcja zmienia znak w przedziale (x_l, x_m) . Jeśli tak, to miejsce zerowe znajduje się właśnie w tym przedziale, jeśli nie to jest ono w przedziale drugim (prawostronnym). Operację powtarzamy, podstawiając za $x_m = x_l$ (lub $x_m = x_r$), i po n krokach niepewność redukuje się 2^n -krotnie. Całą procedurę kończymy, gdy niepewność będzie mniejsza od założonej wartości ϵ . Można także uprzednio wyznaczyć konieczną liczbę kroków, korzystając z początkowej długości przedziału, i tylko tyle kroków wykonać.

0.1.2 Metoda Siecznych oraz Newton-Raphson



Rysunek 3: Metoda Newton-Raphson

Metoda Bisekcji jest bardzo skuteczna jednak nie najbardziej efektywna. Popularnymi metodami alternatywnymi (i zwykle bardziej efektywnymi) są metoda Siecznych i metoda Newton-Raphson. Ta druga jest szczególnie użyteczna, jeśli wraz z funkcją znana jest jawna postać jej pochodnej oraz gdy wiadomo (lub z dużym prawdopodobieństwem przypuszcza się), że w otoczeniu miejsca zerowego funkcja posiada człon liniowy w rozwinięciu potęgowym. Wówczas w punkcie x_n będącym n -tym punktem iteracji tworzymy liniową aproksymację funkcji, co jest prostą operacją, jeśli znamy pochodną. Miejsce zerowe otrzymanej funkcji liniowej $x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$ jest kolejnym przybliżeniem miejsca zerowego $f(x)$. Kryterium zakończenia oparte jest na zmianach położenia kolejnych punktów x_n . Jeśli te zmiany w kilku kolejnych krokach nie przekraczają założonej wartości ϵ , wówczas procedurę kończymy.

Gdy nie znamy jawnej postaci pochodnej funkcji, wówczas możemy obliczyć ją numerycznie (np. metodą 3-punktową, patrz Rozdz. 2.2). Prowadzi to do algorytmu nazywanego metodą Siecznych.

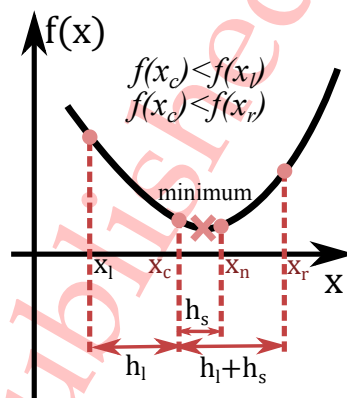
0.2 ZNAJDOWANIE MINIMUM (MAKSIMUM) FUNKCJI 1D

0.2.1 Metoda Złotego Podziału

Zagadnienie znajdowania minimum (maksimum) funkcji 1D jest kluczowe, ponieważ niemal wszystkie metody wyznaczania minimów w przestrzeniach wielowymiarowych (metody optymalizacji) opierają się na minimalizacjach kierunkowych. Należy zwrócić uwagę, że odwrócenie znaku funkcji

powoduje, że maksimum staje się minimum, dlatego omawianie algorytmów ograniczymy do znajdowania minimum.

Aby zidentyfikować przedział dziedziny (x_l, x_r) , w którym znajduje się minimum (założmy, że jest tylko jedno), potrzebny jest dodatkowy punkt kontrolny x_c położony wewnątrz przedziału (Rys.4). Możemy być pewni, że w przedziale znajduje się minimum, jeśli spełniony jest warunek $f(x_c) < f(x_l)$ i $f(x_c) < f(x_r)$. Konstruowanie algorytmu polega na wprowadzeniu czwartego punktu wewnątrz (x_l, x_r) , tak aby powstały dwa 3-punktowe przekrywające się obszary i aby można było dla każdego z nich sprawdzić powyższy warunek. Kluczowe jednak staje się położenie tego czwartego punktu (a także punktu trzeciego), tak aby redukcja przedziału niepewności w każdym kroku była taka sama. Cel ten osiąga się, jeśli czwarty punkt dzieli dłuższy z przedziałów (x_l, x_c) i (x_c, x_r) w proporcji Złotego Podziału, tzn. $h_l / (h_l + h_s) = h_s / h_l$ (h_l - dłuższy segment, h_s - krótszy segment). W ten sposób dwa nowe przekrywające się przedziały mają taką samą długość. Przez podstawienie $x = h_s / h_l$ w powyższej proporcji $x^2 + x - 1 = 0$ otrzymujemy równanie, którego rozwiązanie $(\sqrt{5} - 1) / 2 \approx 0.62$ jest proporcją Złotego Podziału, znanego w architekturze i sztuce już w starożytności. Po n krokach przedział niepewności redukuje się 0.62^n -krotnie, czyli nieco wolniej niż w algorytmie Bisekcji wyznaczania miejsca zerowego. Metoda Złotego Podziału jest bezpieczną i skuteczną metodą wyznaczania ekstremum, choć nie jest ona najbardziej efektywna.



Rysunek 4: Metoda Złotego Podziału

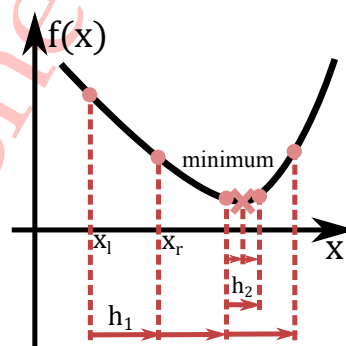
0.2.2 Inne metody

Jeśli oprócz funkcji znana jest jawna postać jej pochodnej, wówczas wyznaczanie minimum sprowadza się do znalezienia miejsca zerowego pochodnej z wykorzystaniem jednej z metod omówionych w poprzedniej sekcji. Z kolei pewną analogią metody Siecznych znajdowania miejsca zerowego funkcji, jest metoda Parabol dla wyznaczania minimum. Mianowicie, korzystając z 3 punktów x_l, x_c, x_r , można jednoznacznie lokalnie aproksymować funkcję parabolą. Położenie minimum tej paraboli będzie opisany wyżej czwartym punktem kontrolnym, który podzieli przedział z poprzedniego kroku na dwa przekrywające się mniejsze przedziały. Sprawdzenie dla nich warunku $f(x_c) < f(x_l)$ i $f(x_c) < f(x_r)$ pozwala na identyfikację tego, w którym znajduje się minimum. Ponownie aproksymujemy funkcję parabolą w nowym przedziale i procedurę powtarzamy aż do osiągnięcia założonej niepewno-

Contents

ści ϵ (w odniesieniu do długości przedziału w ostatnim kroku). Trzeba zauważyć, że metoda ta będzie bardzo skuteczna, jeśli funkcja posiada człon kwadratowy w potęgowym jej rozwinięciu w otoczeniu minimum.

Metoda Simplex (lub w 1D metoda Kładki) jest najprostszą (jednak najmniej efektywną) metodą. Metoda ta wykorzystuje okienko testowe 'Kładkę' (bez trzeciego punktu kontrolnego) o długości h . Począwszy od pewnego punktu, okienko testowe przesuwane jest w kierunku, w którym funkcja maleje. Na przykład przy przesuwaniu okienka w prawo sygnałem pojawienia się minimum jest spełnienie warunku $f(x_l) < f(x_r)$. W takiej sytuacji przedział



Rysunek 5: Metoda Simplex

testowy jest zmniejszany 2-krotnie i przeszukiwanie zaczyna się od punktu x_l (przy którym zostało zauważone minimum). Procedurę kończymy, gdy osiągnięta zostaje założona niepewność $h < \epsilon$. Dużą zaletą metody jest, że pozwala ona w ogóle na znalezienie przedziału, gdzie występuje minimum. Po jego znalezieniu można stosować bardziej efektywne metody.

ĆWICZENIA

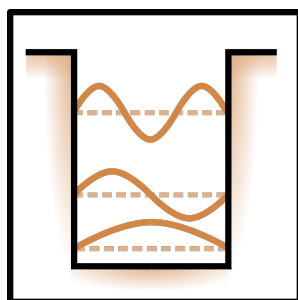
Obowiązkowe

1. Korzystając z programu FTABLE, wypisz do pliku tablicę wybranej przez siebie funkcji i zwizualizuj ją, korzystając z programu graficznego (np. GNUPLOT).
2. Zmodyfikuj program FTABLE tak, aby tablicował funkcję 2D. Utwórz tablicę swojej własnej funkcji i narysuj ją programem graficznym.
3. Przetestuj program BISEC, znajdując pierwiastki wybranej funkcji kwadratowej i porównując je z wartościami analitycznymi.
4. Korzystając z programu BISEC, wyznacz liczbę π jako miejsce zerowe funkcji sinus. Jaką precyzję można osiągnąć? Wyjaśnij dlaczego.

Zaawansowane

1. Napisz program 1DMINIMUM, który znajdowałby minimum funkcji 1D z wykorzystaniem jednej z metod opisanych w tym rozdziale (Złotego Podziału, Parabol, Simplex). Przetestuj program, znajdując minimum zadanej funkcji kwadratowej. Wyznacz wartość liczby π jako położenie minimum funkcji cosinus. Jaką precyzję można osiągnąć? Wyjaśnij dlaczego.

...not to be published



1

PROJEKT: PROSTOKĄTNA STUDNIA KWANTOWA - STACJONARNE RÓWNANIE SCHRÖDINGERA W JEDNYM WYMIARZE

***Wymagania wstępne:** Stacjonarne równanie Schrödingera, prostokątna studnia kwantowa jako najprostszy model układu kwantowego o związanych stanach.*

W tym projekcie wykorzystuje się procedurę wyznaczania miejsc zerowych do znajdowania wartości własnych stanów związanych w prostokątnej studni potencjału (program QWELL). Traktując taką studnię jako najprostszy możliwy model atomu, można dopasować otrzymywane energie własne do pierwszych 2-3 energii własnych atomu wodoru, co jest przedmiotem głównego zadania w tym projekcie. Zagadnienie własne pojawia się w kilku obszarach fizyki (mechanika drgań, optyka falowa, mechanika kwantowa) i jest przedmiotem oddzielnego rozdziału (Rozdz. 6), a także projektu zaawansowanego (Rozdz. ??), gdzie rozważana jest studnia prostokątna częściowo wypełniona elektronami.

1.1 METODA

Zagadnienie własne dla prostokątnej studni potencjału i metoda jego rozwiązania.

Stacjonarne równanie Schrödingera dla prostokątnej studni potencjału ma postać:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = \epsilon \psi(x) \quad (1.1.1)$$

gdzie:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{dla } -a/2 \leq x \leq a/2 \\ 0 & \text{dla } x < -a/2 \text{ lub } x > a/2 \end{cases}$$

W jednostkach atomowych (Hartree)

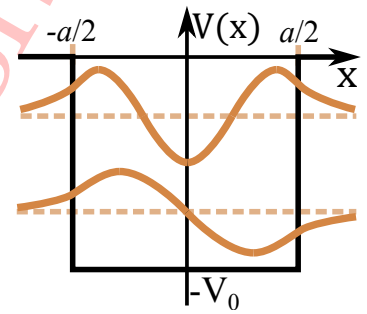
$$\hbar = m_e = e = 1:$$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2(x) \right] \psi(x) = 0 \quad (1.1.2)$$

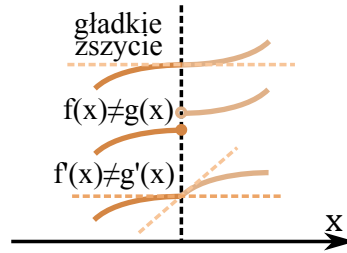
gdzie $k^2(x) = 2(\epsilon - V(x))$.

Rozwiązania:

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(kx) & \text{dla } -a/2 \leq x \leq a/2 \quad (\text{parzyste}) \\ A \sin(kx) & \text{dla } -a/2 \leq x \leq a/2 \quad (\text{nieparzyste}) \\ B \exp(\mp \kappa x) & \text{dla } x < -a/2 \text{ or } x > a/2 \end{cases} \quad (1.1.3)$$



Rysunek 6: Studnia potencjału wraz z rozwiązaniami: parzystym (górna) i nieparzystym (dolna)



Rysunek 7: Rozwiązania wewnątrz i na zewnątrz studni (odpowiednio $f(x)$ i $g(x)$) muszą mieć takie same wartości i takie same wartości pochodnych na krawędzi studni, przez co zapewniona jest ciągłość i gładkość rozwiązania i jest to jednocześnie warunek na znalezienie wartości własnej.

Warunkiem na to, że typowana wartość energii ϵ w formule 1.1.1 jest wartością własną, jest gładkie zszycie rozwiązania wewnątrz studni z rozwiązaniem na zewnątrz (Rys.7), tzn. wartości funkcji i ich pochodnych muszą być równe w $x = a/2$ (dzięki symetrii nie musimy uwzględniać punktu $-a/2$). Tak więc mamy:

dla rozwiązań symetrycznych:

$$\begin{cases} \pm A \cos(ka/2) = \pm B \exp(-\kappa a/2) \\ \mp A k \sin(ka/2) = \mp B \kappa \exp(-\kappa a/2) \end{cases} \quad (1.1.4)$$

i dla rozwiązań antysymetrycznych:

$$\begin{cases} \pm A \sin(ka/2) = \pm B \exp(-\kappa a/2) \\ \pm Ak \cos(ka/2) = \mp B\kappa \exp(-\kappa a/2) \end{cases} \quad (1.1.5)$$

gdzie $k = \sqrt{2(\varepsilon + V_0)}$ i $\kappa = \sqrt{-2\varepsilon}$

Dzieląc równania przez siebie w powyższych układach, otrzymujemy dwa warunki dla rozwiązań symetrycznych (parzystych) i antysymetrycznych (nieparzystych):

$$\begin{cases} F_{\text{even}}(\varepsilon) = \sin(ka/2) - \kappa/k \cdot \cos(ka/2) = 0 & (\text{parzyste}) \\ F_{\text{odd}}(\varepsilon) = \sin(ka/2) + k/\kappa \cdot \cos(ka/2) = 0 & (\text{nieparzyste}) \end{cases} \quad (1.1.6)$$

Wartości własne znajdujemy, rozwiązując te równania (znajdując miejsca zerowe tak skonstruowanych funkcji charakterystycznych)

1.2 ĆWICZENIA

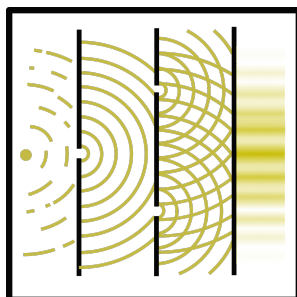
Obowiązkowe

1. Używając programu QWELL, stabilizuj funkcje $F_{\text{even}}(\varepsilon)$ i $F_{\text{odd}}(\varepsilon)$ (są to funkcje odpowiadające rozwiązaniom parzystym i nieparzystym, których miejsca zerowe są energiami poziomów kwantowych)
2. Narysuj programem graficznym funkcje $F_{\text{even}}(\varepsilon)$ i $F_{\text{odd}}(\varepsilon)$. Powtórz obliczenia dla innych parametrów studni (a i V_0) i ponownie zwizualizuj wyniki.
3. (Prostokątna studnia kwantowa jako model atomu wodoru). Spóbj dopasować pierwsze dwa poziomy kwantowe studni do pierwszych dwóch poziomów energii w atomie wodoru, stosując metodę "prób i błędów" (wskazówka: rozpocznij poszukiwania od wartości $a = 3\text{Bohr}$ oraz $V_0 = 1\text{Hartree}$). Jaka jest wartość trzeciej energii? Czy mieści się w zakresie energii wewnątrz studni? (Uwaga: w jednostkach atomowych energie własne atomu wodoru dane są wyrażeniem: $\varepsilon_n = -1/(2n^2)$; ponieważ studnia jest układem 2-parametrowym, pierwsze dwa poziomy można dopasować z dowolnie małą niepewnością).

Zaawansowane

1. Zaproponuj algorytm i napisz program, który automatycznie znajdowałby parametry studni posiadające 2 pierwsze poziomy energii zgodne (z zadaną niepewnością) z energiami w atomie wodoru.

...not to be published



PROJEKT: DYFRAKCJA ŚWIATŁA NA SZCZELINIE

Wymagania wstępne: zjawiska interferencji i dyfrakcji fal.

Pracując nad tym projektem, studenci poznają metody numerycznego różniczkowania i kwadratury. Ważnym dyskutowanym zagadnieniem technicznym, obecnym zawsze przy modelowaniu numerycznym, jest zbieżność wyników ze względu na parametry kontrolne obliczeń, w tym wypadku jest to parametr siatki. Procedura kwadratury numerycznej jest wykorzystana do konstrukcji programu DIFFRACTION symulującego zjawiska dyfrakcji fali skalarnej na pojedynczej nieskończonej szczelinie i układzie kilku równoległych szczelin. Program posłuży do badania różnych aspektów fizyki zjawiska.

2.1 PROBLEM FIZYCZNY: INTERFERENCJA I DYFRAKCJA

Zjawiska interferencji i dyfrakcji, koncepcja amplitudy zespolonej, dyskretne i ciągłe źródła fal, całka dyfrakcyjna, dyfrakcja na pojedynczej nieskończonej szczelinie, siatka dyfrakcyjna.

Całka dyfrakcyjna reprezentuje superpozycję amplitud zespolonych fal emitowanych przez źródła elementarne, które składają się na całe źródło ciągłe (zasada Huygensa):

$$D = \int_{Source} \frac{A_o(s)}{r} \exp(-ikr + \phi(s)) ds \quad (2.1.1)$$

gdzie $A_o(s)$ - amplituda źródła elementarnego (dokładniej gęstość amplitudy), $\phi(s)$ - faza początkowa na źródle elementarnym, $k = 2\pi/\lambda$ - liczba falowa, r - odległość od źródła elementarnego do punktu obserwacji,

$(A_0(s)/r) \exp(-ikr + \phi(s))$ amplituda zespolona (amplituda z uwzględnieniem przestrzennego rozkładu fazy). Trzeba zauważyć, że czynnik $1/r$ obowiązuje dla fali sferycznej, dla fali cylindrycznej (jak w naszym przypadku) powinien on być zastąpiony przez $1/\sqrt{r}$ (wyjaśnij dlaczego). Warto również wyjaśnić, dlaczego w wyrażeniu 2.1.1 nie występuje czas, skoro jest to superpozycja fal. Otóż czynnik czasowy w reprezentacji eulerowskiej fali, $\exp[i(\omega t - kr)]$, jest identyczny we wszystkich falach elementarnych i w związku z tym może być wyciągnięty przed całkę, a gdy obliczamy natężenie (ostateczny wynik interferencji), czyli kwadrat modułu całki dyfrakcyjnej, wówczas jego wkład wyniósłby 1 i dlatego jest od razu pominięty.

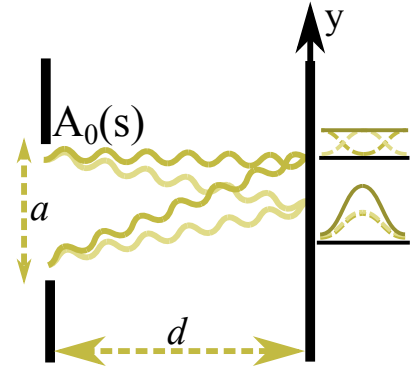
Natężenie formujące obraz dyfrakcyjny dane jest wyrażeniem:

$$I = |D|^2 = \text{Re}(D)^2 + \text{Im}(D)^2 \quad (2.1.2)$$

W przypadku nieskończonej szczeliny o szerokości a problem staje się 2-wymiarowy, w takim sensie, że żadna wielkość fizyczna nie zmienia się w kierunku równoległym do szczeliny, czyli interesują nas tylko dwa pozostałe kierunki. Zakładając, że amplituda i faza nie zmieniają się w obszarze szczeliny, całka dyfrakcyjna dla ekranu położonego w odległości d od szczeliny przyjmuje postać:

$$D = \int_{-a/2}^{a/2} A(r) \exp(-ikr) dx \quad (2.1.3)$$

gdzie $r = \sqrt{(y-x)^2 + d^2}$, $A(r) = A_0/\sqrt{r}$ (dla fali cylindrycznej emitowanej przez elementarne, nieskończone źródło liniowe), A_0 - amplituda źródła, x jest współrzędną pionową źródła na szczeliny a y - współrzędną pionową punktu obserwacji na ekranie.



Rysunek 8: Interferencja konstruktwna i destruktywna dla wybranych źródeł elementarnych z obszaru szczeliny, schematyczne przedstawienie.

2.2 METODY NUMERYCZNE: POCHODNE I KWADRATURY

Różne schematy różniczkowania i kwadratury oparte na lokalnej aproksymacji funkcji szeregami potęgowymi.

2.2.1 Pochodne: schematy 2, 3 i 5-punktowy

Chcemy obliczyć pochodne pierwszego i wyższych rzędów funkcji $f(x)$ w pewnym punkcie x . Zaczniemy od rozwinięcia funkcji w szeregu potęgowy w otoczeniu punktu x :

$$\begin{cases} f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 \pm \frac{1}{6}f'''(x)h^3 + \dots \\ f(x \pm 2h) = f(x) \pm f'(x)2h + \frac{1}{2}f''(x)(2h)^2 \pm \frac{1}{6}f'''(x)(2h)^3 + \dots \\ \dots \end{cases} \quad (2.2.1)$$

gdzie h jest małym odchyleniem współrzędnej x nazywanym parametrem siatki. Powyższe rozwinięcia, jeśli ograniczymy je na wyrazach wybranego rzędu, utworzą układ równań liniowych, w którym niewiadomymi są kolejne pochodne. Na przykład, jeśli uwzględnimy tylko odchylenie h i tylko człony do drugiego rzędu włącznie, otrzymamy:

$$\begin{cases} f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + O(h^3) \\ f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + O(h^3) \end{cases} \quad (2.2.2)$$

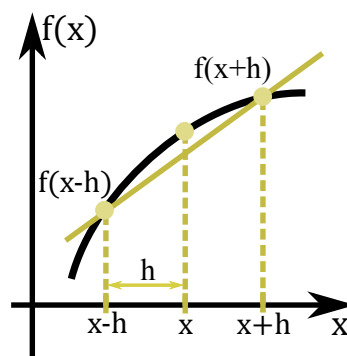
Symbol $O(h^3)$ oznacza, że wiodący człon (o największej wartości) pozostałego szeregu jest rzędu h^3 .

Dodając lub odejmując stronami równania 2.2.2, łatwo wyprowadzimy formuły na pierwszą i drugą pochodną:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \quad (2.2.3)$$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} + O(h^2) \quad (2.2.4)$$

Należy zauważyć, że niepewność drugiej pochodnej jest rzędu $O(h^2) = O(h^4)/O(h^2)$, ponieważ człony wiodące trzeciego rzędu sumują się do zera przy dodawaniu równań. Powyższe formuły nazywamy 3-punktowymi, ponieważ użyta lokalna aproksymacja funkcji oparta jest na 3 punktach (paraboliczna). Formuły te dają dokładne wyniki pochodnych dla funkcji kwadratowej. Pewną ciekawostką jest, że druga pochodna wyrażona jest poprzez wartości funkcji w dwóch punktach, mimo że schemat jest 3-punktowy.



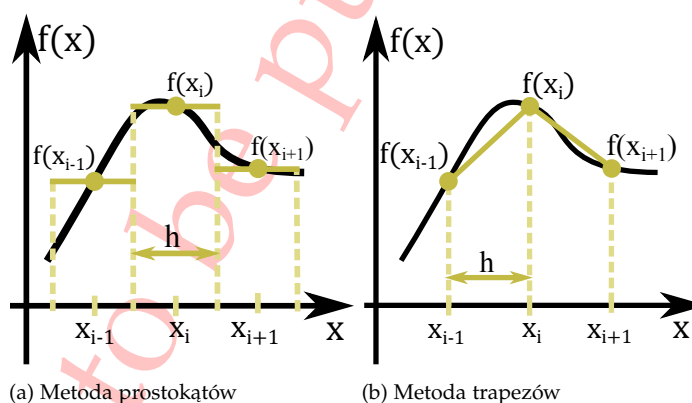
Rysunek 9: Schemat 3-punktowy

3-

Wykorzystując przedstawioną wyżej strategię, łatwo jest wyprowadzić schematy wyższych rzędów, jak również formuły na pochodne wyższych

rzędów. Można również wprowadzić niejednorodną siatkę (zmienną h), choć prowadzi to do bardziej złożonych formuł. Ważnym spostrzeżeniem jest, że często łatwiejszym i bardziej efektywnym sposobem zwiększenia dokładności obliczonych pochodnych jest zmniejszenie wartości parametru siatki h zamiast stosowania schematu wyższego rzędu, ponieważ ta druga opcja wiąże się z większą liczbą ewaluacji funkcji, co z kolei prowadzi do wydłużenia czasu obliczeń.

2.2.2 Kwadratura: metoda prostokątów, trapezów oraz parabol (Simpsona)



Rysunek 10: Kwadratura

Schematy kwadratury przedstawione tutaj korzystają z tablicowej reprezentacji funkcji, to znaczy wartości funkcji są znane na pewnej siatce punktów dziedziny (przyjmijmy, że jednorodnej) w przedziale całkowania. Parametr siatki h jest odległością między sąsiadującymi punktami siatki $h = x_{i+1} - x_i$. Algorytmy kwadratury oparte są na lokalnej aproksymacji funkcji szeregami potęgowymi różnych rzędów. Gdy znane są lokalne postaci analityczne funkcji, można też obliczyć lokalne wartości całek i wartości ich zsumować w całym przedziale całkowania. I tak, lokalna aproksymacja funkcją stałą wymaga znajomości $f(x_i)$ tylko w jednym punkcie i prowadzi do metody prostokątów. Aproksymacja funkcją liniową korzysta z wartości funkcji w dwóch punktach siatki i prowadzi do metody trapezów (patrz Rys. 10). Metoda, którą dokładniej tutaj omówimy, oparta jest na lokalnej aproksymacji funkcją kwadratową. Jest to bardzo popularna metoda, z powodu swojej efektywności i świetnej dokładności, nazwana metodą Simpsona.

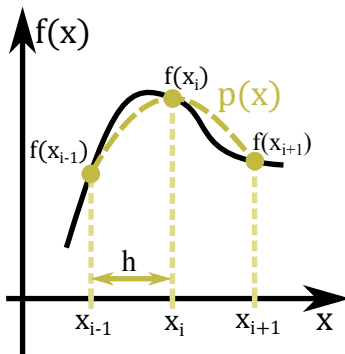
Korzystając z opisanych wyżej wartości I i II pochodnej w schemacie 3-punktowy, łatwo znajdziemy współczynniki funkcji kwadratowej przechodzą-

cej przez punkty $f(x_i - h), f(x_i), f(x_i + h)$ (Rys. 11). Lokalna wartość całki ma wówczas postać:

$$D = \int_{-h}^h f(\zeta) d\zeta = \frac{h}{3} (f(x_i + h) + 4f(x_i) + f(x_i - h)) + O(h^5) \quad (2.2.5)$$

gdzie $\zeta = x - x_i$ jest lokalną zmienną całkowania.

Jak widać, lokalna niepewność całki jest bardzo mała ($O(h^5)$). Ta niepewność może się zwiększyć, gdy zsumujemy całki lokalne, ponieważ wówczas człony $O(h^5)$ sumują się i w najgorszym przypadku niepewność wyniesie $NO(h^5) = 1/h O(h^5) = O(h^4)$ (dla przedziału całkowania o długości 1, wartość parametru siatki $h = 1/N$).



Rysunek 11: Metoda Simpsona

danych lokalnych zachowań funkcji aproksymującej.

Przedstawiona wyżej strategia może być wykorzystana do wyprowadzania schematów kwadratury wyższych rzędów. W przeciwieństwie do pochodnej możemy tu rzeczywiście osiągnąć lepszą dokładność w połączeniu z efektywnością, ponieważ przy tej samej liczbie ewaluacji funkcji uzyskujemy lepszą lokalną aproksymację funkcji, natomiast zmniejszanie parametru h prowadzi w tym wypadku do zwiększenia liczby ewaluacji. Trzeba jednak pamiętać, że stosowanie wielomianów wyższych rzędów pociąga zawsze ryzyko nieporządkanych lokalnych zachowań funkcji aproksymującej.

2.3 ĆWICZENIA

Procedury numeryczne

Obowiązkowe

1. Wyprowadź formułę 2.2.5.
2. (Testowanie programu DERIV) Wprowadź swoją własną funkcję do segmentu FUNC i oblicz pochodne. Porównaj wyniki z wartościami analitycznymi. Sprawdź wartości pochodnych dla funkcji kwadratowej. Jakie one są w porównaniu z wartościami analitycznymi i wyjaśnij dlaczego są takie?
3. Sprawdź zbieżność I i II pochodnej ze względu na parametr siatki h . Ustaw zmianę parametru siatki w zakresie $0.1 - 10^{-17}$ i narysuj pochodne jako funkcje $-\log_{10}(h)$. Wykonaj ten test dla podwójnej i poje-

PROJEKT: DYFRAKCJA ŚWIATŁA NA SZCZELINIE

dynczej precyzji reprezentacji liczb rzeczywistych. Przedyskutuj wyniki.

4. Przetestuj program QUADRAT poprzez wycałkowanie funkcji, dla której łatwo obliczyć analityczną wartość całki.
5. Podobnie jak w przypadku pochodnej sprawdź zbieżność całki ze względu na parametr siatki h , tym razem jednak sprawdzając również czas obliczeń. Przedyskutuj wyniki.
6. Wyznacz liczbę π , obliczając odpowiednią całkę dla wybranego fragmentu długości łuku okręgu lub pola powierzchni wybranego fragmentu koła. Z jaką precyzją udaje się wyznaczyć liczbę π (porównaj z wcześniejszymi ćwiczeniami dotyczącymi wyznaczania tej liczby).

Uzupełniające

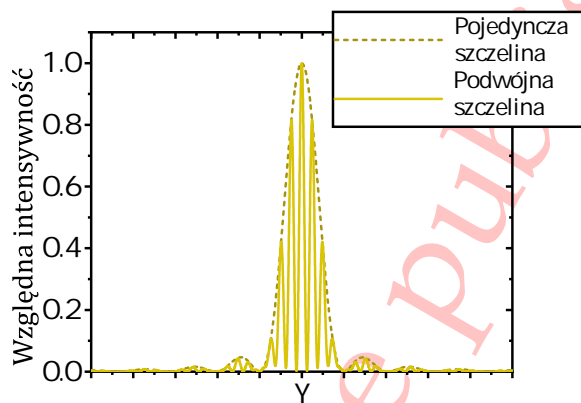
1. Wyprowadź 5-punktową formułę na I i II pochodną. Napisz i dołącz do programu DERIV odpowiednie procedury (nazywając je np. *fp5* i *fp5p5*) i powtórz ćw.2. Porównaj szybkość zbieżności schematów 3- i 5-punktowego.
2. Wstaw wielomiany drugiego i piątego rzędu do segmentu FUNC i sprawdź zbieżność ze względu na h . Przedyskutuj wynik.

Dyfrakcja

Obowiązkowe

1. Przetestuj program DIFFRACTION poprzez porównanie położenia pierwszego minimum obrazu w dalekim polu dla pojedynczej szczeliny (wskazówki: warunek dalekiego pola można rozpoznać poprzez fakt, że wartości natężeń w minimach są zerowe; położenie pierwszego minimum powinno spełniać warunek $y/d \approx \lambda/a$)
2. Znajdź obrazy dyfrakcyjne dla różnych warunków fizycznych: dalekie pole ($d \gg a$), bliskie pole ($d \approx a$), szczelina bardzo wąska ($a \ll \lambda$), wąska ($a \approx \lambda$) i szeroka ($a \gg \lambda$). Postaraj się zinterpretować wyniki. Przedyskutuj możliwy wpływ parametrów obliczeniowych na wyniki oraz jak można sprawdzić czy uzyskany wynik jest fizyczny, czy raczej związany z efektami numerycznymi.

3. Zmodyfikuj program tak, aby obliczał obraz dyfrakcyjny dla układu 2 szczelin. W dalekim polu należy spodziewać się obrazu jakościowo takiego jak na Rys.12. Sprawdź czy położenie maksimum I rzędu zgadza się z przewidywaniem teoretycznym. Obraz od pojedynczej szczeliny (o takich samych parametrach jak tej z układu), po odpowiedniej renormalizacji, tworzy obwiednię dla obrazu od 2 szczelin. Wyjaśnij dlaczego i jaką wartość ma czynnik renormalizacji.



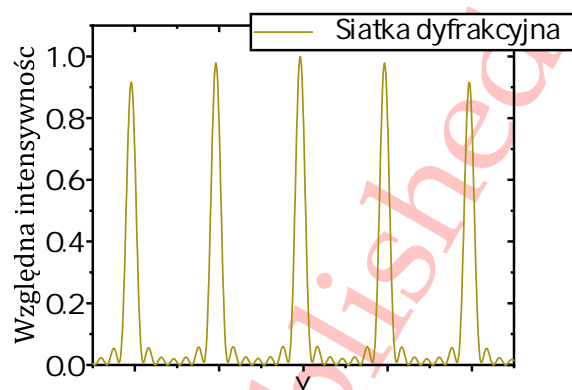
Rysunek 12: Przykład obrazu (wzoru) dyfrakcyjnego pojedynczej i podwójnej szczeliny w dalekim polu. W obu przypadkach parametry pojedynczej szczeliny są takie same. Oba wzory zostały unormowane do wartości 1.0 w maksimum (W rzeczywistości natężenia dla układu 2 szczelin są większe).

Uzupełniające

1. Zmodyfikuj program tak, aby obliczał obraz dyfrakcyjny dla układu wielu równoległych szczelin, użyj instrukcji pętli. Wykorzystaj ten program do symulacji siatki dyfrakcyjnej, zbadaj jak parametry siatki wpływają na obraz dyfrakcyjny w dalekim polu, w szczególności na położenie maksimum I rzędu. Jak położenie maksimum I rzędu zależy od długości fali? ●

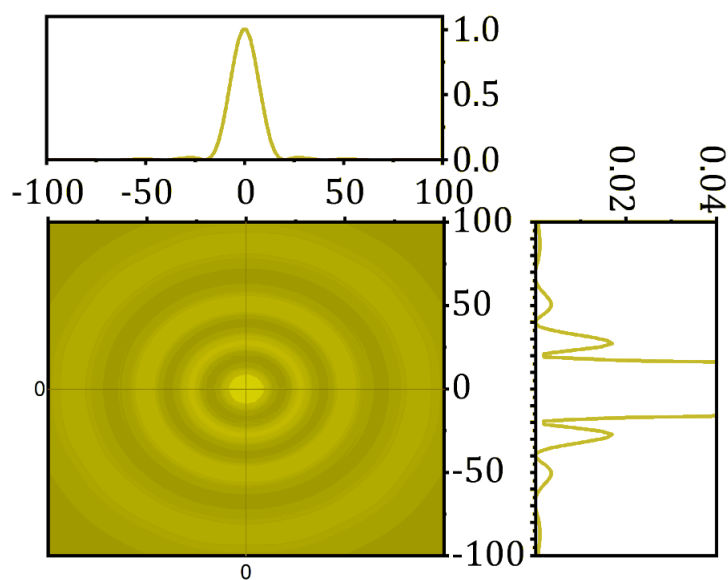
Zaawansowane

1. Rozważ różne rozkłady fazy początkowej $\Phi(s)$ (np. liniowy) w poprzek pojedynczej szczeliny (lub różne fazy początkowe na wielu szczelinach). Jak rozkłady te wpływają na obrazy dyfrakcyjne? (W zadaniu tym kryje się analogia do anten nadawczych GSM, będących zwykle systemem radiatorów, gdzie charakterystyki promieniowania kształtuje się m.in. poprzez pobudzenie radiatorów z różnymi fazami początkowymi).

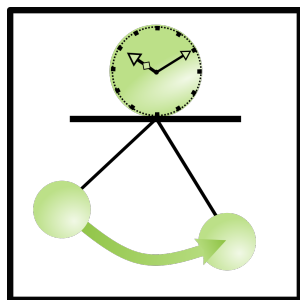


Rysunek 13: Przykład obrazu dyfrakcyjnego od układu wielu szczelin

2. Rozważ przypadek dyfrakcji na aperturze kołowej lub aperturze o dowolnym kształcie. Spróbuj napisać odpowiedni program (wskazówka: zamiast całkowania trzeba zastosować dyskretne próbkowanie źródeł elementarnych)



Rysunek 14: Przykład obrazu dyfrakcyjnego od apertury kołowej (dysk Airiego). Skala kolorów została zmodyfikowana aby wypuklić zewnętrzne dyski.



PROJEKT: WAHADŁO JAKO WZORZEC JEDNOSTKI CZASU

Wymagania wstępne: Zasady dynamiki Newtona, oscylatory harmoniczny i anharmoniczny, oscylator wymuszony, koncepcja przestrzeni fazowej.

Projekt ten poświęcony jest zagadnieniu wartości początkowej (IVP - *Initial Value Problem*) w równaniach różniczkowych zwyczajnych. Uczestnicy poznają różne wielopunktowe schematy rekurencyjne, będą je stosowali do rozwiązywania równań nierozwiązywalnych analitycznie, testowali zbieżność rozwiązań ze względu na parametr siatki i porównywali jakość różnych algorytmów. Na końcu wybrany schemat będzie zastosowany do zbadania właściwości wahadła, w szczególności zależności jego okresu drgań od energii. Wyniki posłużą do dyskusji jego zastosowania jak wzorca jednostki czasu.

3.1 PROBLEM FIZYCZNY: WAHADŁO MATEMATYCZNE

Równanie wahadła, warunki początkowe, przypadek małych drgań (izochronizm), okres ruchu w pełnym zakresie energii, rozkład równań różniczkowych II rzędu na układ równań I rzędu.

Wahadło matematyczne (tu założymy, że jest to masa punktowa m zawieszona na bezmasowym sztywnym pręcie o długości l) opisuje równanie ruchu:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{l}\sin(\theta) \quad (3.1.1)$$

gdzie θ to kąt wychylenia, a g - przyspieszenie ziemskie.

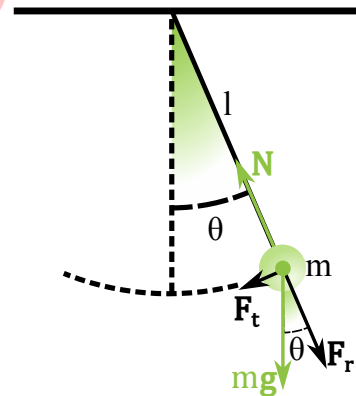
Dla małych kątów wychylenia:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{l}\theta \quad (3.1.2)$$

$$\theta(t) = \theta_0 \sin(\omega t) \quad (3.1.3)$$

gdzie θ_0 - amplituda katowa oscylacji, $\omega = 2\pi/T = \sqrt{g/l}$.

Jak widać, dla małych wychyleń drgania są harmoniczne i w związku z tym ich okres nie zależy od (małej) amplitudy. Zjawisko to, nazywane izochronizmem, pozwala na wykorzystanie wahadła jako wzorca jednostki czasu, co zrobił Christian Huygens w 1656 roku, konstruując pierwszy zegar z wahadłem. Jednakże, dla większych amplitud katowych okres zaczyna się zmieniać i, aby go wyznaczyć, trzeba rozwiązać równanie różniczkowe (3.1.1) dla danego kąta początkowego i początkowej prędkości katowej (zagadnienie wartości początkowej).



Rysunek 15: Model matematyczny wahadła

Wygodnym sposobem zadawania warunków początkowych jest wykorzystanie energii całkowitej: $E = mgl(1 - \cos(\theta)) + ml^2\omega^2/2$, wyrażonej w jednostkach maksymalnej energii potencjalnej względem najniższego położenia, czyli $\epsilon = E/2mgl$. Wówczas spodziewamy się, że okres będzie prawie stały dla $\epsilon \ll 1$ (izochronizm), będzie dążył do nieskończoności dla ϵ dążącego do 1.0 i będzie asymptotycznie dążył do $1/\sqrt{\epsilon}$ dla $\epsilon \gg 1$ (wyjaśnij dlaczego?).

3.2 METODY NUMERYCZNE: ZAGADNIENIE WARTOŚCI POCZĄTKOWEJ DLA RÓWNAŃ RÓŻNICZKOWYCH ZWY- CZAJNYCH (ODE - *ordinary differential equations*)

Algorytmy Eulera, Adamsa-Bashfortha i Runge-Kutty, metody implicite, eksplícite i 'predictor-corrector'.

Rozważamy układ równań różniczkowych, liniowych, niejednorodnych:

$$\left\{ \frac{dy_i}{dx} = f(y_1, \dots, y_N, x) \right. \quad (3.2.1)$$

gdzie x - zmienna niezależna $\{y_1, \dots, y_N\}$ - zmienne zależne (będące funkcjami x).

3.2 METODY NUMERYCZNE: ZAGADNIENIE WARTOŚCI POEZĄTKOWEJ DLA RÓWNAŃ RÓŻNICZKOWYCH ZWYCZAJNYCH (ODE - *ordinary differential equations*)

Równania różniczkowe liniowe wyższych rzędów można rozłożyć 3.2.1 poprzez wprowadzenie funkcji pomocniczych, będących pochodnymi funkcji $y(x)$.

Rozwinięcie algorytmów numerycznych dla pojedynczego równania:

$$\frac{dy}{dx} = f(y, x) \quad (3.2.2)$$

wystarczy, ponieważ mogą one łatwo być zaadoptowane do układu 3.2.1.

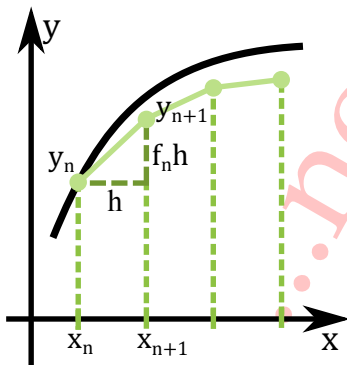
Przedstawione tu algorytmy opierają się na dyskretyzacji zmiennej niezależnej. Wprowadzamy regularną siatkę punktów $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$, w przedziale (x_0, x_N) . Odległość między sąsiadującymi punktami $h = (x_{i+1} - x_i)$ lub $h = (x_N - x_0)/N$ to parametr siatki h . Poszukujemy formuły rekurencyjnej postaci:

$$y_{n+1} = F(y_n, y_{n-1}, y_{n-2}, \dots) \quad (3.2.3)$$

która pozwoliłaby na znalezienie ewolucji funkcji $y(x)$, począwszy od punktu początkowego $y_0(x_0)$.

Zacniemy od ogólnej formuły, będącej dokładną całką równania (3.2.2) na przedziale (x_n, x_{n+1}) :

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx \quad (3.2.4)$$



Rysunek 16: Metoda Eulera

W ogólności postać jawna funkcji $f(x, y)$ nie jest znana, ponieważ $y(x)$ jest nieznana (jej właśnie poszukujemy). Jednakże, znane są już wartości $y(x)$ na poprzednich wartościach siatki $y_n, y_{n-1}, y_{n-2}, \dots$ i mogą być one wykorzystane do ekstrapolacji $y(x)$ na przedziale (x_n, x_{n+1}) . W zależności od liczby użytych punktów otrzymuje tzw. formuły eksplicite różnych rzędów. Na przykład najprostsza formuła, schemat Eulera, opiera się na ekstrapolacji funkcją stałą (równą y_n):

$$y_{n+1} = y_n + f_n h + O(h^2) \quad (3.2.5)$$

gdzie $f_n = f(x_n, y_n)$.

Człon wiodący lokalnego odchylenia od dokładnego rozwiązania jest rzędu h^2 (wyjaśnij dlaczego?). Trzeba zwrócić uwagę, że po N krokach całkowita niepewność jest jeszcze o jeden rząd h mniejsza, ponieważ $h \simeq 1/N$, czyli $h^2 \cdot N = h^2/h = h$.

Popularny 3-krokowy schemat Adamsa-Bashfortha oparty jest na ekstrapolacji parabolicznej (wykorzystuje 3 punkty y_n, y_{n-1}, y_{n-2}):

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_{n-2} - 16f_{n-1} + 23f_n) + O(h^4) \quad (3.2.6)$$

3.2.1 Metoda Rungego-Kutty

Metody Rungego-Kutty oparte są na bardziej zaawansowanych koncepcjach matematycznych i nie będą tutaj dyskutowane, chociaż w dalszym ciągu punktem wyjścia jest formuła 3.2.4 (więcej szczegółów można znaleźć w [?, ?, ?]). Metody te uważa się za jedne z najlepszych, a ich wielką zaletą jest fakt, że tylko jeden punkt, już znany (np. warunek początkowy), jest potrzebny, aby wykonać krok rekurencyjny, podczas gdy schematy wielokrokowe potrzebują tych punktów kilka i nie mogą być zapoczątkowane z jednego warunku początkowego. Jako przykład podajemy poniżej formuły na schemat Rungego-Kutty czwartego rzędu:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, y_n) \\ k_2 &= hf(x_n + 1/2h, y_n + 1/2k_1) \\ k_3 &= hf(x_n + 1/2h, y_n + 1/2k_2) \\ k_4 &= hf(x_n + h, y_n + k_3) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + O(h^6) \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

Nieznana funkcja $y(x)$ pojawiająca się w formule 3.2.4 może być również aproksymowana wielomianem dowolnego rzędu z uwzględnieniem nieznanego punktu y_{n+1} . W takim przypadku wartość y_{n+1} pojawi się również po prawej stronie i można ją obliczyć rozwiązując równanie, analitycznie lub numerycznie. Taka strategia prowadzi do grupy metod nazywanych "implicite". Najczęściej jednak schematy te wykorzystywane są w metodach "predictor-corrector", gdzie najpierw przewiduje się wartość y_{n+1} , wykorzystując jeden ze schematów eksplicite, a potem wartość tę "poprawia się" z pomocą schematu implicite wyższego rzędu (wstawiając przewidywaną wartość po prawej stronie równania).

3.3 ĆWICZENIA

Procedury numeryczne

Obowiązkowe

1. Wyprowadź równanie 3.2.6.
2. Użyj programu IVP, by wyznaczyć funkcję będącą rozwiązaniem równania różniczkowego $dy/dx = y, y(0) = 1$ z wykorzystaniem 3 sche-

matów: Eulera, Adamsa-Bashfortha 3-go rzędu i Rungego-Kutty 4-go rzędu. Narysuj wyniki wraz z rozwiązaniem analitycznym $y = e^x$.

3. Zmodyfikuj program tak, aby do pliku wyjściowego wypisywane były wartości $y(1)$ jako funkcje parametru siatki $-\log_{10}(h)$ (w skali logarytmicznej), dla trzech badanych schematów. Sprawdź zbieżność wyników ze względu na parametr siatki. Sklasyfikuj badane schematy ze względu na ich jakość i efektywność.
4. Przyjrzyj się konstrukcji programu IVP2D i zauważ w jaki sposób algorytmu 1D przystosowano do rozwiązania równania różniczkowego 2-go rzędu. Użyj tego programu do rozwiązania równania oscylatora harmonicznego $d^2y/dx^2 = -k \cdot y$. Narysuj funkcję $y(x)$ i zinterpretuj wynik. Dodaj w kodzie linię obliczającą całkowitą energię oscylatora i wypisz wynik do pliku. Dla jakiego zakresu parametru siatki energia jest zachowana? Obliczenia powtórz dla dwóch schematów, Eulera i Runge-Kutty.

Uzupełniające

1. Zmodyfikuj program IVP2D, tak aby rozwiązywał równanie różniczkowe $d^2y/dx^2 - \beta \cdot dy/dx + k \cdot y = A \sin(\omega \cdot x)$ (oscylator wymuszony). Dla ustalonych parametrów wahadła tłumionego (stała elastyczna, masa, stała tłumienia) i odpowiednio dobranego kroku czasowego (parametru siatki), wykonaj obliczenia dla różnych częstości wymuszenia. Narysuj funkcje $y(x)$ i zaobserwuj zakresy czasu drgań niestabilnych i ustabilizowanych. Zaobserwuj i przedyskutuj zachowanie w czasie energii oscylacji (kinetyczna plus potencjalna). Spróbuj znaleźć kilka punktów na krzywej rezonansowej w okolicach jej maksimum oraz dla częstości wymuszenia odległych od rezonansu (większych i mniejszych). Zwróć uwagę, że dla dużych częstości wymuszenia być może należy użyć mniejszego kroku czasowego (jak to sprawdzić?).

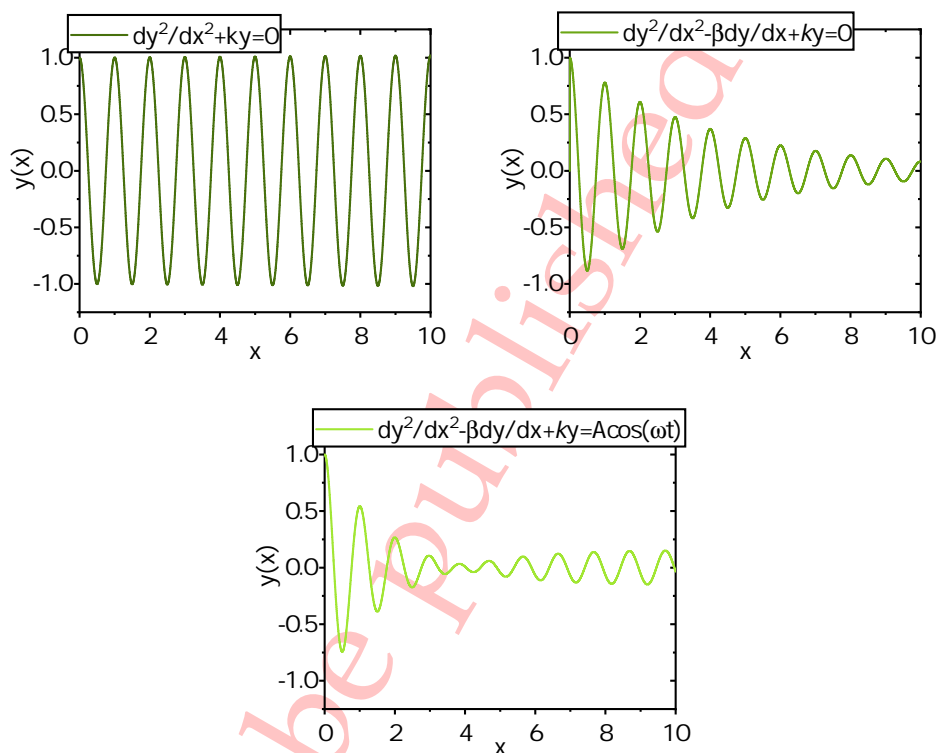
Zawansowane

1. Rozważ przypadek sprzężonych oscylatorów harmonicznym opisanych w Rozdz. ???. Zapoznaj się z tym rozdziałem i wykonaj ćwiczenia tam zaproponowane.

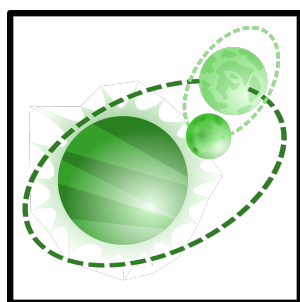
Wahadło matematyczne

1. Przetestuj program PENDULUM przez porównanie okresu małych drgań z rozwiązaniem analitycznym.

PROJEKT: WAHADŁO JAKO WZORZEC JEDNOSTKI CZASU



- Wykonaj kilka obliczeń próbnych dla różnych energii całkowitych wahadła (energia całkowita wyrażona jest w jednostkach maksymalnej energii potencjalnej) i narysuj zależności kąta i prędkości kątowej od czasu. Zaproponuj algorytm automatycznego wyznaczania okresu oscylacji i zaimplementuj go w programie (wskazówka: w tym celu łatwiej jest użyć prędkości kątowej a nie kąta - dlaczego?). Wyznacz funkcję $(T(E) - T_0)/T_0$ dla 3 zakresów energii: $\epsilon = (0.001 - 0.01)$, $\epsilon \approx 1.0$, $\epsilon \gg 1.0$, narysuj i przedyskutuj wyniki.
- Skup uwagę na przypadku $\epsilon = 1.0$ i wykonaj obliczenia dla znacznie różniących się (o kilka rzędów) parametrów siatki. Narysuj zależności kąta od czasu i wyjaśnij wpływ parametru siatki na te zależności.



4

PROJEKT: UKŁAD PLANETARNY

Wymagania: prawo powszechnego ciążenia Newtona, równania ruchu Newtona.

Dynamika molekularna (MD - *Molecular Dynamics*) jest bardzo popularną metodą symulacji komputerowej w fizyce. Jest to po prostu rozwiązywanie równań ruchu dla układu wielu cząstek albo klasycznych (newtonowskich), albo relatywistycznych, od skali atomowej aż po kosmiczną. Rygorystyczne rozwiązanie analityczne istnieje tylko dla układu 2 cząstek lub nieco większej liczby, ale specjalnej symetrii, dlatego symulacja komputerowa wydaje się być jedyną możliwością teoretycznej analizy takich układów. Symulacja MD jest popularną metodą studiowania dynamiki i termodynamiki układów wieloatomowych, ale jest używana także w skali kosmicznej (ruch planet, gwiazd, galaktyk). Wszystko, czego potrzebujemy do konstrukcji kodu, to prawo oddziaływania między obiektami oraz równania ruchu (Newtona bądź relatywistyczne). W tym projekcie rozważymy prosty układ 2 planet w polu centralnym nieruchomej gwiazdy. Poznamy algorytm Verleta, w jego najprostszej postaci, specyficzny dla symulacji MD. Posłuży on nam do rozwiązania złożonego zagadnienia wartości początkowej.

4.1 PROBLEM FIZYCZNY: RUCH PLANET

Równania ruchu planet, zasada zachowania energii i momentu pędu.

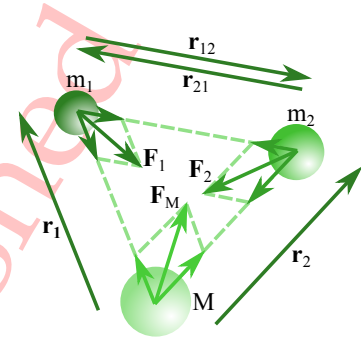
Siły działające na planety pochodzące od unieruchomionej gwiazdy znajdującej się w środku układu współrzędnych oraz od drugiej planety poruszającej się w tej samej płaszczyźnie to:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1 &= -G \frac{m_1 M}{r_1^2} \hat{\mathbf{r}}_1 + G \frac{m_1 m_2}{r_{12}^2} \hat{\mathbf{r}}_{12} \\ \mathbf{F}_2 &= -G \frac{m_2 M}{r_2^2} \hat{\mathbf{r}}_2 + G \frac{m_2 m_1}{r_{21}^2} \hat{\mathbf{r}}_{21} \end{aligned} \quad (4.1.1)$$

gdzie $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$, a $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$ jest wektorem jednostkowym związanym z \mathbf{r} .

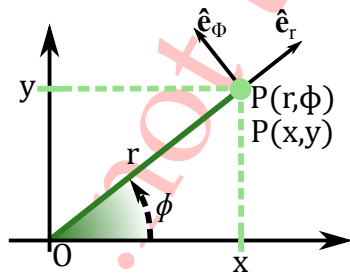
Równania ruchu Newtona dla dwóch planet w rozważanym układzie mają postać:

$$\begin{cases} d\mathbf{p}_1/dt = \mathbf{F}_1 \\ d\mathbf{r}_1/dt = \mathbf{p}_1/m_1 \\ d\mathbf{p}_2/dt = \mathbf{F}_2 \\ d\mathbf{r}_2/dt = \mathbf{p}_2/m_2 \end{cases} \quad (4.1.2)$$



Rysunek 18: Wszystkie ciała masywne przyciągają się, zgodnie z prawem powszechnego ciążenia Newtona.

4.2 REDUKCJA RUCHU POJEDYNCZEJ PLANETY Z POLU CENTRALNYM DO JEDNEGO WYMIARU



Rysunek 19: Konstrukcja lokalnego prostokątnego układu współrzędnych do reprezentowania wektorów w układzie polarnym.

Ćwiczenia związane z tym projektem rozpoczynają się od analizy ruchu pojedynczej planety w polu centralnym gwiazdy. Ruch taki można zredukować do jednego wymiaru, co pomaga zrozumieć jego właściwości. Odpowiednia transformacja pokazana jest poniżej.

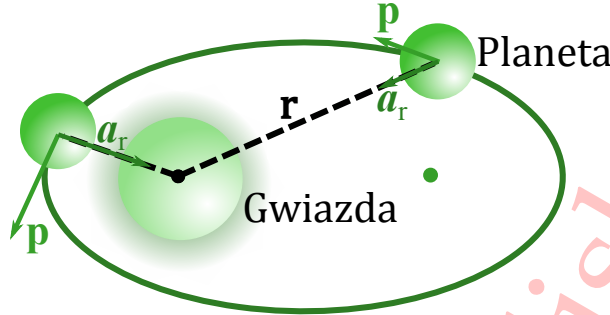
Rozpocznijmy od klasycznego Hamiltonianu układu (energia całkowita):

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - G \frac{mM}{r} \quad (4.2.1)$$

Jeśli \mathbf{p} wyrazimy we współrzędnych polarnych (patrz Rys.19), $\mathbf{p} = p_\phi \hat{\mathbf{e}}_\phi + p_r \hat{\mathbf{e}}_r$, gdzie $\hat{\mathbf{e}}_\phi, \hat{\mathbf{e}}_r$ są wektorami jednostkowymi lokalnego (związanego z planetą) prostokątnego układu współrzędnych, wówczas Hamiltonian przyjmuje postać:

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{(p_\phi r)^2}{2mr^2} - G \frac{mM}{r} \quad (4.2.2)$$

4.2 REDUKCJA RUCHU POJEDYNCZEJ PLANETY Z POLU CENTRALNYM DO JEDNEGO WYMIARU



Rysunek 20: Schemat ruchu planety po orbicie eliptycznej względem gwiazdy ulokowanej w jednym z ognisk elipsy, zgodnie z I prawem Keplera

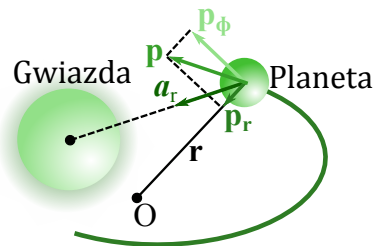
gdzie czynnik r^2 został wprowadzony w liczniku i mianowniku drugiego członu. Ponieważ wielkość $p_\phi r$ jest po prostu momentem pędu planety L , który jest zachowany w polu centralnym, możemy przepisać Hamiltonian w postaci:

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + V_{eff}(r) \quad (4.2.3)$$

gdzie $V_{eff}(r) = \frac{L^2}{2mr^2} - G\frac{mM}{r}$ jest zależną od r efektywną energią potencjalną cząstki w nieinercyjnym układzie odniesienia związanym z wektorem położenia planety. Ta energia potencjalna jest sumą energii grawitacyjnej $-G\frac{mM}{r}$ oraz energii potencjalnej odśrodkowej $\frac{L^2}{2mr^2}$ (obecnej w układzie nieinercyjnym) (Rys.20).

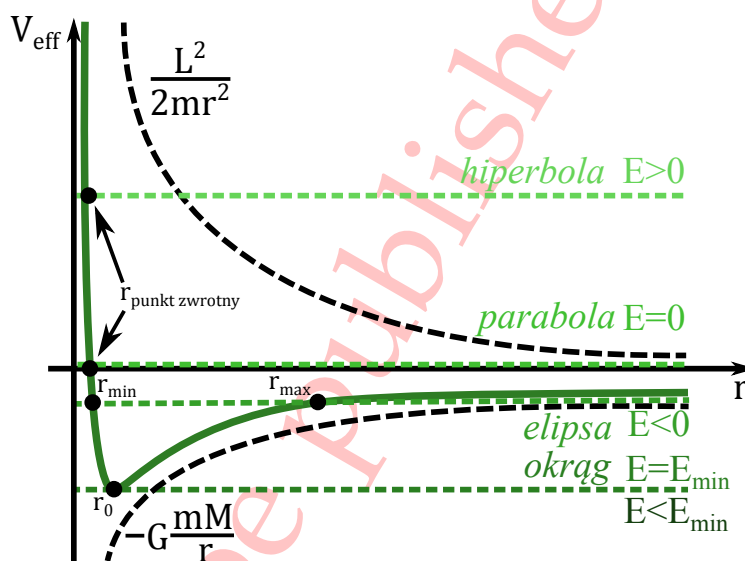
Gdy znany jest Hamiltonian, można napisać kanoniczne równania Hamiltona w jednym wymiarze. Tutaj jednak skupimy się na efektywnym potencjale (energii potencjalnej masy jednostkowej). Dla danej wartości momentu pędu (zachowanego podczas ruchu) nie zmienia się on, jednak energia całkowita ruchu może przyjmować różne wartości. Rysunek 22 pokazuje, jak charakter trajektorii zależy od energii całkowitej względem potencjału efektywnego. Łatwo można zidentyfikować trajektorie kołowe, eliptyczne, paraboliczne i hiperboliczne, co będzie przedmiotem jednego z ćwiczeń.

Warto wspomnieć, że bardzo podobną operację (redukcja układu 3D do 1D) wykonuje się przy rozwiązywaniu kwantowo-mechanicznego zagadnienia atomu wodoru. Także w tym wypadku Hamiltonian 3D redukowany jest do 1D poprzez wprowadzenie potencjału odśrodkowego. Moment pędu



Rysunek 21: W ogólności początek układu współrzędnych może być umieszczony w dowolnym punkcie przestrzeni (niezwiązanym z położeniem gwiazdy)

du jest skwantowany, co reprezentuje orbitalna liczba kwantowa l . Liczba ta pojawia się w członie reprezentującym potencjał efektywny, a więc także indeksuje rozwiązania (stany kwantowe) atomu wodoru.



Rysunek 22: Potencjał efektywny, po formalnej redukcji układu dwuwymiarowego do jednowymiarowego. Jest on sumą dwóch członów: potencjału odśrodkowego $\sim 1/r^2$ oraz grawitacyjnego $\sim -1/r$. Rysunek identyfikuje trajektorie planet w zależności od odpowiadającej im energii całkowitej

4.3 METODY NUMERYCZNE: ALGORYTM VERLETA

Algorytm Verleta to schemat do numerycznego rozwiązywania równań ruchu Newtona dla układu cząstek (dynamika molekularna) i jest najczęściej używany do symulacji MD. Tutaj poznamy jego najprostszą formę, a idea algorytmu zostanie zaprezentowana na przykładzie ruchu jednowymiarowego, jednak tak, jak to miało miejsce w przypadku wcześniej omawianych algorytmów, jego implementacja może być łatwo rozszerzona na wielowymiarowy układ wielu cząstek.

Równanie ruchu Newtona dla masy punktowej m w jednym wymiarze ma postać:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = F/m \quad (4.3.1)$$

gdzie F - siła działająca na cząstkę o masie m , x - współrzędna cząstki na osi X .

Aby wyznaczyć trajektorię w przestrzeni fazowej potrzebna jest także znajomość prędkości $v = dx/dt$.

Wykorzystujemy 3-punktowe formuły na pochodne funkcji (2.2.3, 2.2.4) do wyrażenia przyspieszenia i prędkości, które po przekształceniu prowadzą do formuł rekurencyjnych (algorytm Verleta):

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= 2x_n - x_{n-1} + \tau^2 F/m + O(\tau^4) \\ v_n &= (x_{n+1} - x_{n-1})/(2\tau) + O(\tau^2) \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

gdzie τ jest krokiem czasowym.

Trzeba zauważyć, że jako warunki początkowe zwykle znamy położenie i prędkość (lub pęd) (x_0, v_0) , a więc pojawia się pewna trudność w zapoczątkowaniu 3-punktowego schematu rekurencyjnego, który wymaga znajomości 2 punktów początkowych. Trudność ta może być przezwyciężona np. przez założenie, że w pierwszym kroku ruch jest jednostajnie przyspieszony:

$$x_1 = x_0 + v_0\tau + (F/m)\tau^2/2 + O(\tau^3) \quad (4.3.3)$$

co jest jednak mniej dokładne o 1 rząd wielkości τ i powinno być stosowane ostrożnie. Alternatywą jest wykorzystanie w pierwszym kroku dokładniejszego schematu 1-krokowego (np. Rungego-Kutty).

4.4 ĆWICZENIA

Obowiązkowe

1. (Testowanie programu) Przetestuj program PLANETS na przykładzie ruchu pojedynczej planety po orbicie kołowej. W tym celu zmodyfikuj kod, tak aby jedna z planet była unieruchomiona w dużej odległości i miała małą masę. Sprawdź czy zachowana jest energia i moment pędu i znajdź największy możliwy krok czasowy, przy którym te wielkości są zachowane. Porównaj wyniki z rozwiązaniem analitycznym.
2. (Ruch pojedynczej planety) Dla zadanego momentu pędu narysuj potencjał efektywny i zidentyfikuj trajektorie: kołową, eliptyczną, paraboliczną i hiperboliczną. Wykonaj symulacje ruchu dla tych wszystkich orbit. *Wskazówka:* aby ustawić właściwe warunki początkowe dla różnych energii należy użyć formuły 4.2.2 z radialnym pędem równym zero $p_r = 0$:

$$H = \frac{L^2}{2mr^2} - G \frac{mM}{r} \quad (4.4.1)$$

Wówczas, przy zadanym momencie pędu L , energia staje się funkcją r . Jednakże należy pamiętać, że aby zachować wartość momentu pędu, gdy zmienia się r trzeba zmieniać także transwersalną składową pędu według formuły: $p_\phi = L/r$. W praktyce można ustawić r jako składową x (przy $y = 0$) oraz $p_\phi = p_y$ (przy $p_x = 0$)

3. Dla mocno wydłużonej orbity eliptycznej narysuj zależność energii całkowitej od czasu. Wyjaśnij zaobserwowane zachowanie.
4. Włącz ruch drugiej planety. Wybierz jeden z sugerowanych scenariuszy i wykonaj dla niego symulację:
 - a) "Układ planetarny" - ruch planet o różnych masach po niezależnych orbitach, w polu sił centralnych gwiazdy;
 - b) "Zderzenie planet" - ruch planet po zbliżonych orbitach, lecz w przeciwnych kierunkach, obserwacja zderzenia i jego skutków;
 - c) "Planeta z księżycem" - Potraktowanie jednej z planet jako satelity drugiej, lub podwójny układ identycznych planet na orbicie gwiazdy
 - d) "Planeta w układzie gwiazdy podwójnej" - potraktowanie jednej z planet jako zafiksowanej ciężkiej gwiazdy i obserwacja ruchu drugiej planety pomiędzy dwiema gwiazdami;
 - e) "Gwiazda podwójna" - potraktowanie obu planet jako ciężkich gwiazd (zredukowanie masy gwiazdy centralnej do małej wartości) i obserwacja dynamiki układu dla różnych warunków początkowych;
 - f) Scenariusz własny.

Aby mieć pewność, że obserwowane efekty mają charakter fizyczny, a nie są spowodowane artefaktami numerycznymi, dla każdej symulacji należy śledzić zachowanie w czasie energii (powinna być zawsze zachowana) oraz momentu pędu (jeśli powinien być zachowany w danym układzie). Jeśli nie jest spełniony warunek zachowania energii (lub momentu pędu), należy odpowiednio zmienić parametry obliczeniowe.

Uzupełniające

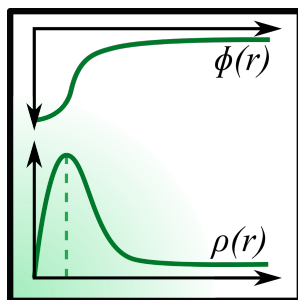
1. "Ruch zaburzony" Zmieniaj masę i położenie zafiksowanej planety i obserwuj jej wpływ na trajektorię drugiej planety. Sprawdź zachowanie energii i momentu pędu (czy obie te wielkości powinny być zachowane?). Spróbuj scharakteryzować wpływ zaburzenia na ruch planety.

Zaawansowane

1. Poprzez wprowadzenie odpowiednich wartości numerycznych zaobserwuj wpływ obecności Wenus (lub Marsa) na trajektorię Ziemi (wskazówka: położenie Wenus (Marsa) należy zafiksować). Zauważ, że okres obiegu Ziemi wokół Słońca wynosi 365 dni, jaki powinien być w tym wypadku krok czasowy?
2. Dla wybranej orbity eliptycznej pojedynczej planety sprawdź 3-cie prawo Keplera.
3. Wybór kroku czasowego symulacji MD jest zawsze kompromisem pomiędzy czasem symulacji a dokładnością. Z tego punktu widzenia optymalnym wyborem jest największy krok zapewniający dobrą dokładność. Są jednak sytuacje, gdy stały krok czasowy powoduje niepotrzebne zużycie zasobów komputerowych. Tak jest np. w przypadku bardzo wydłużonej orbity eliptycznej (patrz obowiązkowe Ćwiczenie 3), w znacznej części orbity ruch jest niemal wzdłuż prostej, gdzie wystarczający jest duży krok czasowy, a sytuacja jest zupełnie inna w pobliżu gwiazdy (peryhelium), gdzie występują gwałtowne zmiany wartości i kierunku prędkości, skąd potrzebny jest mały krok czasowy. Ustawienie stałego kroku czasowego wymagałoby zastosowanie tego najmniejszego (dla perhelium), co spowodowałoby niepotrzebne wydłużenia czasu CPU. Ponadto w przypadku układów wielu cząstek często nie wiadomo gdzie będzie potrzebny mały krok.

W świetle powyższych uwag, zaproponuj algorytm, w którym krok czasowy byłby zmieniany dynamicznie, w zależności od potrzeby (wskazówka: wykorzystaj zachowanie prędkości). Zaimplementuj ten algorytm i przetestuj na przykładzie ćwiczenia 3 (z grupy obowiązkowych) z wydłużoną orbitą eliptyczną.

...not to be published



PROJEKT: GRAWITACJA WENĄTRZ GWIAZDY

***Wymagania wstępne:** Równanie Poissona dla sferycznie symetrycznego rozkładu gęstości ładunku, analogia do grawitacji.*

Projekt ten poświęcony jest zagadnieniu wartości brzegowych (BVP - *Boundary Value Problem*) w równaniach różniczkowych zwyczajnych. Rozważane będzie pole grawitacyjne wewnątrz gwiazdy o modelowym rozkładzie masy. Problem jest formalnie równoważny zagadnieniu pola elektrycznego wewnątrz atomu wieloelektronowego (wkład Hartree). Dzięki wysokiej symetrii (sferycznej) układu, równanie różniczkowe cząstkowe typu Poissona redukuje się tu do równania różniczkowego zwyczajnego 2-go rzędu. Inaczej niż w przypadku zagadnienia wartości początkowej, dwa warunki, potrzebne aby jednoznacznie określić rozwiązanie, dane są na dwóch końcach przedziału zmiennej niezależnej (a nie na początku). Zwykle wartości funkcji dane są na końcach przedziału (stąd nazwa, BVP). Warto już w tym miejscu zwrócić uwagę na fakt, że dla równania takiego typu, wraz z pewnym rozwiązaniem, rozwiązaniem jest także cała rodzina funkcji różniących się o funkcję liniową (określoną przez 2 parametry o dowolnych wartościach) i właśnie warunki brzegowe eliminują z tej rodziny wszystkie funkcje za wyjątkiem jednej. Spróbujemy wykorzystać bardzo dokładny 3-punktowy rekurencyjny algorytm Numerova-Cowellsa, który omówimy dalej w tym rozdziale, żeby zobaczyć z jakim problemem mamy tu do czynienia. Aby rozpocząć procedurę rekurencyjną w schemacie 3-punktowym, konieczna jest znajomość wartości funkcji w dwóch punktach na jednym z brzegów przedziału. Dla potrzeb tego projektu użyjemy w tym celu wartości analitycznej, ale okaże się, że to nie jest wystarczające, ponieważ rozwiązanie równania różniczkowego po dyskretyzacji jest nieco inne niż analityczne. Tak więc napotkamy problem, że do rozwiązania mieszają się funkcje liniowe różniące się znacznie nawet przy niewielkich zmianach wartości funkcji

w drugim punkcie. W rozpatrywanym zagadnieniu istnieje łatwe rozwiązanie tego problemu, gdyż wiadomo, że rozwiązanie dąży asymptotycznie do stałej w nieskończoności, co pozwala na zastosowanie schematu rekurencyjnego "od końca", tzn. przy odpowiednio dużej odległości dwie początkowe wartości funkcji mają taką samą wartość. Jednakże taka sytuacja nie zawsze ma miejsce, i schematu rekurencyjnego nie można zastosować. Interesującą alternatywą jest tu potraktowanie 3-punktowego schematu rekurencyjnego jako trójdziagonalnego liniowego układu równań, w którym niewiadomym są wartości funkcji na punktach siatki (ze znanymi wartościami na brzegach przedziału) i rozwiązanie go przy pomocy algorytmu Eliminacji Gaussa z Podstawieniem Zwrotnym opisanego w Rozdz. 7.

Niniejszy projekt jest również wstępem do projektu zaawansowanego opisanego w Rozdz. ??, w którym grawitacja wewnątrz gwiazdy jest znajdowana wraz z rozkładem gęstości masy w procedurze samouzgodnionej.

5.1 PROBLEM FIZYCZNY: POLE GRAWITACYJNE OD CIĄGŁEGO ROZKŁADU GĘSTOŚCI MASY

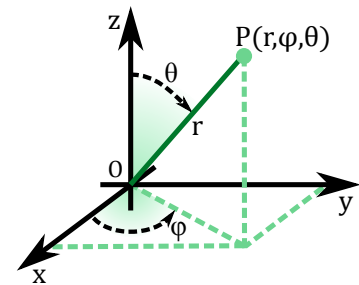
Równanie Poissona i przykład jego zastosowania.

Równanie Poissona:

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r}) \quad (5.1.1)$$

jest w ogólności równaniem różniczkowym cząstkowym, które wraz z warunkami brzegowymi tworzy zagadnienie wartości brzegowych (BVP), którego rozwiązaniem jest potencjał elektryczny $\phi(\mathbf{r})$ odpowiadający danemu rozkładowi ładunku $\rho(\mathbf{r})$. Formalnie identyczne równanie (ze stałą grawitacyjną G zamiast czynnika -4π) opisuje pole grawitacyjne od rozkładu gęstości masy $\rho(\mathbf{r})$.

Rozpocznijmy od zapisania operatora Laplace'a w równaniu 5.1.1 we współrzędnych sferycznych (patrz Rys. 23) :



Rysunek 23: Współrzędne sferyczne w układzie 3D

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \varphi^2} \quad (5.1.2)$$

5.1 PROBLEM FIZYCZNY: POLE GRAWITACYJNE OD CIĄGŁEGO ROZKŁADU GĘSTOŚCI MASY

Ponieważ przy symetrii sferycznej wszystkie pochodne cząstkowe potencjału po kątach znikają, równanie Poissona przyjmuje prostą jednowymiarową postać:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi(r)}{dr} \right) = -4\pi\rho(r) \quad (5.1.3)$$

Standardowe podstawienie $\phi(r) = \varphi(r)/r$ upraszcza jeszcze bardziej formułę (wyprowadź ten wzór):

$$\frac{d^2\varphi(r)}{dr^2} = -4\pi r\rho(r) \quad (5.1.4)$$

Jest to równanie różniczkowe zwyczajne drugiego rzędu, niejednorodne. Jak już dyskutowano wcześniej, takie równanie wymaga dwóch warunków, by jednoznacznie określić rozwiązanie. W przypadku równań ruchu (zagadnienie wartości początkowej) były to wartość funkcji i jej pochodnej na początku ewolucji, co pozwalało rozpocząć 3-punktowy schemat rekurencyjny (np. algorytm Verleta). Tutaj mamy do czynienia z warunkami brzegowymi, tzn. wartości funkcji znane są na brzegach przedziału zmiennej niezależnej. To powoduje, że zastosowanie schemtu 3-punktowego staje się bardzo niewygodne, ponieważ wymaga dodatkowego warunku.

Wykorzystamy powyższą formułę do znalezienia potencjału grawitacyjnego wewnątrz gwiazdy. Założymy modelowy radialny rozkład gęstości masy:

$$\rho(r) = \frac{1}{8\pi} e^{-r} \quad (5.1.5)$$

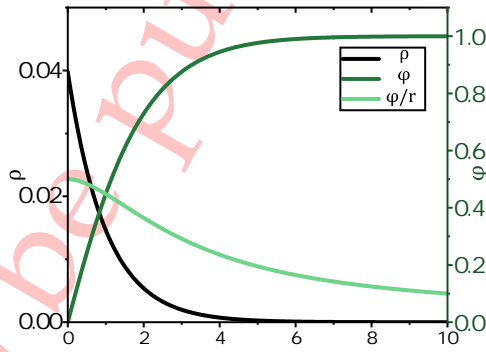
który prowadzi do całkowitej masy gwiazdy równej 1 (masa gwiazdy staje się jednostką masy):

$$M = \int \rho(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \int_0^\infty \rho(r) 4\pi r^2 dr = 1 \quad (5.1.6)$$

Analitycznym rozwiązaniem równania jest funkcja:

$$\varphi(r) = 1 - \frac{r+2}{2} e^{-r} \quad (5.1.7)$$

skąd znajdujemy potencjał $\phi(r) = \varphi(r)/r$ (zauważ, że potencjał jest wyrażony w specyficznych jednostkach, w których jednostką masy jest masa



Rysunek 24: Rozwiązanie analityczne równania 5.1.3

gwiazdy). Aby uzyskać drugi warunek, konieczny do rozpoczęcia schematu Numerowa-Cowellsa (opisanego w następnej sekcji), potrzebne są pewne dodatkowe rozważania. Jednak dla celów tego projektu posłużymy się w tym celu rozwiązaniami analitycznymi (np. znajdziemy wartości $\varphi(r=0)$ i $\varphi(r=h)$)

5.2 METODY NUMERYCZNE: ZAGADNIENIE WARTOŚCI BRZEGOWYCH DLA RÓWNAŃ RÓŻNICZKOWYCH ZWY- CZAJNYCH

5.2.1 Algorytm Numerowa-Cowellsa

Rozpatrujemy klasę równań różniczkowych zwyczajnych 2-go rzędu, liniowych, niejednorodnych, które opisują wiele układów fizycznych (w tym niemal wszystkie dyskutowane dotąd):

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + k^2(x)y = S(x) \quad (5.2.1)$$

gdzie $k^2(x)$ - funkcja rzeczywista, a $S(x)$ - jest członem "ciągnącym" (*driving term*) prowadzącym do niejednorodności równania.

Wykorzystując rozwinięcie (2.2.1), można zapisać:

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y_n'' + \frac{h^2}{12} y_n'''' + O(h^4) \quad (5.2.2)$$

Po prawej stronie równania za 2-gą pochodną można podstawić wyrażenie z równania różniczkowego:

$$y_n'' = (-k^2 y)_n + S_n \quad (5.2.3)$$

natomiast 4-tą pochodną można przedstawić w postaci 3-punktowej formuły numerycznej zastosowanej do $y''(x)$:

$$y_n'''' = -\frac{(k^2 y)_{n+1} - 2(k^2 y)_n + (k^2 y)_{n-1}}{h^2} + \frac{S_{n+1} - 2S_n + S_{n-1}}{h^2} + O(h^2) \quad (5.2.4)$$

co, jeśli podstawimy do (5.2.2), prowadzi do numerycznej formuły (algorytm Numerowa-Cowellsa):

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{h^2}{12} k_{n+1}^2\right) y_{n+1} - 2 \left(1 - \frac{5h^2}{12} k_n^2\right) y_n + \left(1 + \frac{h^2}{12} k_{n-1}^2\right) y_{n-1} = \\ = \frac{h^2}{12} (S_{n+1} + 10S_n + S_{n-1}) + O(h^6) \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

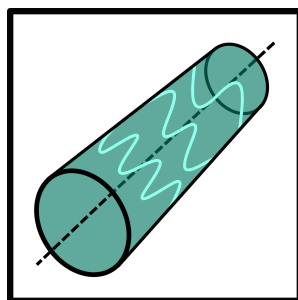
Zauważmy, że takie podstawienie nie obniża niepewności ($O(h^4)$), i w ostatecznej formule pozostaje ona bardzo mała ($O(h^6)$). Ważną zaletą tego schematu jest, że może on być potraktowany jako formuła rekurencyjna "w przód" lub "w tył", co zostanie wykorzystane w projekcie. Formuła może być również potraktowana jako trójdzielny układ równań, który można efektywnie rozwiązywać z zastosowaniem algorytmu Eliminacji Gaussa z Podstawieniem Zwrotnym (patrz Rozdz. 7).

5.3 ĆWICZENIA

Obowiązkowe

1. Wyprowadź formułę 5.2.5.
2. Rozwinięcie potęgowe wyrażenia 5.1.7 prowadzi do przybliżenia (dla małego h) $\varphi(h) = 0.5h$ (sprawdź). Wykorzystaj to w programie BVP1D (*Boundary Value Problem in 1D*), aby ustawić drugi punkt w schemacie 5.2.5. Wyznacz funkcję $\varphi(r)$ dla niewielkich zmian $\varphi(h)$, powiedzmy w zakresie $0.4h - 0.6h$ (h powinno być dostatecznie małe aby zapewnić dużą dokładność obliczeń). Obserwuj i zinterpretuj zachowanie funkcji $\varphi(r)$ w porównaniu z rozwiązaniem analitycznym (narysuj obie funkcje na jednym wykresie). Znajdź współczynnik przy h , przy którym obie funkcje pokrywają się. Czy współczynnik ten jest taki sam, jeśli zmienimy h ?
3. Zmodyfikuj kod, tak aby schemat Numerowa działał "w tył", tzn. zaczynając formułę rekurencyjną w "nieskończoności" (w praktyce dostatecznie daleko, ustaw odpowiednio wartości początkowe). Porównaj wyznaczoną funkcję z rozwiązaniem analitycznym, wyciągnij wnioski.
4. Rozszerz kod o obliczenia pola grawitacyjnego $a_g = -d\varphi(r)/dr$. Zakładając, że promień gwiazdy to odległość od środka do punktu gdzie siła jest maksymalna (tak jest w przypadku planety, a także w ten sposób definiuje się promień atomu), znajdź promień gwiazdy.

...not to be published



6

PROJEKT: MODY NORMALNE W FALOWODZIE CYLINDRYCZNYM

Wymagania wstępne: fale, równanie falowe, fale stojące, stacjonarne równanie falowe.

Zagadnienie własne (EVP - *Eigenvalue Problem*) pojawia się np. w opisie fal stojących (mechanicznych bądź elektromagnetycznych) lub w stacjonarnych układach kwantowych. Rozwinięto wiele technik teoretycznych rozwiązywania tego problemu. Tutaj zaprezentujemy metodę numeryczną opartą na schemacie rekurencyjnym rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych: metodę strzałów. Choć wydaje się ona prosta i mało użyteczna, ponieważ dotyczy zagadnień 1-wymiarowych, czyli może być stosowana tylko do układów jednowymiarowych lub o wysokiej symetrii, wykorzystywana jest obecnie we współczesnej nauce, np. do wyznaczania struktur elektronowych atomów. W tym projekcie rozpatrywany będzie prosty klasyczny układ, cylindryczny falowód (np. światłowód) w którym należy wyznaczyć mody normalne fali skalarnej.

6.1 PROBLEM FIZYCZNY: FAŁA STOJĄCA

Stacjonarne równanie falowe w symetrii cylindrycznej, zagadnienie własne, inne zagadnienia własne w fizyce.

Zacznijmy od przypomnienia równania falowego w 3 wymiarach, dla fali skalarnej $\phi(\mathbf{r}, t)$:

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{v_p^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \quad (6.1.1)$$

gdzie $v_p = k/\omega$ to prędkość fazowa, $k = (2\pi)/\lambda$ jest liczbą falową, a $\omega = (2\pi)/T$ częstością kołową.

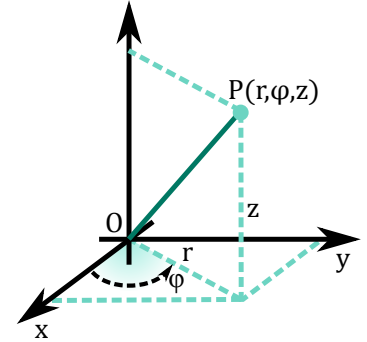
Zapiszemy Laplasjan w układzie współrzędnych cylindrycznych (patrz Rys. 25) :

$$\nabla^2 \phi = \left(\underbrace{\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r}}_{\frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right)} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right) \quad (6.1.2)$$

Z powodu symetrii osiowej wszystkie pochodne cząstkowe po φ oraz po z znikają i równanie falowe przyjmuje postać:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} - \frac{1}{v_p^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \quad (6.1.3)$$

Pole fali skalarnej nadal pozostaje funkcją współrzędnej radialnej i czasu $\phi(r, t)$, jednak w przypadku cylindrycznego falowodu istnieją warunki brzegowe: $\phi(r = 1, t) = 0$, $\phi(r = 0, t) = 1$, $(\partial \phi(r, t) / \partial r)|_{r=0} = 0$, co powoduje, że spodziewamy się fali stojącej wzdłuż r (przyjmujemy tu promień falowodu = 1 oraz korzystamy z dowolności normowania funkcji falowej). W takiej sytuacji funkcję falową można przedstawić w postaci iloczynu funkcji zależnej tylko od czasu i funkcji zależnej tylko od promienia: $\phi(r, t) = \phi_r(r) \phi_t(t)$. Po wstawieniu tego iloczynu do równania 6.1.3 i po prostych przekształceniach otrzymujemy:



Rysunek 25: Współrzędne cylindryczne

$$\frac{1}{k^2} \left[\frac{d^2 \phi_r(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d \phi_r(r)}{dr} \right] = \frac{1}{\omega^2} \frac{d^2 \phi_t(t)}{dt^2} \quad (6.1.4)$$

W powyższym równaniu rozseparowaliśmy także dwie stałe, których ilorazem jest prędkość fazowa, ω - charakteryzująca falę w dziedzinie czasu i k w dziedzinie położeń. W ten sposób po lewej stronie równania 6.1.4 mamy tylko funkcję zależną od r a po prawej od t . Oznacza to, że obie strony muszą być równe stałej, a fakt, że lokalnie w przestrzeni spodziewamy się oscylacji harmonicznego wskazuje, że wartość tej stałej jest -1 (wówczas z części czasowej otrzymamy równanie oscylatora harmonicznego).

Opisane powyżej rozumowanie prowadzi do stacjonarnego równania falowego:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right) \phi(r) = -(n(r)k)^2 \phi(r) \quad (6.1.5)$$

z warunkami brzegowymi $\phi(r=1)=0$, $\phi(r=0)=1$, $(d\phi(r)/dr)|_{r=0}=0$. Dodatkowo uwzględniony został fakt, że w ośrodku (jak np. w światłowodzie) liczba falowa może być lokalnie zmodyfikowana przez współczynnik refrakcji $n(r)$: $k'(r) = n(r)k$.

Jest to zagadnienie własne, a zatem spodziewamy się rozwiązań w postaci sekwencji par $\{(\phi_n(r), k_n)\}$, czyli tzw. modów normalnych i odpowiadających im liczb falowych k . Poprzez standardowe podstawienie $\phi(r) = \varphi/\sqrt{r}$ równanie uprasza się do postaci, do której może być zastosowany algorytm Numerova-Cowellsa (sprawdź to):

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{1}{4r^2} + (n(r)k)^2 \right) \right] \varphi(r) = 0 \quad (6.1.6)$$

Zauważ, że asymptotyczne zachowanie funkcji $\varphi(r)$ w granicy $r \mapsto 0$ musi być $\sim \sqrt{r}$ (patrz trzeci warunek brzegowy). Fakt ten wykorzystamy, żeby ominąć osobliwość w członie $1/(4r)^2$ w obliczeniach numerycznych.

6.2 METODY NUMERYCZNE: ZAGADNIENIE WŁASNE

6.2.1 Metoda strzałów

Idea metody strzałów jest prosta. Przeprowadzamy procedurę rekurencyjną (jak np. Numerova-Cowellsa) dla pewnej próbnej wartości k^2 , rozpoczynając od jednego z końców przedziału zmiennej niezależnej. Gdy drugi koniec jest osiągnięty, sprawdzamy wartość funkcji. Jeśli spełnia ona warunek brzegowy, wówczas typowana wartość k^2 jest wartością własną. W praktyce problem sprowadza się do znalezienia miejsc zerowych funkcji: $\varphi_{r=1}(k^2)$.

W przypadku studni kwantowej mamy również do czynienia z zagadnieniem własnym (zobacz Rozdz. 1):

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = \varepsilon \psi(x) \quad (6.2.1)$$

jednak tutaj problem jest nieco bardzo skomplikowany. Przy całkowaniu równania w głąb obszaru klasycznie zabronionego (ujemna energia kinetyczna), gdy typowana energia własna różni się nieco od prawdziwej (nawet bardzo niewiele), pojawia się szybko rosnące rozwiązanie wykładnicze i bardzo trudno jest "trafić" we właściwą jej wartość. Dlatego w tym przypadku należy rozwijać procedurę rekurencyjną z obu brzegów przedziału zmiennej niezależnej, tzn. zawsze od wewnątrz obszaru klasycznie zabronionego w kierunku obszaru dozwolonego. Kryterium znalezienia wartości własnej jest możliwość gładkiego zszycia tych dwóch rozwiązań w wybranym punk-

cie kontrolnym, który powinien znajdować się w obszarze klasycznie dozwolonym (zauważ, że taki sam warunek zastosowano w Rozdz. 1 dla prostokątnej studni, patrz Rys. 7). Ponieważ stany kwantowe mogą być zawsze formalnie dowolnie normowane, tak że dwa rozwiązania stykają się w punkcie kontrolnym, trzeba zastosować drugi warunek, tj. ich pochodne muszą być takie same, co przy 2-punktowym schemacie na pochodną prowadzi do równania:

$$\frac{\psi_{<}(x_m - h) - \psi_{<}(x_m)}{h} = \frac{\psi_{>}(x_m - h) - \psi_{>}(x_m)}{h} \quad (6.2.2)$$

Redukujemy h oraz dzielimy obie strony przez $\psi_{>}(x_m)$ (lub $\psi_{<}(x_m)$), aby wyrażenia po obu stronach były typowo równe 1. Niewielkie przekształcenia prowadzą do kryterium:

$$\frac{1}{\psi_{<}(x_m)} [\psi_{<}(x_m - h) - \psi_{>}(x_m - h)] = 0 \quad (6.2.3)$$

gdzie $\varphi_{<}$ i $\varphi_{>}$ to znalezione rekurencyjnie funkcje, odpowiednio "od lewej" i "od prawej", a x_m to punkt kontrolny.

W przeciwieństwie do metody opisanej w Rozdz. 1 (dla studni prostokątnej), ta metoda może posłużyć do rozwiązania zagadnienia własnego dla studni o dowolnym kształcie, jeśli nie zawiera wewnątrz barier potencjału. Metoda zostanie wykorzystana w jednym z zaawansowanych projektów (patrz Rozdz. ??).

6.3 ĆWICZENIA

Obowiązkowe

1. Wykorzystanie metody strzałów w rozważanym problemie wiąże się z pewnymi komplikacjami, mianowicie, chociaż znamy początkową wartość funkcji $\varphi(r=0) = 0$, człon multiplikatywny w stacjonarnym równaniu falowym zawiera osobliwość, z powodu składowej $1/(4r^2)$. Aby ominąć tę osobliwość musimy rozpocząć procedurę rekurencyjną w pewnej małej odległości od zera $r = \varepsilon$. Tak więc, pojawiają się w zasadzie dwa parametry kontrolne: ε oraz h (parametr siatki). Jednakże, aby uprościć pracę obliczeniową, użyjemy tylko jednego parametru, h , i rozpoczniemy procedurę rekurencyjną w $r = h$. Przy takim podejściu wystarczy zbadać zbieżność wyników tylko ze względu na parametr siatki. Inną kwestią jest jakie zadać wartości funkcji w punktach $r = h$ i $r = 2h$ (dwie wartości początkowe są potrzebne żeby rozpocząć 3-punktowy schemat). W tym celu wykorzystamy fakt, że asymptotyczne zachowanie funkcji $\varphi(r)$ jest znane: $\varphi(r \rightarrow 0) \rightarrow \sqrt{r}$ (patrz dyskusja

problemu, powyżej). Ponieważ funkcja może być dowolnie normowana, możemy zadać wartości $\varphi(h) = a\sqrt{h}$ and $\varphi(h) = a\sqrt{2h}$, gdzie a jest dowolnym współczynnikiem.

Uruchom program WAVEGUIDE i przetestuj zbieżność wyników ze względu na parametr siatki h .

2. Oblicz wartości własne liczby falowej i porównaj wyniki z wartościami analitycznymi: 2.404826, 5.520078, 8.653728, 11.791534. Czy jest możliwe uzyskanie z obliczeń numerycznych dokładnych wartości analitycznych? (wskazówka: zauważ, że dwa parametry kontrolne wpływają na wyniki: parametr siatki h w przestrzeni rzeczywistej oraz niepewność w procedurze znajdowania miejsc zerowych.)
3. Rozszerz kod, tak aby znajdował funkcje radialne amplitud modów normalnych. Narysuj te funkcje na jednym wykresie.

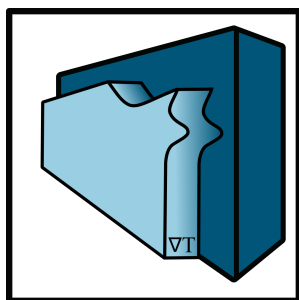
Uzupełniające

1. Zmodyfikuj kod, tak aby wyznaczał energie własne oraz funkcje własne nieskończonej studni kwantowej i/lub mody normalne (funkcje i liczby falowe) dla struny uwiązanej na obu końcach. Porównaj wyniki z analitycznymi.
2. Dla struny z poprzedniego ćwiczenia rozważ sytuację niejednorodnego rozkładu masy (np. liniowego) i zbadaj jego wpływ na wyniki.

Zaawansowane

1. Rozważ przypadek niejednorodnego ale w dalszym ciągu osiowo symetrycznego współczynnika refrakcji $k(r) = n(r) * k_c$, gdzie k_c jest liczbą falową w próżni, a $n(r)$ jest radialnym rozkładem współczynnika refrakcji (nie może on przekroczyć wartości 2.0 a jego wartość brzegu falowodu musi być równa 1.0 - próżnia). Jak różne funkcje $n(r)$ wpływają na liczby falowe i funkcje modów normalnych? (wypróbuj np. paraboliczny lub wykładniczy rozkład).
2. Zmodyfikuj kod, tak aby wyznaczał poziomy energetyczne prostokątnej studni kwantowej dyskutowanej w Rozdz. 1, porównaj wyniki z wynikami uzyskiwanymi z programu QWELL.

...not to be published



PROJEKT: WŁAŚCIWOŚCI ŚCIANY JAKO IZOLATORA TERMICZNEGO

Wymagania wstępne: zjawiska dyfuzji, równanie dyfuzji, dyfuzja stacjonarna.

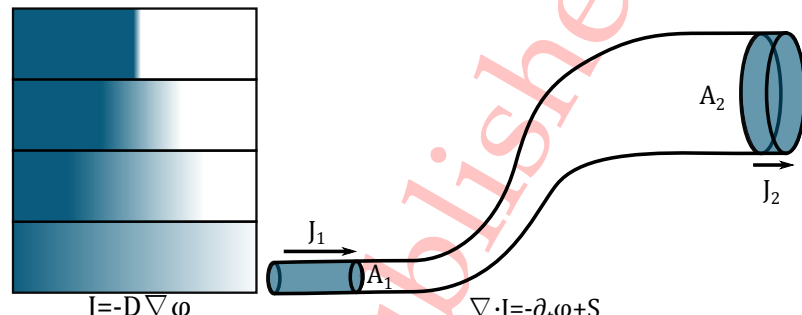
Jest to pierwszy projekt poświęcony równaniom różniczkowym cząstkowym (*Partial Differential Equations* - PDE), i chociaż dzięki symetrii zagadnienie redukuje się do jednego wymiaru, czyli opisywane jest równaniem różniczkowym zwyczajnym, wprowadzona zostanie i przedyskutowana metoda numeryczna typowa dla PDE, **Różnic Skończonych** (*Finite Difference* - FD). Studenci będą studiowali właściwości ściany budynku jako izolatora termicznego, w szczególności jak temperatura w poprzek ściany zależy od rozkładu przewodnictwa cieplnego materiału izolacyjnego. W tym celu wykorzystamy równanie dyfuzji stacjonarnej.

7.1 PROBLEM FIZYCZNY: DYFUZJA STACJONARNA

Dyfuzja stacjonarna w 3D, zagadnienie wartości brzegowych dla równań różniczkowych cząstkowych.

Aby wyprowadzić równanie dyfuzji stacjonarnej, wykorzystamy dwa fundamentalne prawa: prawo Ficka (dyfuzji) oraz prawo ciągłości, opisane odpowiednio równaniami:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -D(\mathbf{r}, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, t) \quad (7.1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + S(\mathbf{r}, t) \quad (7.1.2)$$


(a) Prawo Ficka (b) Prawo ciągłości

Rysunek 26: Dyfuzją rządzi w ogólności dwa prawa. Wielu prawo ciągłości zna jako prawo rządzące mechaniką płynów.

gdzie $\phi(\mathbf{r}, t)$ jest gęstością dyfundującej substancji, $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ jest jej strumieniem (gęstością prądu), $D(\mathbf{r}, t)$ jest współczynnikiem dyfuzji, a $S(\mathbf{r}, t)$ funkcją źródła, tzn. szybkością produkcji gęstości substancji ϕ w punkcie \mathbf{r} .

Operator 'nabla' to wektorowy operator różniczkowy:

$$\nabla = \hat{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z} \quad (7.1.3)$$

i pełni rolę gradientu w pierwszym równaniu oraz źródłowości (dywergencji) w drugim, co formalnie wyrażone jest poprzez iloczyn skalarny tego operatora i wektora gęstości prądu.

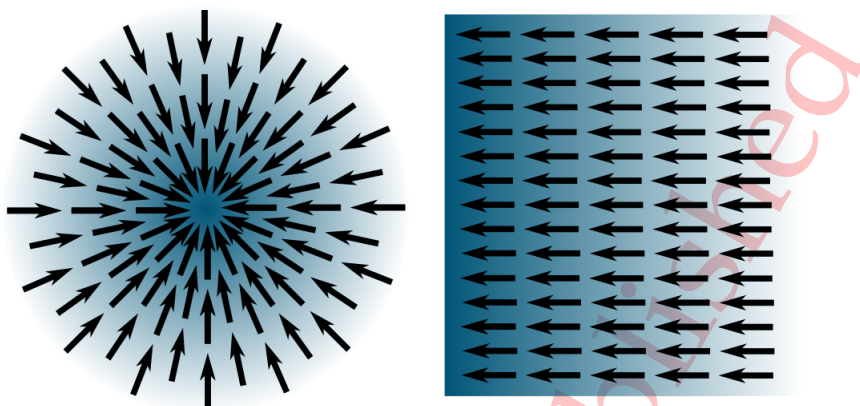
Zauważmy, że wszystkie wielkości występujące w powyższych równaniach mogą być w ogólności funkcjami położenia i czasu, jednak w następnym kroku założymy, że nie ma zmian w czasie (układ stacjonarny), i podstawimy równanie 7.1.1 do 7.1.2. W rezultacie otrzymujemy:

$$\nabla \cdot [D(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r})] = -S(\mathbf{r}) \quad (7.1.4)$$

Wielkości $S(\mathbf{r})$ i $\phi(\mathbf{r})$ mogą mieć różne znaczenia w zależności od rodzaju układu. W szczególności mogą być interpretowane odpowiednio jako źródło ciepła i temperatura. Wówczas współczynnik dyfuzji $D(\mathbf{r})$ ma sens przewodnictwa cieplnego.

Jest to eliptyczne równanie różniczkowe cząstkowe, które wraz z warunkami brzegowymi (wartość funkcji oraz/lub jej pochodnej na brzegu obszaru, a czasem także w jego wnętrzu), tworzy zagadnienie wartości brzegowych (BVP). Ciekawym i nieco zaskakującym jest spostrzeżenie, że przy stałym współczynniku dyfuzji równanie 7.1.4 przyjmuje postać równania Poissona! W tym projekcie dla uproszczenia rozważymy przypadek kwazi-jednowymiarowy (takie określenie oznacza, że chociaż układ jest 3-wymiarowy,

7.2 METODY NUMERYCZNE: METODA RÓŻNIC SKOŃCZONYCH



Rysunek 27: Przykłady gradientów (strzałki) funkcji skalarnej reprezentowanej przez skalę intensywności koloru.

wszystkie wielkości zmieniają się tylko w funkcji jednej współrzędnej przestrzennej). W naszym przypadku jest to dyfuzja ciepła przez ścianę, powiedzmy wzdłuż osi X , i wówczas równanie upraszcza się do:

$$-S(x) = \frac{d}{dx} \left(D(x) \frac{d\phi(x)}{dx} \right) \quad (7.1.5)$$

lub

$$-S(x) = D'(x) \frac{d\phi(x)}{dx} + D(x) \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} \quad (7.1.6)$$

ze znanymi wartościami funkcji ϕ na końcach przedziału: $\phi(x=0) = \phi_0$ i $\phi(x=L) = \phi_N$ (gdzie L jest grubością ściany). Założymy, że ściana po obu stronach jest w kontakcie z termostatami stabilizującymi temperaturę, tak że ϕ_0 oraz ϕ_N mają sens temperatur po obu stronach ściany. Dodatkowo założymy, że w ścianie nie ma źródeł ciepła, czyli funkcja $S(x) = 0$, a to z kolei oznacza, że rozkład temperatury w ścianie musi być monotoniczny, niezależnie od tego jaki jest rozkład przewodnictwa cieplnego.

7.2 METODY NUMERYCZNE: METODA RÓŻNIC SKOŃCZONYCH

Metoda różnic skończonych, algorytm eliminacji Gaussa z podstawieniem zwrotnym dla 3-diagonalnego układu równań

W tym projekcie zastosowana zostanie metoda różnic skończonych (*Finite Difference-FD*). Wprowadzamy regularną siatkę o parametrze h i dyskretyzujemy równanie różniczkowe, używając np. 3-punktowej formuły na pochod-

ne. W rozważanym przykładzie dyskretyzacja równania (7.1.6) prowadzi do postaci:

$$-S_i = D'_i \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h} + D_i \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{h^2} \quad (7.2.1)$$

lub

$$\left(D_i - \frac{h}{2}D'_i\right)\phi_{i-1} - 2D_i\phi_i + \left(D_i + \frac{h}{2}D'_i\right)\phi_{i+1} = -S_i h^2 \quad (7.2.2)$$

Jak widać, otrzymujemy układ równań liniowych, w którym niewiadomymi są wartości funkcji ϕ w punktach siatki. Tak więc metoda różnic skończonych przekształca równanie różniczkowe w układ równań liniowych. W naszym przypadku jest to trójdzielny układ postaci:

$$\begin{cases} A_i^- \phi_{i-1} + A_i^0 \phi_i + A_i^+ \phi_{i+1} = b_i \end{cases} \quad (7.2.3)$$

Zauważmy, że wartości brzegowe ϕ_0 and ϕ_N muszą być przeniesione na prawą stronę równań.

Aby rozwiązać ten układ, wykorzystamy bardzo efektywny algorytm eliminacji Gaussa z podstawieniem zwrotnym. Założymy, że rozwiązanie spełnia liniową jedno-krokową formułę rekurencyjną "w przód":

$$\phi_{i+1} = \alpha_i \phi_i + \beta_i \quad (7.2.4)$$

gdzie α_i i β_i są współczynnikami, które trzeba wyznaczyć.

Wstawiając taką postać rozwiązania do (7.2.3), otrzymujemy równania:

$$A_i^- (\alpha_i \phi_i + \beta_i) + A_i^0 \phi_i + A_i^+ \phi_{i-1} = b_i \quad (7.2.5)$$

które można rozwiązać ze względu na ϕ_i :

$$\phi_i = \gamma_i A_i^- \phi_{i-1} + \gamma_i (A_i^+ \beta_i - b_i) \quad (7.2.6)$$

wraz z

$$\gamma_i = -\frac{1}{A_i^0 + A_i^+ \alpha_i} \quad (7.2.7)$$

Porównując (7.2.4) z (7.2.6), otrzymujemy formuły rekurencyjne "w tył" na współczynniki α i β :

$$\alpha_{i-1} = \gamma_i A_i^- \quad (7.2.8)$$

$$\beta_{i-1} = \gamma_i (A_i^+ \beta_i - b_i) \quad (7.2.9)$$

Dalsza strategia jest następująca. Używamy formuł rekurencyjnych (7.2.8, 7.2.9), aby wyznaczyć α_i i β_i dla i zmieniającego się od $N - 2$ do 0. Początkowe wartości, które trzeba użyć to:

$$\alpha_{N-1} = 0, \beta_{N-1} = \phi_N \quad (7.2.10)$$

co gwarantuje poprawną wartość brzegową ϕ w prawej granicy przedziału. Znając wartości współczynników, możemy użyć formuły (7.2.4) "w przód", aby znaleźć rozwiązanie z wartością początkową ϕ_0 znaną z warunków brzegowych. W ten sposób znajdujemy rozwiązanie tylko poprzez dwukrotne zastosowanie rekurencji, czyli liczby operacji arytmetycznych rzędu N .

Zauważmy, że technika ta może być zastosowana do zagadnienia warunków brzegowych diskutowanego w Rozdz. 5 (Grawitacja wewnątrz gwiazdy). Na zaprezentowaną metodę rozwiązania 3-diagonalnego układu równań można popatrzeć jak na sprytny sposób "przeniesienia" informacji zawartej w jednym z warunków brzegowych na przeciwną stronę przedziału.

Na koniec powinniśmy odnieść się do przypadku równań różniczkowych cząstkowych w wielu wymiarach, w kontekście metody różnic skończonych. Zrobimy to na przykładzie eliptycznego równania różniczkowego Laplace'a:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi(x, y, z) = 0 \quad (7.2.11)$$

z warunkami brzegowymi w postaci wartości funkcji ϕ na brzegach obszaru oraz w pewnych miejscach w jego wnętrzu (typu Dirichleta) i/lub pochodnych funkcji ϕ na brzegach, w kierunkach normalnych do powierzchni brzegowych (typu von Neumana).

Aby skrócić formuły, ograniczymy dyskusję do przypadku 2D, ale zaprezentowane metody mają zastosowanie także do przypadku 3D. Tak więc, w pierwszym kroku równanie różniczkowe jest dyskretyzowane poprzez wprowadzenie regularnej siatki w dziedzinie zmiennych niezależnych w wybranym układzie współrzędnych, to znaczy operatory różniczkowe są przekształcane w operatory różnicowe z wykorzystaniem np. formuł 3-punktowych:

$$\frac{\phi_{i+1,j} + \phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j}}{h_x^2} + \frac{\phi_{i,j+1} + \phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j}}{h_y^2} = 0 \quad (7.2.12)$$

gdzie indeksy $i = 1, \dots, N_x, j = 1, \dots, N_y$ wskazują punkty siatki odpowiednio wzdłuż x i y , a N_x, N_y są liczbami punktów w tych kierunkach. Następnie, musimy odwzorować w sposób wzajemnie jednoznaczny podwójne indeksy na indeksy pojedyncze, np. $(i, j) \rightarrow k = i + N_y(j - 1)$. Teraz zbiór wartości $\{\phi_{i,j}\}$ staje się wektorem $\{\phi_k\}$, a równania 7.2.12 w sposób oczywisty ukazują się jako układ równań liniowych postaci:

$$\hat{A}\bar{\phi} = \bar{a} \quad (7.2.13)$$

gdzie wektor \bar{a} uformowany jest z wartości funkcji ϕ w punktach siatki, gdzie te wartości są znane z warunków brzegowych. W ten sposób problem redukuje się do zagadnienia odwrócenia macierzy \hat{A} :

$$\bar{\phi} = \hat{A}^{-1}\bar{a} \quad (7.2.14)$$

co wydaje się nietrywialną operacją, zważywszy, że macierz ta może być bardzo duża. Na przykład w 3D, przy siatce $100 \times 100 \times 100$ (która nie jest specjalnie gęsta) rząd macierzy jest już 10^6 . Jednakże dobrą wiadomością jest fakt, że są to tzw. macierze rzadkie, w których ogromna większość elementów ma wartość zero, i dla których wypracowano specjalne, efektywne metody składowania i efektywne algorytmy odwracania.

Trzeba wspomnieć, że istotnym mankamentem metody FD jest fakt, że kształt rozwarzanego obszaru, jak również wprowadzana siatka, muszą być dopasowane do wybranego układu współrzędnych. Ta niedogodność nie występuje w metodzie elementów skończonych dyskutowanej w następnym rozdziale.

7.3 ĆWICZENIA

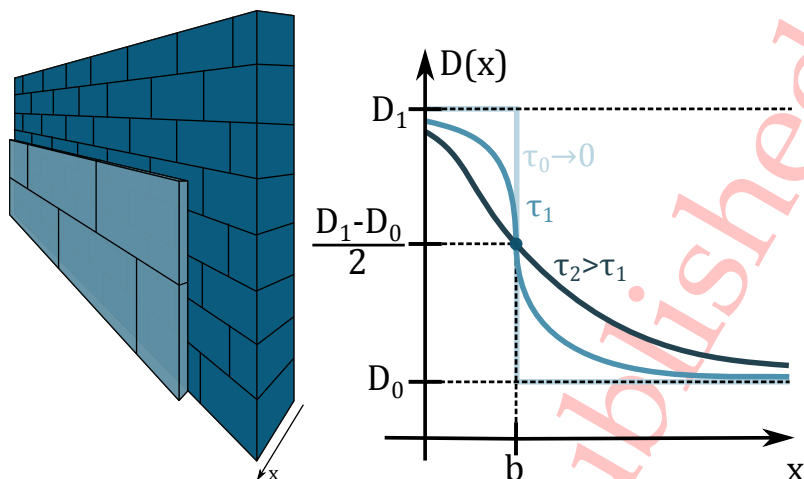
Obowiązkowe

1. Wykorzystując program FTABLE stablicuj kilka wybranych funkcji przewodnictwa cieplnego $D(x)$ oraz ich pochodnych $D'(x)$ (np. liniowa, paraboliczna, niemonotoniczna - typu sinus, etc.). W szczególności rozważ funkcję schodkową (typu Fermiego-Diraca), która emulowałaby ścianę zbudowaną z dwóch warstw: materiału o wysokim przewodnictwie cieplnym (mechanicznie wytrzymałym) i materiału o niskim przewodnictwie cieplnym (mechanicznie słabym), np. cegła i styropian. Funkcja schodkowa (typu Fermiego Diraca) ma postać:

$$D(x) = \frac{D_1}{1 + \exp(\frac{x-b}{\tau})} + D_0 \quad (7.3.1)$$

gdzie τ to parametr odpowiedzialny za rozmycie progu (dla τ zmiana jest gwałtowna), b oznacza współrzędną granicy między materiałami, $D_1 + D_0$ i D_0 to przewodnictwa materiałów odpowiednio o dużym i o małym przewodnictwie cieplnym. Wyznacz pochodną tej funkcji i stablicuj $D(x)$ i $D'(x)$.

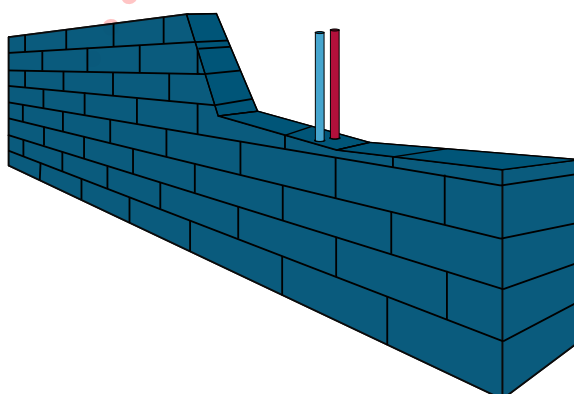
2. Przetestuj program DIFFUSION dla jednorodnego liniowego równania $\frac{d^2y}{dx^2} = 0$ ($D' = 0, D = 1$), dla różnych wartości brzegowych i parametru sieci.



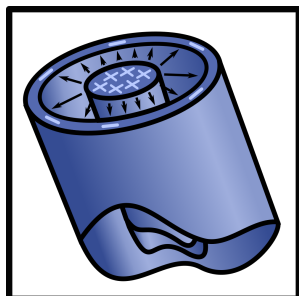
- Oblicz rozkłady temperatur w poprzek ściany dla przewodnictw cieplnych stabilizowanych w pierwszym ćwiczeniu. Czy rozkład temperatury jest zawsze monotoniczny (nawet przy niemonotonicznej funkcji $D(x)$)? Sprawdź jaki jest efekt odbicia funkcji $D(x)$ względem punktu środkowego ściany. Czy szybkość przepływu ciepła zmienia się przy takiej konwersji? Czy rozkład temperatury w poprzek ściany dla rozkładu schodkowego przewodnictwa jest taki jak się spodziewałeś? Co jest korzystniejsze z praktycznego punktu widzenia: umieścić warstwę styropianu wewnątrz, czy na zewnątrz budynku? (podaj argumenty.)

Zaawansowane

- Wprowadź wewnątrz ściany "źródła ciepła" poprzez zadanie dodatkowych warunków, w postaci wartości funkcji $\phi(x)$ w wybranych punktach. Obserwuj wpływ dodatkowych źródeł na rozkład temperatury i na szybkości przepływu ciepła.



...not to be published



8

PROJEKT: KONDENSATOR CYLINDRYCZNY

Wymagania wstępne: elektrostatyka, równania Poissona i Laplace'a.

Problemy z zakresu elektrostatyki opisywane równaniem Poissona, tzn. wyznaczanie potencjału elektrycznego przy zadanych warunkach brzegowych i rozkładem gęstości ładunku, mają swoje sformułowanie wariacyjne (jak wiele innych zagadnień fizycznych). W języku fizyki zasada ta mówi, że potencjał będący rozwiązaniem minimalizuje energię całkowitą układu (energię pola plus energię potencjalną ładunków). Istnieje jednak ścisły dowód równoważności dwóch sformułowań: równania różniczkowego i zasady wariacyjnej, a to oznacza, że zastosowanie zasady wariacyjnej może być rozszerzone na układy, gdzie nie ma zastosowania interpretacja energetyczna. Zasada wariacyjna stanowi punkt wyjścia dla ważnej i szeroko stosowanej klasy metod numerycznych: Elementów Skończonych (FE-Finite Elements), dyskutowanej w tym rozdziale. Wielką zaletą tych metod jest duża swoboda wyboru punktów tworzących siatkę w przestrzeni zmiennych niezależnych, który nie jest ograniczony wyborem układu współrzędnych, a także może być dopasowany do spodziewanego zachowania funkcji, której szukamy (gęstsza siatka w obszarach szybkich zmian). Dla uproszczenia rozważymy tutaj układ elektrostatyczny o wysokiej symetrii (osiowej), dla którego równania różniczkowe cząstkowe redukują się do jednego wymiaru. To pozwoli na zaprezentowanie idei przy jednoczesnym znacznym uproszczeniu procedur obliczeniowych. Jednakże, w Rozdz. ?? dyskusja zostanie rozszerzona do dwóch wymiarów (co będzie miało zastosowanie także dla 3D).

Rozważany system to kondensator cylindryczny składający się z dwóch współosiowych metalicznych cylindrów o różnych promieniach. Nie jest to problem czysto akademicki ponieważ istnieje dla niego ważne praktyczne odniesienie: koncentryczne kable transmisyjne (antenowe, telekomunikacyjne, etc.), których główną specyfikacją jest pojemność na jednostkę długości,

determinująca jego transmitancję czyli widmo transmisji (jedno z ćwiczeń będzie poświęcone obliczeniom pojemności).

8.1 ZASADA WARIACYJNA DLA UKŁADU ELEKTROSTATYCZNEGO

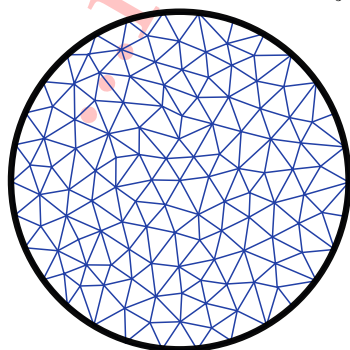
Równanie Poissona w 3D, zagadnienie wartości brzegowych - sformułowanie wariacyjne.

Układ elektrostatyczny opisywany jest równaniem Poissona:

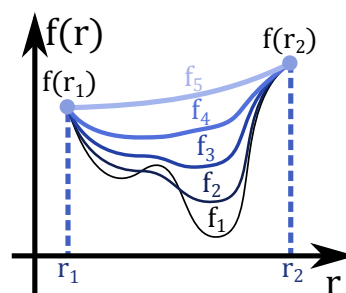
$$-\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = 4\pi\rho(\mathbf{r}) \quad (8.1.1)$$

które, dla danego rozkładu gęstości $\rho(\mathbf{r})$ oraz warunków brzegowych, tworzy zagadnienie wartości brzegowych dla eliptycznego równania różniczkowego cząstkowego (patrz Rozdz. 5), i którego rozwiązaniem jest potencjał jako funkcja współrzędnej przestrzennej $\phi(\mathbf{r})$. Istnieje jednakże alternatywne sformułowanie tego problemu w postaci **zasady wariacyjnej**. Można mianowicie formalnie udowodnić (patrz Rozdz. ??), że funkcja $\phi(\mathbf{r})$ będąca rozwiązaniem równania 8.1.1 minimalizuje funkcjonal:

$$F[\phi] = \int d^3\mathbf{r} \left[\frac{1}{2} (\nabla \phi(\mathbf{r}))^2 - 4\pi\rho(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \right] \quad (8.1.2)$$



Rysunek 30: Metoda elementów skończonych zastosowana dla koła



Rysunek 29: Zasada wariacyjna sprawdza kolejne funkcje, które minimalizują funkcjonal

W przypadku układu elektrostatycznego powyższy funkcjonal ma sens całkowitej energii, ale ponieważ dowód jest ogólny może on być potraktowany jako "pożyteczny funkcjonal" w innych przypadkach. Problem zatem zostaje zamieniony na zagadnienie wyznaczenia minimum funkcjonału (8.1.2). Przy jakiegokolwiek parametryzacji tego funkcjonału za pomocą zbioru parametrów $\{\alpha_i\}$ staje się on funkcją $F(\{\alpha_i\})$ i zagadnienie zamienia się na znalezienie minimum funkcji. W metodzie elementów skończonych (FE) funkcja ta jest reprezentowana przez jej wartości na węzłach pewnej sieci $\{\phi_i\}$ i wartości te stają się parametrami,

8.2 METODY NUMERYCZNE: METODA ELEMENTÓW SKOŃCZONYCH (FE)

które trzeba znaleźć. W przeciwieństwie do metody **różnic skończonych** ta siatka może być kształtowana w dowolny sposób (niezależny od wyboru układu współrzędnych), może być zagęszczana w obszarach, gdzie spodziewamy się szybkich zmian funkcji, może mieć także geometrię siatki trójkątnej zamiast prostokątnej.

Układ rozważany w tym projekcie posiada symetrię cylindryczną. Równanie Poissona przyjmuje postać (patrz Równ. 6.1.2 oraz dyskusję powyżej):

$$-4\pi\rho(r)r = \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \quad (8.1.3)$$

co wraz z warunkami brzegowymi $\phi_0 = \phi(r_1)$ i $\phi_N = \phi(r_2)$ prowadzi do zagadnienia wartości brzegowych (podobnego do diskutowanego w Rozdz. 5). Powyższe równanie jest również formalnie równoważne równaniu dyfuzji omawianemu w poprzednim rozdziale, a więc metoda tam omawiana może być zastosowana również i tutaj. Jednakże w tym projekcie zastosujemy zasadę wariacyjną. Odpowiedni funkcjonał we współrzędnych cylindrycznych ma postać:

$$F[\phi] = \int_{r_1}^{r_2} dr \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi(r)}{dr} \right)^2 - 4\pi\rho(r)\phi(r) \right] r \quad (8.1.4)$$

8.2 METODY NUMERYCZNE: METODA ELEMENTÓW SKOŃCZONYCH (FE)

Metoda elementów skończonych, metoda Gaussa-Seidla iteracyjnej minimalizacji.

Reprezentacja dyskretna funkcjonału 8.1.4 będzie oparta na najprostszym możliwym schemacie kwadratury numerycznej, metodzie prostokątów:

$$\int_{r_1}^{r_2} dr f(r) \approx h \sum_i^N \frac{1}{2} (f_i + f_{i-1}) \quad (8.2.1)$$

gdzie $\frac{1}{2}(f_i + f_{i-1})$ jest wartością funkcji w środku przedziału (r_i, r_{i-1}) przy liniowej aproksymacji funkcji wewnątrz przedziału.

Powyższa formuła, gdy zastosowana do 8.1.4 prowadzi do (wyprowadź):

$$F[\phi] \approx \frac{1}{2h} \sum_i^N (\phi_i - \phi_{i-1})^2 r_{i-\frac{1}{2}} - 2\pi h \sum_i^N (\phi_i \rho_i r_i + \phi_{i-1} \rho_{i-1} r_{i-1}) \quad (8.2.2)$$

gdzi $r_i = r_1 + ih$, $r_{i-1/2} = r_i - \frac{1}{2}h$, $h = (r_2 - r_1)/N$.

Warunek na minimum:

$$\frac{\partial F}{\partial \phi_i} = 0 \quad (8.2.3)$$

prorowadzi do zależności (wyprowadź):

$$\phi_{i+1}r_{i+\frac{1}{2}} - \phi_i(r_{i+\frac{1}{2}} + r_{i-\frac{1}{2}}) + \phi_{i-1}r_{i-\frac{1}{2}} + h^2 4\pi\rho_i r_i = 0 \quad (8.2.4)$$

Jest to punkt startowy procedury iteracyjnej minimalizacji Gaussa-Seidla. Wyprowadźmy z tej formuły zależność na ϕ_i :

$$\phi_i = \phi_{i+1} \frac{r_{i+\frac{1}{2}}}{2r_i} + \phi_{i-1} \frac{r_{i-\frac{1}{2}}}{2r_i} + 2\pi h^2 \rho_i \quad (8.2.5)$$

lub

$$\phi_i = \frac{1}{2}(\phi_{i+1} + \phi_{i-1}) + \frac{h}{4r_i}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) + 2\pi h^2 \rho_i \quad (8.2.6)$$

Strategia jest dalej następująca:

- i. zapostuluj początkową postać funkcji ϕ (np. liniowa pomiędzy $\phi_0 = \phi(r_1)$ i $\phi_N = \phi(r_2)$),
- ii. nowa wartość ϕ_i obliczana jest z (8.2.6) w każdym punkcie siatki r_i (oprócz wartości brzegowych); nazwiemy ten krok "przebiegiem",
- iii. dla nowego zestawu wartości $\{\phi_i\}$ (po przebiegu) obliczana jest wartość funkcjonału (8.2.2),
- iv. cała procedura jest powtarzana aż do ustabilizowania (8.2.2) tzn. spełnione jest kryterium, że w 3 kolejnych krokach wartość funkcjonału nie zmienia się bardziej niż ϵ .

Procedurę tę można jeszcze ulepszyć poprzez mieszanie wyniku przebiegu z wynikiem poprzednim. Robi się to z pomocą parametru mieszania ω , w następujący sposób:

$$\phi'_i = \phi_i^{old}(1 - \omega) + \phi_i^{new}\omega \quad (8.2.7)$$

gdzie ϕ_i^{new} to wynik ostatniego przebiegu, ϕ_i^{old} wynik przebiegu poprzedniego, a ϕ'_i są wartościami branyymi do następnego przebiegu.

Można formalnie udowodnić, że procedura jest zbieżna dla pewnego zakresu wartości ω , jednak tutaj sprawdzimy to w drodze eksperymentu numerycznego (jako jedno z ćwiczeń). We wszystkich ćwiczeniach (z wyjątkiem jednego) założymy także, że gęstość ładunku ρ jest zerowa w przestrzeni pomiędzy metalicznymi cylindrami, tylko wartości potencjału na cylindrach $\phi(r_1)$ i $\phi(r_2)$ są dane (wartości brzegowe), czyli de facto rozwiązujemy równanie Laplace'a.

8.3 ĆWICZENIA

Obowiązkowe

1. Przetestuj program CAPACITOR dla różnych wartości brzegowych i parametru siatki. Sprawdź zbieżność funkcjonału F ze względu na parametr siatki, znajdź największą wartość h , poniżej której funkcjonał F już się nie zmienia. Czy wartość ta zależy od warunków brzegowych?
2. Zbadaj efekt "mieszania". Znajdź zakres wartości parametru ω przy których procedura jest zbieżna, i znajdź wartość przy której relaksacja jest najszybsza. (Wskazówka: zmodyfikuj program, tak aby wypisywał do pliku wartości funkcjonału F jako funkcji numeru iteracji, i wykonuj rysunki tych funkcji dla różnych parametrów obliczeniowych).
3. Zmodyfikuj program, tak aby uwzględniał niezerowy rozkład gęstości w (8.2.6) i powtórz powyższe ćwiczenie dla pewnego modelowego rozkładu $\rho(r)$ własnego pomysłu. Znajdź optymalną wartość ω . Powtórz to dla 2-3 różnych modelowych gęstości.
4. Wykonaj w pełni zbieżne obliczenia potencjału dla wybranych warunków brzegowych i porównaj rezultaty z rozwiązaniami analitycznymi: $\varphi(r) = A \ln(r) + B$ (wartości stałych A, B należy wyznaczyć z warunków brzegowych rozwiązując układ dwóch równań liniowych).