Numerieke Methoden
3de Bachelor Fysica

Practicum 1: Oplossen van niet-lineaire vergelijkingen

Contact: jeroen.mulkers@uantwerpen.be U.305

1. In deze oefening gaan we op zoek naar nulpunten van de functie

$$f(x) = 1 + x^2 - \tan(x),$$

gebruik makende van de bisectie methode.

   (a) Haal bisect.m van Blackboard en overloop de code even.

   (b) Plot $1 + x^2$ en $\tan(x)$ in dezelfde figuur, let op snijpunten van de twee functies en de asymptoten van de tangens.

   (c) Selecteer een geschikt interval dat het eerste positieve nulpunt van $f(x)$ omvat en bepaal met bisect.m het nulpunt.

   (d) Hoeveel iteraties zijn er nodig om een nauwkeurigheid van 10^{-5} te bereiken? Bereken dit analytisch (zie cursus) en confirmeer numeriek. Waarvan is het nodige aantal iteraties afhankelijk?

   (e) Bepaal ook het negatieve nulpunt het dichtst bij nul.

2. De 'Regula Falsi'-methode. Net zoals in de bisectie-methode start men met een interval $[a, b]$ waarin een tekenverandering optreedt. In plaats van het middelste punt te nemen als volgende benadering voor het nulpunt neemt men in de 'Regula Falsi'-methode het snijpunt van de lijn door de punten $(a, f(a))$ en $b, f(b))$ met de x-as.

   (a) Pas bisect.m aan en implementeer de 'Regula Falsi'-methode. Verwijder de afschatting van de fout $(b - a)/2$ in de output aangezien deze niet meer klopt.

   (b) Gebruik regfals.m om de nulpunten van vorige oefening opnieuw te bepalen.

3. Implementeer de bisectie-methode op een recursieve manier (t.t.z. schrijf een functie die zichzelf steeds weer aanroept i.p.v. een loop te bevatten).

4. Pas nu de methode van Newton (zie BB voor newton.m) toe op de functie van oef. 1 en vergelijk de convergentie-snelheid hiervan met de bisectie methode.

5. De methode van Newton kan men gebruiken als de afgeleide van de functie gekend is. Een variant op de methode van Newton waarbij die afgeleide niet nodig is, is de 'secant'-methode. Deze methode start met 2 benaderingen voor het nulpunt α, zeg x_1 en x_2. Het snijpunt van de lijn door de punten $(x_1, f(x_1))$ en $(x_2, f(x_2))$ met de x-as levert de nieuwe benadering x_3, enz. Toon aan dat dit algoritme gegeven wordt door

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) \cdot \left[\frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \right], \text{ voor } n = 2, 3, 4, \ldots.$$

   Implementeer deze methode door newton.m aan te passen. Noem de nieuwe script-file secant.m. De methode van Newton vereist elke iteratie 2 evaluaties van een functie. Zorg ervoor dat in secant.m slechts 1 functieëvaluatie nodig is per iteratie.

   Pas nu de nieuwe methode secant.m toe op de functie van oef. 1. Test opnieuw de convergentiesnelheid en vergelijk met de andere methoden.

6. Gebruik nu ook eens het MATLAB commando fzero om de nulpunten van de functie van oef. 1 te bepalen. Geef het argument options mee, dat je eerst creëert via

   ≫ options= optimset('TolX',1.e-10,'Display','iter')

   Typ geen ; om de ingestelde opties te bekijken.

7. Gebruik de methode van Newton om de multipliciteit van het nulpunt in nul van de functie $f(x) = x \sin(x^2) \tan(x)$ te bepalen.

8. Pas de methode van Newton aan om het nulpunt met multipliciteit > 1 te bepalen. Noem het algoritme modnewton.m. Pas de methode toe op de functie van oef. 7. Vergelijk de convergentiesnelheid van de gewone methode van Newton met deze aangepaste versie.

9. De Schrödingervergelijking voor een ééndimensionale potentiaalput van eindige diepte is niet exact oplosbaar. De potentiaal voldoet aan

$$V = \begin{cases} V_0 & \text{voor } |x| > a, \\ 0 & \text{voor } |x| < a, \qquad (V_0 > 0). \end{cases}$$

De mogelijke waarden voor de energie $E = \hbar^2 k^2/2m$ vindt men door volgende transcendente vergelijkingen op te lossen:

$$\begin{aligned} ka \tan ka &= \kappa a && \text{(even oplossing)} \\ ka \cot ka &= -\kappa a && \text{(oneven oplossing)}, \end{aligned}$$

met

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

Visualiseer het probleem door linker- en rechterlid van beide transcendente vergelijkingen te plotten voor verschillende dieptes van de put. De snijpunten van deze curves geven de energieniveaus. Maak een figuur van de laagste energieniveaus als functie van de diepte van de put. Controleer of het resultaat convergeert naar de energieniveaus van een oneindig diepe potentiaalput, nl.

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m(2a)^2}.$$

Tip: het is steeds een goed idee om het aantal parameters te minimaliseren door gereduceerde eenheden te gebruiken. In deze oefening kan je er bv. vanuit gaan dat $\hbar^2/2m = 1$. De transcendente vergelijkingen kunnen nu nog verder vereenvoudigt worden als je energie uitdrukt met $z = a\sqrt{E}$ en de diepte van de put met $z_0 = a\sqrt{V_0}$. De energie niveaus in de oneindig diepe potentiaal put worden dan simpelweg $z_n = n\pi/2$.