

Zápočtové úlohy pro rok ZS 2013

Úloha 1 (iterace, derivace): Lambertova W-funkce

Definujme funkci

$$y(a) = a^{-a^{-a^{\cdots}}}.$$

Tuto funkci můžeme chápat jako pevný bod zobrazení

$$y \mapsto f(y) = a^{-y}.$$

- Napište proceduru, která pro zadané a najde co nejpřesnější hodnotu $y(a)$. Předpokládejte, že $e \geq a > \exp(-1/e) \simeq 0.6922$, a že zobrazení je kontrahující. Namalujte graf ukazující rychlost konvergence a porovnejte v něm rychlost konvergence přímých iterací a iterací urychlených metodou Aitken-Stefensona.
- Napište proceduru, která najde co nejpřesněji derivaci funkce $y(a)$ a diskutujte její přesnost.
- Procedury napište obecně a potom nalezněte co nejpřesněji $y(e)$ a $y'(e)$. Pro testování přesnosti výpočtu derivace můžete rovněž použít hodnotu $y'(1) = -1$.

Výstupem k odevzdání budou dva obrázky (rychlost konvergence iterací a analýza chyb nalezení derivace) a dvě čísla $y(e)$ a $y'(e)$.

Poznámka: Funkci $y(a)$ lze vyjádřit pomocí tzv. Lambertovy W-funkce $W(z)$, která je definována jako inverzní funkce k funkci $z(w) = w \exp(w)$. Z této definice si snadno odvodíte, že náš pevný bod je $y(a) = W(\ln a) / \ln a$. Lambertovu W-funkci lze obecně využít při řešení algebraických rovnic obsahujících neznámou lineárně a v exponentu.

Úloha 2 (integrace): Délka rovinné křivky

Uzavřená křivka v rovině je zadána parametricky pomocí funkcí $x(t)$, $y(t)$, $t \in \langle 0, 2\pi \rangle$. Nalezněte délku L této křivky. Postupujte následovně

- Nejdříve předpokládejte, že znáte přesně derivace souřadnic $dx(t) = x'(t)$, $dy(t) = y'(t)$ a použijete vzorec

$$L = \int_0^{2\pi} \sqrt{x'(t)^2 + y'(t)^2} dt.$$

Vyberte vhodnou metodu integrace a diskutujte konvergenci výsledků. Nakreslete graf závislosti chyby obdrženého výsledku na počtu integračních bodů (v logaritmické škále).

- Předpokládejte, že analytický vzorec pro derivace nemáte k dispozici. Aproximujte délku L délkou lomené čáry, která vznikne rozdělením intervalu $t \in \langle 0, 2\pi \rangle$ na N stejných dílů. Nakreslete stejný graf jako v přechodím bodě. Vysvětlete výsledky. Uměli byste zrychlit konvergenci?
- Program pro řešení napište obecně, ale výsledné testy proveďte pro křivku $x(t) = 1.5 \sin(2t)$, $y(t) = \cos(3t)$. Jaká je co nejpřesnější hodnota délky této křivky?

Výstupem k odevzdání budou dva obrázky rychlosti konvergence a číslo L .

Úloha 3 (integrace difro): Ryby a žraloci

Předpokládejte, že množství ryb F a žraloků S v uzavřeném ekosystému se vyvíjí v čase podle soustavy diferenciálních rovnic:

$$\begin{aligned}F'(t) &= (2 - S)F, \\S'(t) &= (F - 1)S.\end{aligned}$$

- Nakreslete průběh funkcí $F(t)$ a $S(t)$ pro $t \in \langle 0, 20 \rangle$. Předpokládejte, že v čase $t = 0$ je $F = 1.9$ a $S = 0.1$. Dejte si pozor, aby veškeré chyby vašeho výpočtu byly v rámci tloušťky čáry.
- Úlohu řešte alespoň dvěma různými metodami. Nakreslete pro obě metody závislost relativní chyby výsledku na velikosti kroku h v logaritmické škále. Ověřte, že řád přesnosti metody je takový jak předvídá teorie.
- Závislosti podle předchozího bodu udělejte pro chyby řešení v čase $t = 3$. Nalezněte hodnoty $F(t = 3)$ a $S(t = 3)$ co nejpřesněji dokážete (alespoň na 10 dekadických cifer).

Výstupem z úlohy budou dva obrázky obrázky podle prvních dvou bodů výše a dvě čísla podle třetího bodu.

Úloha 4 (Rombergova integrace): WKB aproximace

V kvantové mechanice se ukazuje, že v rámci WKB aproximace se dají vázané stavy nalézt pomocí podmínky

$$\oint p(x)dx = \gamma \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{E - V(x)} = 2\pi(n + \tfrac{1}{2}),$$

kde celková energie je E , $V(x)$ je energie potenciální a konstanta γ souvisí s hmotností systému. Body x_1 a x_2 (tzv. body obratu) jsou body v nichž nabývá integrand nulové hodnoty. Nalezněte analytický vzorec pro x_1 a x_2 pro tzv. Morseho potenciál $V(x) = e^{-2x} - 2e^{-x}$ a energie $E \in (-1, 0)$. Spočítejte integrál

$$I(E) = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{E - V(x)}$$

pomocí N -bodového lichoběžníkového pravidla I_N a znázorněte závislost chyby $|I_N - I_\infty|$ na N pro $N = 2, 4, 8, \dots, 1024$ v log/log škále. Jako přesnou hodnotu (pro účely tohoto grafu) vezměte $I_\infty = I_{1024}$. Porovnejte tuto závislost s odhadem $O(N^{-2})$ z Eulerovy-Maclaurinovy formule. Proč je závislost jiná? Najděte zkusmo správný odhad chování chyby $N^{-\alpha}$. Pokuste se zpřesnit výsledky pomocí metody Richardsonovy extrapolace

$$I_{2N}^{(1)} = \frac{2^\alpha I_{2N} - I_N}{2^\alpha - 1}.$$

Jaký je řád chyby α nového výsledku. Pokuste se zobecnit metodu Rombergovy integrace na tento případ. Najděte co nejpřesněji umíte hodnotu $I(E = -0.5)$.

Výstupem z úlohy bude graf rychlosti konvergence lichoběžníkového pravidla a jeho Richardsonovy extrapolace a jedno číslo (váše nejlepší aproximace I pro $E = -0.5$).

Úloha 5 (Gaussova integrace): WKB aproximace

Vypočtete integrál z předchozí úlohy pomocí Gaussovy-Čebyševovy kvadratury.

- Nejdříve si uvědomte, že integrand se v krajních bodech x_1, x_2 chová jako $\sqrt{x - x_1}$ a $\sqrt{x_2 - x}$ a má tedy v těchto bodech singulární derivaci. Singulární chování se napraví vynásobením výrazem $\sqrt{(x - x_1)(x_2 - x)}$. Proveďte lineární transformaci $x \mapsto y$, která převede integrand na interval $\langle -1, 1 \rangle$ a vypočtete integrál pomocí Gaussovy-Čebyševovy kvadratury

$$\int_{-1}^1 f(y) \frac{dy}{\sqrt{1 - y^2}} = \sum_i^N f(y_i) w_i.$$

- Studujte rychlost konvergence integrálu v závislosti na N .
- Namalujte graf závislosti $\gamma I(E)$ pro $E \in (-1, 0)$ a $\gamma = 16.65$ (odpovídá zhruba vibračním molekuly H_2). Odečtete z něj přibližně energii základního stavu (viz kvantovací podmínka v zadání předchozí úlohy).

Výstupem z úlohy bude graf chyby určení I v závislosti na N a graf funkce $\gamma I(E)$ s vyznačenou přibližnou polohou energie základního stavu. Zájemci mohou tuto energii zkusit najít numericky co nejpřesněji.

Poznámka: hodnoty vah pro Gaussovu-Čebyševovu kvadraturu jsou $w_i = \pi/N$ a uzly

$$y_i = \cos \frac{\pi(i - \frac{1}{2})}{N}.$$

Úloha 6 (integrace, kořeny funkce): Částice v kruhové jámě

Částice se pohybuje v nekonečně hluboké kruhové potenciálové jámě ve dvou dimenzích. Najděte energii $E = k^2$ prvních tří vázaných stavů částice s nulovým momentem hybnosti v této jámě řešením rovnice

$$\psi(a) = J_0(ka) = 0,$$

kde $a = 1$ je poloměr jámy. Besselova funkce $J_n(kr)$, kde $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ je radiální částí řešení Schrodingerovy rovnice ve dvou dimenzích a dá se spočíst z její integrální reprezentace

$$2\pi \cos \frac{n\pi}{2} J_n(z) = \int_{-\pi}^{\pi} \cos(z \cos x) \cos nx dx.$$

- Integrál pro nalezení Besselovy funkce spočtete pomocí lichoběžníkového pravidla. Otestujte rychlost konvergence integrálu a nakreslete graf chyby určení integrálu v log/log škále.
- Na základě analýzy rychlosti konvergence zvolte vhodný počet kvadrurních bodů, který použijete pro hledání kořenů Besselovy funkce aplikací vhodné numerické metody.
- Najděte co nejpřesněji hledané energie vázaných stavů.

Výstupem bude grafické znázornění konvergence integrálu v reprezentaci Besselovy funkce, graf Besselovy funkce $J_0(k)$ pro odhad polohy kořenů a číselné hodnoty energií tří nejnižších vázaných stavů.

Úloha 7 (integrace diferenciální rovnice): Chaotická dynamika

Řešte pohyb částice v silovém poli popsaném Hénonovým-Hailesovým potenciálem

$$V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + x^2y - \frac{1}{3}y^3.$$

Trajektorii částice naleznete řešením Hamiltonových pohybových rovnic pro hamiltonián

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + V(x, y).$$

- Vyberte vhodnou metodu pro řešení pohybových rovnic alespoň 4. řádu přesnosti. Nakreslete graf konvergence chyby řešení v čase $t = 1$ metody v závislosti na zmenšování integračního kroku v log/log škále. Místo konvergence řešení můžete studovat konvergenci energie, která by se pro přesné řešení měla zachovávat, ale numericky bude zatížena diskretizační a zaokrouhlovací chybou.
- Na základě předchozí analýzy vyberte vhodnou délku kroku a pokuste se nakreslit tzv. Poincarého řezy následujícím postupem. Pro počáteční podmínku $x = x_0 \in (0.3, 0.6)$, $y = 0$, $p_x = 0$, $p_y = 0.03$ integrujte trajektorii a do souboru ukládejte souřadnice (x, p_x, p_y) bodů, kde trajektorie protíná rovinu $y = 0$. Trajektorii integrujte tak dlouho, abyste měli dost bodů (stovky). Nakonec vykreslete body do rovinného grafu (například souřadnice x a p_x). Zkoušejte jak se změní obrázek pro různé volby počáteční podmínky x_0 .

Výsledkem úlohy bude graf demonstrující, že lokální diskretizační chyba vaší metody integrace je alespoň 4. řádu a výběr několika reprezentativních obrázků Poincarého řezů, ukazující změny charakteru dynamiky při různých volbách počáteční podmínky x_0 .

Úloha 8 (diagonalizace matic): Energie vázaných stavů metodou DVR

Energie vázaných stavů v jednorozměrné potenciálové jámě lze nalézt řešením Schrodingerovy rovnice, která má v bezrozměrných jednotkách tvar

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \gamma^2[E - V(x)]\psi(x) = 0.$$

Uvažujme Morseho potenciál $V(x)$ a hodnotu γ z úloh 4 a 5. Energie vázaných stavů najdeme diagonalizací operátoru

$$H = -\gamma^{-2}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

následující metodou. Nejdříve zvolíme vhodný interval $\langle a, b \rangle$ v němž očekáváme, že budou lokalizovány vázané stavy (například $a = -3$, $b = 5$) a definujeme bázi v prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí na tomto intervalu

$$\phi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{b-a}} \sin \frac{k\pi(x-a)}{b-a} \quad k = 1, 2, \dots$$

V této bázi vyjádříme maticové elementy hamiltoniánu $H_{kl} = \langle \phi_k | H | \phi_l \rangle$. Maticové elementy operátoru kinetické energie, můžeme spočítat přímo

$$\int_a^b \phi_k(x) \left[-\gamma^{-2} \frac{d^2}{dx^2} \right] \phi_l(x) dx = \gamma^{-2} \left[\frac{k\pi}{b-a} \right]^2 \delta_{kl}$$

a maticové elementy potenciální energie $V(x)$ numerickou integrací lichoběžníkovým pravidlem. Nalezněte energie prvních tří vázaných stavů diagonalizací matice H_{kl} vhodnou numerickou metodou. Jaká je chyba vámi obdržených hodnot? Pokuste se to zjistit systematickou změnou parametrů a , b , počtu kvadraturních bodů a počtu prvků báze (rozměr matice H). Výsledkem úlohy budou tři čísla a odhad jejich chyby.

Poznámka: Pro hlubší zájemce: Metoda DVR spočívá v určitém triku jak spočítat jinak maticové elementy potenciální energie $V(x)$. Nejdříve spočteme maticové elementy operátoru x . To se dá udělat analyticky. Jsou nenulové jen pro liché hodnoty $k + l$ a to

$$X_{kl} = \int x \phi_k(x) \phi_l(x) dx = -\frac{8kl(b-a)}{\pi^2(k+l)^2(k-l)^2}.$$

Matici X diagonalizujeme pomocí numerického nalezení podobnostní transformace $\lambda = Q^\dagger X Q$. V reprezentaci diagonalizující matici X snadno najdeme maticové elementy potenciálu $V(\lambda)$ poté přejdeme zpět do původní báze $V = QV(\lambda)Q^\dagger$. Pokud se rozhodnete implementovat tuto metodu, ušetříte mezikrok numerické integrace potenciálu a získáte přesnější hodnoty energií vázaných stavů. Stejná metoda se dá provést s jinou volbou báze, například vlastních funkcí vhodně zvoleného lineárního harmonického oscilátoru (je ovšem potřeba přepočítat hodnoty maticových elementů kinetické energie a operátoru X v této bázi). Tím se zbavíme také parametrů a , b a stačí studovat konvergenci výsledků s jediným parametrem, zvyšující se velikostí báze.

Úloha 9 (FFT): Výpočet Hilbertovy transformace

Hilbertova transformace funkce $f(x)$ je definována jako integrál ve smyslu hlavní hodnoty

$$g(y) = v.p. \int \frac{f(x)}{y - x} dx.$$

Napište program počítající Hilbertovu transformaci předem zadané funkce. Využijte toho, že Hilbertova transformace má tvar konvoluce s distribucí $v.p.1/x$ jejíž Fourierovu transformaci známe. Spočtete ji integrací v komplexní rovině, když si uvědomíte, že

$$v.p.\frac{1}{x} = \text{Re} \frac{1}{x + i\epsilon}.$$

Nejdříve otestujte program pro přímou a zpětnou transformaci tím, že pomocí Fourierovy transformace spočítáte derivaci nějaké funkce a nakonec spočtete Hilbertovu transformaci funkce $\theta(x)xe^{-x}$ ($\theta(x)$ je Heavysideova skoková funkce). Testujte závislost na volbě vzorkovací hustoty a intervalu na němž provádíte transformaci.

Úloha 10 (QR rozklad): Vlastní funkce harmonického oscilátoru

Vlnové funkce $\phi_n(x)$ stacionárních stavů kvantového harmonického oscilátoru popsaného hamiltoniánem

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$$

můžeme najít Gramm-Schmidtovou ortogonalizací funkcí $e^{-x^2/2}, xe^{-x^2/2}, x^2e^{-x^2/2}, x^3e^{-x^2/2}, \dots$. Tabelací těchto funkcí na ekvidistantní síti N bodů pokrývajících interval $\langle -a, a \rangle$, získáme obdélníkovou matici M . Navrhněte jak z této matice spočítat funkce $\phi_n(x)$ tabelované na stejné síti. Jak závisí přesnost získaných funkcí na konstantách N a a ? Vykreslete maximální chybu na dané síti pro různé volby parametru N a a pro funkci $\phi_3(x)$, jejíž analytická závislost je

$$\phi_3(x) = \frac{2z^3 - 3z}{\sqrt{2\sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2}$$

a pokuste se tyto závislosti vysvětlit.

Výstupem z úlohy bude graf funkcí $\phi_0(x)$, $\phi_3(x)$ a $\phi_{10}(x)$ a dále dva grafy: závislost maximální chyby $\max_i |\Delta\phi_n(x_i)|$ na N a závislost stejné veličiny na a (rozhodněte se, jestli škálovat osy grafu logaritmicky, nebo lineárně!).