Zápočtové úlohy pro rok LS 2015

Úloha 1: Rozpad stavu zachyceného v bariéře

(počáteční úloha pro Schrodingerovu rovnici - konečné diference)

Nechť je v čase $t = 0$ připravena částice ve stavu

$$\psi(x,0) = \sqrt[4]{\frac{2}{\pi}}\exp[-(x-1)^2].$$

Řešte časovou Schrödingerovu rovnici

$$i\partial_t\psi(x,t) = H\psi = -\tfrac{1}{2}\Delta_x\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

v potenciálovém poli

$$V(x) = (x^2-1)\exp(-x^2/4).$$

Integrací rovnice kontinuity pro tok hustoty pravděpodobnosti můžeme dostat zákon zachování

$$1 = p(T) + J_+(T) + J_-(T),$$

kde

$$p(T) = \int_{-a}^{a}|\psi|^2\,\mathrm{d}x\bigg|_{t=T} \qquad \text{a} \qquad J_\pm(T) = \pm\int_0^T 2\,\mathrm{Im}\,\psi^*\partial_x\psi\,\mathrm{d}t\bigg|_{x=\pm a}$$

je pravděpodobnost výskytu částice v intervalu $x \in \langle -a, a\rangle$ a pravděpodobnosti, že částice utekla z $x \in \langle -a, a\rangle$ pravou/levou hranicí. S pomocí těchto vztahů studujte únik částice ven z potenciálové bariéry.

Podrobnější instrukce:

- Navrhněte vhodnou diskretizaci problému a zvolte vhodné (stabilní) diferenční schéma k řešení časové Schrödingerovy rovnice. Úlohu řešte na intervalu $x \in \langle -25, 25\rangle$ a pro zamezení odrazu od koncových bodů přidejte k potenciálu komplexní absorbující část $V_{abs} = -i10^{-3}(|x|-8)^4$ pro $|x| > 8$.
- Nakreslete vlnovou funkci $\psi(x,t)$ pro několik časů z intervalu $t \in \langle 0, 5\rangle$ a diskutujte fyzikální chování systému. Porovnejte z chováním pro $V(x) = 0$ pro nějž znáte analytické řešení $|\psi|^2$.
- Spočtěte veličiny p, J_+, J_- pro $T = 1$ a $a = 7$. Diskutujte konvergenci těchto veličin při zjemňování sítě.
- Po nalezení správné diskretizace nakreslete závislost $p, J_\pm$ na čase T.

Výstupem k odevzdání budou obrázky vlnové funkce v několika časech, obrázek dokumentující konvergenci pravděpodobností, obrázky časové závislosti pravděpodobností.

Úloha 2: Metoda rozděleného propagátoru

(počáteční úloha pro Schrodingerovu rovnici)

Stejné úkoly jako pro úlohu 1, ale časovou Schrödingerovu rovnice řešte metodou rozděleného operátoru ("split-operator method"). Pro výpočet operátoru kinetické energie použijte proceduru pro diskrétní Fourierovu transformaci. Můžete použít hotovou proceduru pro FFT například z *Numerických receptů* nebo z knihovny `numpy`.

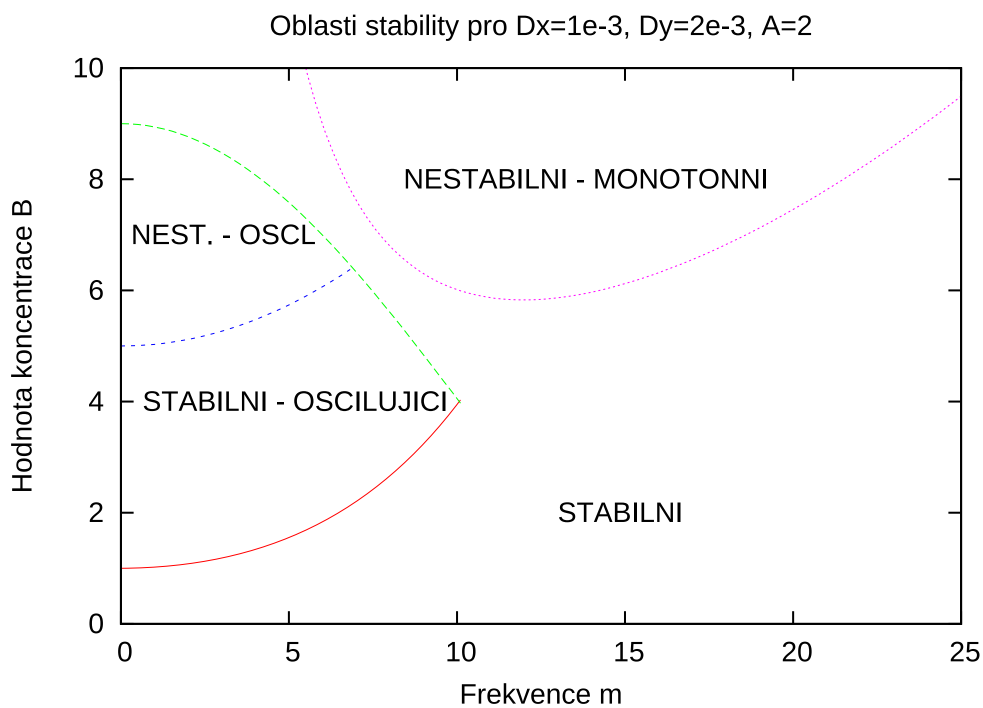
Úloha 3: Nelineární chemická dynamika v 1D

(řešení evolučních rovnic metodou sítí)

Na přednášce jsme si ukazovali model pro nelineární chemickou dynamiku. Pro jednu prostorovou dimenzi dostaneme soustavu parciálních diferenciálních rovnic parabolického typu

$$\partial_t X(r,t) = D_X \partial_{rr} X(r,t) + A - (B+1)X(r,t) + X(r,t)^2 Y(r,t), \tag{1}$$
$$\partial_t Y(r,t) = D_Y \partial_{rr} Y(r,t) + BX(r,t) - X(r,t)^2 Y(r,t), \tag{2}$$

kde X, Y jsou koncentrace meziproduktů a D_X, D_Y, A, B zadané konstanty (difůzní koeficienty a koncentrace reaktantů). Úlohu řešte na intervalu $r \in \langle 0, 1 \rangle$ s Neumannovou hraniční podmínkou. Parametry úlohy volte: $D_X = 0.001$, $D_X = 0.002$, $A = 2.0$. Při volbě počáteční hodnoty B se inspirujte následujícím diagramem stability: Diagram obsahuje oblasti stability triviál-



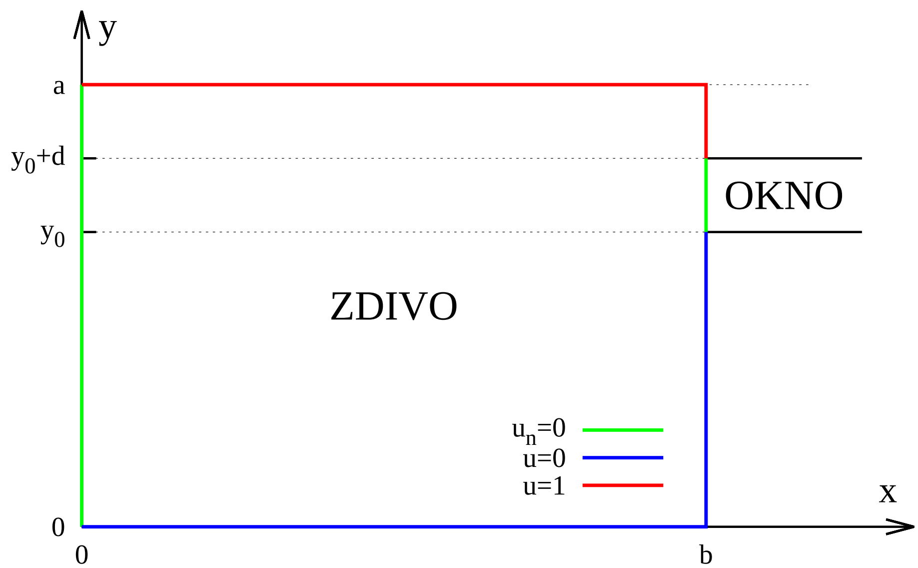
ního řešení $X = A$, $Y = B/A$, vůči malým harmonickým perturbacím $\cos(\pi m x)$ (pokud vás zajímají detaily, viz Koonin, kapitola 6). Počáteční podmínku volte ve tvaru triviálního řešení plus malá harmonická perturbace (s amplitudou asi 0.01-0.1). Pozorujte jak amplituda perturbace roste/klesá, podle toho, zda jste v nestabilní/stabilní oblasti parametrů. Pro odevzdání se zamyslete nad následujícím:

- Jaká je asi přesnost vašeho řešení? Dosáhli jste konvergence v prostorovém a časovém kroku?
- Podívejte se na výše uvedený graf a nalezněte stabilní řešení v němž klesá amplituda perturbace.
- Nalezněte nestabilní řešení. Rozumíte jeho chování s časem? Jaký je rozdíl mezi touto nestabilitou a nestabilitou explicitní metody?

Úloha 4 Optimální umístění okna

(okrajová úloha pro PDR)

Ve starém domě instalujeme nová okna. Jak daleko do tlusté zdi je třeba umístit okno, aby se minimalizovaly ztráty vedením tepla přes zeď.



Model problému: Řešte rovnici vedení tepla pro ustálený stav

$$\Delta u(x, y) = 0$$

na oblasti dané vnitřkem obdélníku $a \times b$ (viz obrázek) se smíšenou okrajovou podmínkou $u = 0$ na modré části hranice, $u = 1$ na červené části hranice a $\partial_n u = \partial_x u = 0$ (nulová normálová složka gradientu) na zelené části hranice. Tepelný tok stěnou nakonec spočteme jako

$$q = \int_0^b \partial_y u(x, y) \mathrm{d}x \bigg|_{y=l},$$

kde $l \in \langle y_0, y_0 + d \rangle$. Úlohu řešte pro hodnoty $a = 6d$, $b = 12d$, $d = 2$. Podrobnější pokyny:

- Navrhněte diskretizaci úlohy a diferenční schéma včetně zahrnutí okrajových podmínek.
- Pro jednu hodnotu y_0 vyřešte výslednou soustavu rovnic metodou SOR. Pokuste se najít optimální volbu relaxačního parametru.
- Z nalezených hodnot u spočtěte tok tepla q integrací lichoběžníkovým pravidlem.
- Studujte konvergenci hodnoty q v závislosti na velikosti diskretizačního kroku. Ověřte, že tok je nezávislý na hodnotě l.

Výstupem k odevzdání bude obrázek dokumentující rychlost konvergence q v závislosti na velikosti kroku, dále obrázek rozložení teploty pro jednu hodnotu y_0. Nakonec spočtěte q v závislosti na poloze okna y_0 (stačí provést výpočet pro cca 10-20 hodnot y_0).

Úloha 5: Obtékání překážky

(okrajová úloha - konečné diference, relaxační metody)

Najděte stacionární proudění kolem překážky. Rovnice pro proudovou a vírovou funkci řešte relaxační metodou. Detaily zadání viz níže. Pro zápočet mi stačí provést "step1-step5" tj. nalézt proudovou a vírovou funkci pro alespoň jednu hodnotu Reynoldsova čísla.

Literatura: Koonin: Computational Physics. Kapitola 6, project VI.

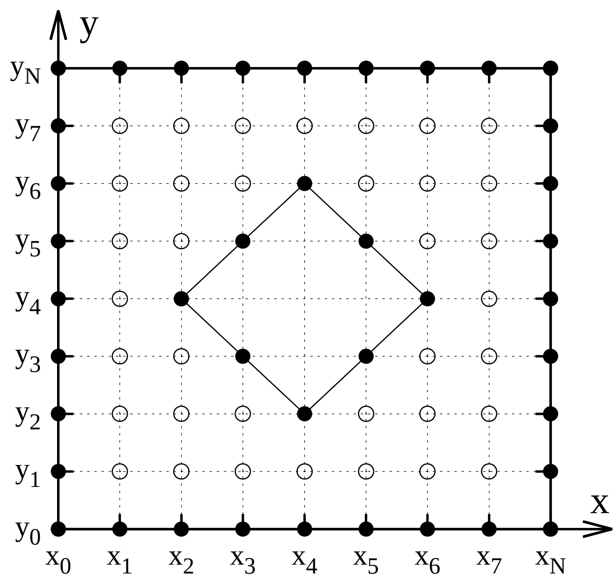
Úloha 6: Poissonova rovnice ve 2D metodou sdružených gradientů

(aplikace sdružených gradientů, na konečné diference)

Řešte Laplaceovu rovnici na čtverci $(x, y) \in \langle 0, 1\rangle \times \langle 0, 1\rangle$ s vykousnutým čtvercem uprostřed

$$\left|x - \tfrac{1}{2}\right| + \left|y - \tfrac{1}{2}\right| > \tfrac{1}{4}$$

a s okrajovou podmínkou $u = 0$ na hranici vnějšího čtverce a $u = 1$ na hranici vnitřního čtverce. Tuto úlohu lze chápat jako nalezení elektrického pole uvnitř kondenzátoru. Použitím Gaussovy věty nalezněte náboj na vnitřní elektrodě, tj. kapacitu kondenzátoru.



Podrobnější instrukce:

- Na čtverci definujte pravidelnou síť a napište si diferenční schéma odpovídající Laplaceově rovnici.
- Napište si vlastní proceduru pro řešení soustavy rovnic metodou sdružených gradientů. Proceduru napište tak, abyste nemuseli pro výpočet rezidua sestavovat soustavu rovnic, ale procházeli diferenční schéma přes všechny body sítě podobně jako při relaxačních metodách.
- Studujte rychlost konvergence pro různou hustotu sítě. Jako kritérium konvergence použijte velikost rezidua.
- Napište proceduru pro výpočet náboje na vnitřní elektrodě z Gaussovy věty integrací přes čtverec ležící celý uvnitř sítě. Budete potřebovat normálovou složku gradientu u. Rozmyslete si dobře polohu bodů z nichž budete počítat gradient a polohu integračních bodů.
- Studujte rychlost konvergence vypočtené hodnoty náboje při zjemňování sítě.

Výstupem z úlohy budou grafy rychlosti konvergence metody sdružených gradientů pro několik hodnot kroku sítě, obrázek výsledného pole u, graf dokumentující rychlost konvergence náboje při zjemňování sítě a výsledná hodnota kapacity kondenzátoru (včetně vašeho odhadu přesnosti obdrženého výsledku).

Úloha 7: Součet náhodných proměnných

(centrální limitní věta prakticky)

Na přednášce jsme si ukázali, že součtem dvou totožných náhodných proměnných x_0 a x_1 s rovnoměrným rozdělením na intervalu $\langle 0,1\rangle$ (tj. s rozdělovací funkcí $p(x_i) = \chi_{\langle 0,1\rangle}(x_i)$) dostaneme náhodnou proměnnou $y_2 = x_0 + x_1$ s rozdělením $p(y) = 1 - |y-1|$ na intervalu $\langle 0,2\rangle$. Obecně platí, že součet náhodné proměnné x_0 s rozdělovací funkcí $p_0(x)$ a náhodné proměnné x_1 s rozdělovací funkcí $p_1(x)$ má rozdělovací funkci danou konvolucí

$$p(y) = \int p_0(x)p_1(y-x)\mathrm{d}x \equiv p_0 * p_1.$$

Najděte pomocí tohoto vzorce rozdělovací funkci $p^{(N)}(y)$ pro součet N náhodných proměnných

$$s_N = x_0 + x_1 + ... + x_{N-1}$$

s rovnoměrným rozdělením na intervalu $\langle 0,1\rangle$ pro $N = 2,3$. Výsledné funkce se nazývají $B-$spliny a lze je také získat pomocí Cox-de Boorovy formule:

$$\begin{aligned} p^{(1)}(s) &= \chi_{\langle 0,1\rangle}(s), \\ p^{(N+1)}(s) &= \frac{s}{N}p^{(N)}(s) + \frac{N+1-s}{N}p^{(N)}(s-1). \end{aligned}$$

Pro $N = 2,3$ ověřte, že tato formule dá stejné výsledky jako konvoluce. Napište proceduru, která vypočte $p^{(N)}(x)$ pro libovolné N.

Nahodná proměnná s_N má stření hodnotu $\mu_s = N/2$ a rozptyl $\sigma_s^2 = N/12$. Po přenormování dostaneme náhodnou proměnnou

$$y_N = (s_N - N/2)\sqrt{12/N},$$

která podle centrální limitní věty konverguje ke gaussovské (normální) náhodné proměnné se střední hodnotou 0 a rozptylem 1. Napište vzorec pro rozdělovací funkci $\phi_N(x)$ náhodné proměnné y_N pomocí výše definovaných funkcí $p_N(x)$. Nakreslete grafy funkcí $\phi_N(x)$ pro $N = 3,5,12$ a pozorujte konvergenci k normální náhodné proměnné s Gaussovským rozdělením

$$\phi(x) = \exp(-x^2/2)/\sqrt{2\pi}.$$

Pro $N = 12$ vytvořte velký statistický soubor (cca milión hodnot nebo více) a ověřte jak histogram tohoto souboru odpovídá teoretické křivce $\phi_{12}(x)$ a jak se liší od normálního rozdělení $\phi(x)$. Spočtěte μ a σ pro tento statistický soubor.

Výstupy: Grafy funkcí $p_2(x)$ a $p_3(x)$. Společný graf funkcí $\phi_N(x)$ a $\phi(x)$ pro $N = 3,5,12$ v lineární a logaritmické škále. Výsledky pro statistický soubor: střední hodnota, rozptyl a graf srovnání histogramu s $\phi(x)$ a $\phi_{12}(x)$.

Úloha 8: Difúzní Monte Carlo metoda pro základní stav

(metoda difúzní Monte Carlo)

Otestujte metodu difúzního MC pro nalezení energie základního stavu harmonického oscilátoru s Hamiltoniánem

$$H = \tfrac{1}{2}[-\partial_{xx} + x^2].$$

Jako startovací vlnovou funkci použijte

$$\phi(x) = \exp(-\alpha x^2)$$

a nalezněte vzorce pro funkce $\epsilon(x)$ a $D(x)$ pro tuto volbu. Veličiny odvoďte obecně a finální MC simulaci proveďte pro $\alpha = 1$. Diskutujte chybu nalezené energie základního stavu a jak závisí na počtu bodů statistického souboru a na délce integrace. Program napište tak, aby bylo snadné vyměnit počáteční odhad vlnové funkce a funkce ϵ a D.

Literatura: Koonin: Computational Physics. Kapitola 8, project VIII.

V projektu je složitější systém - molekula H_2. Na zápočet stačí výše uvedená zjednodušená varianta pro harmonický oscilátor.