

Zápočtové úlohy pro rok ZS 2017

Úloha 1: Částice v kruhové potenciálové jámě

(integrace, kořeny funkce)

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

$$J_0(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(z \cos x) dx.$$

- 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 včetně vašeho odhadu jak přesně jste je spočetli.

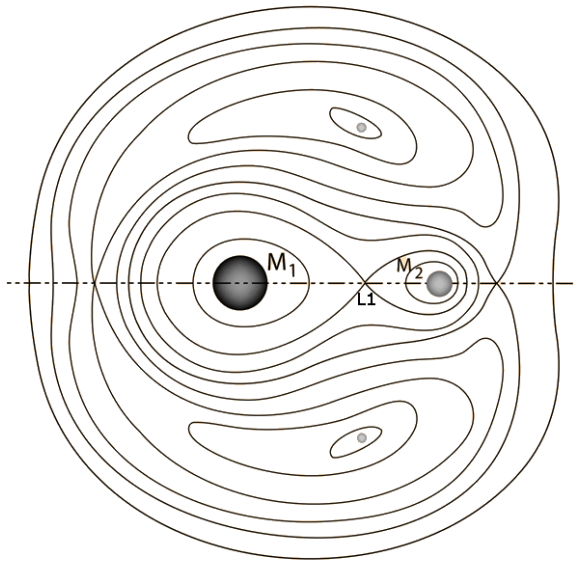
Úloha 2: Obvod Rocheova laloku v ekvatoriální rovině

(numerické řešení rovnic, analýza chyby, extrapolace)

V popisu dynamiky dvojhvězdných systémů je definován Rocheův lalok jako oblast prostoru kolem hvězdy 1, kterou lze zaplnit plynem, bez toho, aby přetékal na hvězdu 2. Tato oblast je ohraničena ekvipotenciální plochou v systému korotujícím se vzájemně se obíhajícími hvězdami, na níž je potenciál roven potenciálu v Lagrangeově bodě L_1 (bod kde se vyrovnávají gravitační síly obou těles a odstředivá síla). Pro tuto úlohu se omezíme na rovinu v níž obíhají obě hvězdy po kruhové dráze. V této rovině nalezněte čáru ohraničující tento lalok a spočtete její délku. Počátek souřadného systému položte do hvězdy 1 a osa x nechť směřuje do hvězdy 2. Délky budeme měřit v jednotkách daných vzdáleností obou hvězd R . Podrobnější instrukce:

- Najděte polohu bodu L_1 (viz rovnice vedle obrázku) a hodnotu potenciálu V_L v tomto bodě.
- Pro hodnoty $\theta = 2\pi n/N$, $n = 0, 1, \dots, N$ nalezněte body $x_n = r \cos \theta$, $y_n = r \sin \theta$ na hledané ekvipotenciální ploše. Body hledejte pro fixní θ řešením rovnice $V(r) = V_L$ vámi zvolenou metodou. Pokuste se najít hodnoty x, y s přesností blízkou strojovému ϵ .
- Spočtete délku D_N lomené čáry $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$. Studujte konvergenci této hodnoty pro $N \rightarrow \infty$. Pokuste se identifikovat bod, kde dochází k rovnováze mezi zaokrouhlovací a diskretizační chybou.
- Pokuste se přesnost metody zlepšit například vhodnou extrapolací diskretizační chyby.

Výstupem k odevzdání bude obrázek lomené čáry $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$, dále obrázek dokumentující konvergenci D_N , z nějž bude vidět řád diskretizační chyby a nakonec co nejpřesnější hodnota $D = \lim_{N \rightarrow \infty} D_N$.



Rovnice pro určení souřadnice x_L Lagrangeova bodu L_1 je dána rovnováhou sil:

$$x_L - m_2 + \frac{m_2}{(1 - x_L)^2} - \frac{m_1}{x_L^2} = 0.$$

Kde $m_1 = M_1/M$ a $m_2 = M_2/M$ jsou hmotnosti obou složek v jednotkách celkové hmotnosti $M = M_1 + M_2$ dvojhvězdy. Gravitační potenciál (v jednotkách $\kappa M/R$) v korotujícím systému (včetně odstředivé síly) je

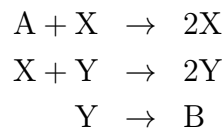
$$V(x, y) = -\frac{m_1}{r} - \frac{m_2}{r_2} - \frac{1}{2}r_0^2,$$

kde $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $r_2 = \sqrt{r^2 - 2r \cos \theta + 1}$ a $r_0 = \sqrt{r^2 - 2m_2 r \cos \theta + m_2^2}$ jsou vzdálenosti bodu (x, y) od hvězdy 1, hvězdy 2 a od těžiště dvojhvězdného systému (tj. středu rotace).

Úloha 3: Model oscilující chemické reakce

(řešení obyčejných diferenciálních rovnic)

V dnešní době je známo několik tzv. chemických oscilátorů (doporučuji vyhledat „chemical oscillator“ na youtube), což směs látek, v níž dochází k jisté množině chemických reakcí, které vedou k oscilacím koncentrace meziproductů. V době svého objevu to vedlo k nedůvěře a odmítnutí (viz heslo *Belousov-Zhabotinsky reaction* na anglické wikipedii), ale dnes existují jednoduché teoretické modely, které takové chování vysvětlují. Jeden takový jednoduchý model si zkusíme prozkoumat. V našem modelu (Lotka-Volterra model) se látka A mění postupně na látku B, přičemž vznikají meziproducty X a Y podle schématu



Označíme-li k_1 , k_2 a k_3 reakční rychlosti těchto reakcí, dostaneme pro časové závislosti koncentrace A , X , Y a B soustavu diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}A &= -k_1AX, & \frac{d}{d\tau}a &= -\kappa ax, \\ \frac{d}{dt}X &= k_1AX - k_2XY, & \frac{d}{d\tau}x &= \kappa ax - xy, \\ \frac{d}{dt}Y &= k_2XY - k_3Y, & \frac{d}{d\tau}y &= xy - y, \\ \frac{d}{dt}B &= k_3Y, & \frac{d}{d\tau}b &= y.\end{aligned}$$

V pravém sloupci jsme rovnice přepsali do bezrozměrných veličin $\tau = tk_3$, $b = B/A_0$, $y = Y/A_0$, $x = k_2X/k_3$ a $\kappa = k_1/k_2$, přičemž A_0 je počáteční koncentrace látky A. Řešte tyto rovnice numericky pro $\kappa = 0.002$ a počáteční podmínku $a = 498.4$, $x = 1.5$, $y = 0.1$, $b = 0$. Podrobněji:

- Napište proceduru pro integraci dané soustavy diferenciálních rovnic s řádem přesnosti 4. řádu. Ověřte konvergenci výsledků v závislosti na délce kroku pro výsledek ve fixním čase $t = 100$ a dále ověřte, že veličina $a + x + b + y$ se zachovává.
- Nakreslete $a(t)$ a $b(t)$ do jednoho obrázku a nalezněte hodnotu času t , kdy se vyrovná koncentrace reaktantů a produktů $a(t) = b(t)$. Odhadněte jak přesně jste tento čas určili.
- Nakreslete koncentrace meziproductů $x(t)$ a $y(t)$ a určete periodu jejich oscilací. Odhadněte jaká je přibližně vaše přesnost určení této periody?

Rozmyslete si, že oscilace fungují jako jakási „chemická pumpa“. Část cyklu s vysokým x vede ke zvýšené konzumaci reaktantu A a část cyklu s vysokým y vede ke zvýšené tvorbě produktu B.

Výstupem budou tři obrázky (rychlost konvergence, časová závislost $a(t)$, $b(t)$ a časová závislost meziproductů) a dvě čísla (čas vyrovnání koncentrací a perioda oscilací).

Úloha 4: WKB aproximace

(modifikace Rombergovy integrace)

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

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

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 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 (vaše nejlepší aproximace I pro $E = -0.5$).

Úloha 5: Ještě jednou WKB aproximace

(Gaussova-Čebyševova kvadratura)

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 $2\gamma I(E)$ pro $E \in (-1, 0)$ pro $\gamma = 16.65$ (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 $2\gamma I(E)$ 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 jsou dány vzorcem

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

Úloha 6: Ortogonální polynomy

(QR-faktorizace, integrace)

Napište vlastní proceduru pro provedení QR faktorizace (modifikovanou Gramovou-Schmidtovou nebo Householderovou metodou) a otestujte, že správně funguje, tj. že pro náhodně zvolenou matici dostanete faktory, z nichž jeden je ortogonální a druhý trojúhelníková matice a že součin těchto matic se jen málo (zaokrouhlovací chyby!) liší od původní matice. Aplikujte program na Vandermodeho matici

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^N \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & x_M & x_M^2 & \dots & x_M^N \end{pmatrix},$$

jejíž Gramovou-Schmidtovou ortogonalizací dostanete Legendrovy polynomy (sloupce matice Q).

- Body x_0, \dots, x_M volte tak, aby pokryly rovnoměrně interval $\langle -1, 1 \rangle$ s krokem 0.02 (tj. $M = 101$). Nakreslete získané polynomy $P_l(x)$ pro $l = 0, 1, \dots, 5$, přičemž je normujte tak, aby $P_l(1) = 1$.
- Napište funkci, která alternativně vypočte tyto polynomy s použitím Bonnetova vzorce

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$$

a nakreslete výsledek do stejného grafu.

- Diskutujte rozdíly výsledků obou metod: Jak se změní pokud volíme $M = 1001$? Jak souvisí tento rozdíl s chybou kvadraturního vzorce? Modifikujte Vandermodeho matici tak, abyste zmenšili chybu polynomů nalezených QR faktorizací.

Nápověda: Ortogonalita sloupců v matici Q neodpovídá přesně ortogonalitě polynomů ve smyslu L_2 skalárního součinu. Porovnejte s vzorcem pro kvadraturu lichoběžníkovým pravidlem.

Úloha 7: Chaotická dynamika

(integrace soustavy obyčejných diferenciálních rovnic)

Řešte pohyb částice s hmotností $m = 1$ 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: Energie vázaných stavů metodou DVR

(*diagonalizace matic*)

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. Naleznete energie prvních tří vázaných stavů diagonalizací matice H_{kl} vhodnou numerickou metodou. Jaká je chyba vámi obdržných 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 (modifikace postupu): 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 matice 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: Statistika chyb Gaussovy eliminace

(řešení soustav rovnic, podmíněnost matice)

Z přednášky víte, že řešení soustavy rovnic

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b},$$

kde A je zadaná matice $N \times N$, \mathbf{b} zadaný vektor a \mathbf{x} hledaný vektor řešení, je vždy zatíženo zaokrouhlovací chybou, jejíž velikost závisí na použité metodě a na podmíněnosti matice.

- Napište proceduru po řešení soustavy rovnic Gaussovou eliminací bez pivotace.
- Napište druhou proceduru s řádkovou pivotací.
- Pro zadané N generujte náhodnou matici A s maticovými elementy $a_{ij} \in \langle -1, 1 \rangle$ dále náhodný vektor \mathbf{x}_0 a jejich vynásobením vytvořte pravou stranu $\mathbf{b} = A\mathbf{x}_0$.
- Nyní řešte soustavu $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ a stanovte chybu řešení $\epsilon = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|$. Tento numerický experiment opakujte mnoho (> 100) krát a nakreslete sloupcový diagram četnosti výskytu chyby $e > 1$; $e \in \langle 10^k, 10^{k-1} \rangle$ pro $k = 0, -1, -2, \dots, -15$ a $e < 10^{-16}$

Výstupy: Sloupcové diagramy pro Gaussovu eliminaci s a bez pivotace pro $N = 10, 50, 100, 200$.

Úloha 10: Singulární hodnoty náhodných matic

(*diagonalizace matic, SVD*)

- Naprogramujte vlastní proceduru pro diagonalizaci reálné symetrické matice. Navrhněte vhodných způsob jak otestovat, že procedura správně funguje.
- Použijte tuto proceduru k nalezení singulárních hodnot čtvercové matice A diagonalizací pomocné matice

$$\left(\begin{array}{c|c} 0 & A \\ \hline A^\dagger & 0 \end{array} \right)$$

- Generujte náhodnou matici rozměru $N \times N$ s celočíselnými prvky $a_{ij} \in \{-99, -98, -97, \dots, 99\}$ a určete její singulární hodnoty σ_i
- Opakujte tento numerický experiment mnohokrát (> 100) a najděte sloupcový diagram rozdělení čísel podmíněnost pro tuto sadu matic, tj. zjistěte kolikrát se vyskytlo číslo podmíněnosti z intervalu $\kappa(A) \in \langle 10^k, 10^{k+1} \rangle$ pro $k = 0, 1, \dots, 15$.

Výstupy: Sloupcové diagramy pro čísla podmíněnosti pro $N = 10, 30, 100$.

Úloha 11: Výpočet Hilbertovy transformace

(využití FFT pro výpočet konvoluce)

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 (můžete si ji spočítat integrací v komplexní rovině, když si uvědomíte, že

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

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.